

2041-0030 РУКОВОДСТВО ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ

QSight 225MD & Simplicity 3QMD

Версия программного обеспечения 2.0

CE IVD

2041-9070-04
Февраль 2022 г.

PerkinElmer

ЭЛЕКТРОННАЯ КОПИЯ ОФОРМЛЕНА ЦЕНТРОМ ИСПЫТАНИЙ И РЕГИСТРАЦИИ МЕДИЦИНСКИХ ИЗДЕЛИЙ

РУКОВОДСТВО ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ

«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии»

Разработчик:
Wallac Oy (Валлак Ою)
Mustionkatu 6, FI-20750, Turku, Finland
(Мустионкату 6, FI-20750, Турку, Финляндия)
Тел: 358-(0)2-267 8111
Факс: 358-(0)2-267 8357

Наименование и адрес места производства:
Wallac Oy (Валлак Ою),
Mustionkatu 6, FI-20750, Turku, Finland
Мустионкату 6, FI-20750, Турку, Финляндия)

Официальный производитель:
Wallac Oy (Валлак Ою)
Mustionkatu 6, FI-20750, Turku, Finland
(Мустионкату 6, FI-20750, Турку, Финляндия)
Тел: 358-(0)2-267 8111
Факс: 358-(0)2-267 8357

Уполномоченный представитель в Российской Федерации
Акционерное общество «ПРИБОРЫ»
109028, г. Москва, Певческий пер., д. 4, стр. 1, помещ. I, комната 10
Телефон/факс: (495) 937-45-94 / (495) 937-45-92
Адрес электронной почты: info@pribori.com

Утверждено:
Полное имя: Леонид Николаевич Ефимов
Должность: Генеральный директор
Компания: Акционерное общество «ПРИБОРЫ»
Подпись:
Дата:
Печать:

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Содержание

Вступление ... 4
Использование данного руководства ... 4
Условные обозначения ... 4
Гарантийные условия ... 5
Обращение в центр обслуживания и технической поддержки ... 5
Список используемых символов ... 8
Предупреждения и меры предосторожности ... 10
Знаки безопасности на масс-спектрометре ... 11
Опасности ... 16
Требования к лабораторным условиям ... 20
Валидация и контроль качества ... 21
Перемещение прибора ... 21
Соответствие нормативным требованиям ... 22
Обзор системы ... 23
Обзор масс-спектрометра QSight 225MD ... 23
Компоновка прибора, основные компоненты и подключения ... 24
Технические характеристики системы ... 29
Обзор насоса для УВЭЖХ QSight MD ... 30
Обзор колоночного термостата QSight MD ... 33
Обзор Автосемплера для УВЭЖХ QSight MD ... 34
Работа программного обеспечения ... 38
Работа программного обеспечения ... 38
Разработка метода ... 50
Управление лентой при разработке метода ... 50
Ссылка на программное обеспечение для разработки метода ... 52
Разработка метода и оптимизация соединений ... 56
Ручная оптимизация источников ... 67
Разработка метода ЖХ ... 82
Управление лентой меню метода ЖХ ... 82
Работа с методами ЖХ ... 82
Запуск серий ... 92
Элементы управления ленты меню Создания списка серий и Очередь сбора данных серии ... 92
Создание и запуск серий ... 94
Работа с Batch Acquisition Queue (Очередь сбора данных серии) ... 102
Очистка серий ... 110
Запуск сбора данных ... 110
Количественная оценка данных и обработка результатов ... 116
Обработка количественных данных ... 116
Руководство по программному обеспечению Редактора методов количественного анализа ... 116

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Работа с методами количественного анализа 124
Руководство по программному обеспечению Обработчика результатов 129
Обработка результатов 133
Создание отчетов и экспорт результатов 135
Просмотр, рецензирование и построение графиков данных 137
Элементы управления ленты меню DataViewer (Средство просмотра данных) 137
Функции управления графиком DataViewer (Средство просмотра данных) 139
Графический просмотр результатов в DataViewers (Средство просмотра данных) 141
Проведение планового технического обслуживания 164
Порядок технического обслуживания масс-спектрометра 164
Запуск и выключение системы 164
Снятие и повторная установка зондов 165
Замена иглы зонда 168
Запуск программы AutoDV 176
Запуск процедуры автокалибровки 180
График технического обслуживания 186
Процедура технического обслуживания Автосемплера УВЭЖХ QSight MD 186
Промывка шприца и заправка инструмента ЖХ 188
Изменение уровня доступа 188
Замена иглы шприца 190
Замена шприца 195
График технического обслуживания 200
Процедуры технического обслуживания насоса для УВЭЖХ QSight MD 201
График технического обслуживания 205
Процедуры технического обслуживания колоночного термостата QSight MD 205
Конфигурации шлангов 207
Обзор 207
От насоса к Автосемплеру 207
От Автосемплера к колоночному термостату 208
Разделяющий клапан 209
Подключения к масс-спектрометру QSight 210
Только проточно-инжекционные анализы 211
Ввод ЖХ через две колонки 212
Ввод ЖХ через одну колонку 212
Ввод ЖХ через несколько колонок 213
Устранение неполадок 215
Выключение и перезапуск системы 215
Устранение сбоев в работе в результате электростатического разряда 215
Сообщения об ошибках 215
Папки и алгоритмы 217
Структура папок 217
Алгоритмы 218

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Глоссарий 229

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Вступление

Использование данного руководства

Данное руководство пользователя содержит информацию, необходимую для эксплуатации и обслуживания медицинского изделия «Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии».

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 скрининга QSight, включая фотографии и описания областей работы прибора, с которыми вы столкнетесь во время обычной работы.
- Работа программного обеспечения: описывает особенности программного обеспечения Simplicity 3Q MD.
- Разработка методов МС: содержит описания функций и основные рабочие процессы для настройки методов МС и управления масс-спектрометром.
- Работа с методами ЖХ: 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 данных).
- 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.
- Приложение

Условные обозначения

Во всей системной документации используются приведенные ниже условные обозначения:

Предупреждение: предупреждение указывает на опасную ситуацию или операцию, которая может привести к серьезным телесным повреждениям или смерти персонала или пациента, если ее не избежать. Соблюдайте все установленные меры предосторожности.

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

Примечание: примечание обозначает важную информацию о процессе или описании и предупреждает пользователей о ключевых моментах, не связанных с травмированием персонала.

Обратите внимание, что в случаях, где существует конкретная опасность или предупреждение, например, возможность поражения электрическим током или ожога, этот символ заменяет стандартный восклицательный знак в предостережениях и предупреждениях.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Гарантийные условия

Производитель гарантирует безопасность медицинского изделия, отсутствие неприемлемого уровня риска причинения вреда жизни и здоровью человека, а также вреда окружающей среде при целевом использовании медицинского изделия в условиях, оговоренных производителем.

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 Oy (Валлак Ою) гарантирует, что данный прибор не имеет дефектов материалов и изготовления.

В течение гарантийного срока на прибор компания Wallac Oy (Валлак Ою) предоставит детали и рабочую силу для устранения дефектов материалов и изготовления.

ПРИМЕЧАНИЕ: Гарантия на этот прибор не распространяется на необходимое периодическое техническое обслуживание («ТО»), стоимость и расходы на которое должен нести покупатель или арендатор. **Невыполнение требуемого ТО влечет за собой аннулирование гарантии.** Компания PerkinElmer и уполномоченные представители могут выполнить ТО. За дополнительной информацией о ТО обращайтесь к уполномоченному представителю.

Уведомление о неправильном использовании оборудования

ВНИМАНИЕ! Изменение или модификация данного медицинского изделия, не четко утвержденные компанией Wallac Oy (Валлак Ою), Финляндия явным образом, могут привести к нарушению соответствия требованиям и лишить пользователя права на эксплуатацию оборудования.

ВНИМАНИЕ! Компания Wallac Oy (Валлак Ою), Финляндия не несет ответственности за изменения или модификации, не четко утвержденные стороной, которая отвечает за обеспечение соответствия требованиям.
Подобные изменения могут лишить пользователя права на эксплуатацию оборудования.

Обращение в центр обслуживания и технической поддержки

В этом руководстве содержится информация о процедурах для различных задач и ситуаций, связанных с выполняемыми пользователем операциями и обслуживанием системы. Все задачи, процедуры и необходимые виды обслуживания, которые не рассматриваются в этом 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:

Страна	Местные контактные данные	Номер телефона для бесплатных звонков	Адрес электронной почты

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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

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:

Страна	Местные контактные данные
Сингапур	+65 68681668
Таиланд	1-800-898-282
Австралия	1800 066 776
Филиппины	63 8220511

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Малайзия	603-79491118
Гонконг	+852 26201881
Южная Корея	+82-2-868-5350
Тайвань	+886 0800211134
Япония	+81-45-339-5866

На территории Российской Федерации

Любой ремонт и техническое обслуживание медицинского изделия должно осуществляться исключительно сервисным инженером уполномоченного представителя производителя на территории Российской Федерации: Акционерное общество «ПРИБОРЫ» (АО «ПРИБОРЫ»).

Акционерное общество «ПРИБОРЫ» (АО «ПРИБОРЫ»)
109028, ГОРОД МОСКВА, ПЕР.ПЕВЧЕСКИЙ, Д.4, СТР.1, ПОМЕЩ.I, КОМНАТА 10
Тел.: 8 (495) 937-45-94/ 8 (495) 937-45-92
Электронная почта: info@pribori.com

За безопасность любой системы, входящей в состав оборудования, несет ответственность специалист, монтирующий систему.

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 физической этикетке, расположенной на задней панели прибора. При обращении в компанию PerkinElmer по вопросам относительно этого прибора указывайте номер модели и полный серийный номер.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Наименование: «Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии».
Далее по тексту: Система скрининговая, Система, Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System», «QSight 225MD UHPLC Screening System», Система УВЭЖХ-скрининга QSight 225MD, медицинское изделие, оборудование.

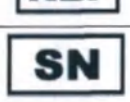
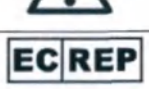
Назначение: «Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии» предназначена для качественной идентификации и количественного определения соединений в клинических образцах путем разделения образца на простые аналиты с помощью УВЭЖХ, с последующей ионизацией соединений в электроспрее и разделения полученных ионов с помощью электрического поля в соответствии с их массой. Система пригодна для применения в клинических условиях и должна эксплуатироваться квалифицированным лабораторным персоналом. Устройство работает от сети (на переменном токе), при минимальном участии техника, некоторые этапы анализа автоматизированы.

Конкретизация профессионального уровня потенциальных пользователей

«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии» представляет собой медицинское изделие для диагностики *in vitro*, которое предназначено только для профессионального использования медицинскими лабораторными техниками или специалистами (врач, фельдшер, биолог) в области клинической лабораторной диагностики.

Список используемых символов

На компонентах системы и в соответствующей документации можно встретить указанные ниже символы.

Символ	Название символа
	Медицинское изделие для диагностики in vitro
	Номер по каталогу
	Серийный номер
	Осторожно!
	Уполномоченный представитель в Европейском сообществе
	Изготовитель
	Дата изготовления
	Обратитесь к инструкции по применению

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

	Хрупкое, обращаться осторожно
	Не допускать воздействия солнечного света
	Беречь от влаги
	Не использовать при повреждении упаковки
	Переменный ток
	Выкл. (выключатель электропитания)
	Вкл. (выключатель электропитания)
	Клемма защитного заземления
	Осторожно, горячая поверхность!
	Осторожно, риск поражения электрическим током!
	Внимание! Биологическая опасность!
	Внимание! Острый инструмент!
	Внимание! Опасность раздавливания!
	Маркировка CE
	FCC: Федеральная комиссия по связи
	Маркировка соответствия требованиям, действующим в Австралии и Новой Зеландии (маркировка ACMA — RCM)
	Сертификационная маркировка MET Labs
	Безопасные и ответственные процедуры сбора, переработки и утилизации всех видов электронных отходов

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

	Сертификационный знак TUV SUD
	Сертификационный знак Intertek
	Сертификационный знак KC (Республика Корея)

Предупреждения и меры предосторожности

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

Эти меры безопасности дополняют федеральные, государственные или региональные и местные нормы техники безопасности и гигиены труда.

Перед началом работы с масс-спектрометром ознакомьтесь с прилагаемым руководством для системы QSight. Внимательно изучите сведения о мерах безопасности в этом руководстве. При настройке прибора, выполнении анализов или процедур технического обслуживания строго соблюдайте указанные инструкции.

Примечание: данное оборудование не требует специальной проверки или профилактического обслуживания для обеспечения непрерывного функционирования его средств безопасности.

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 сервисным персоналом уполномоченного представителя.

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

Предупреждение: это оборудование должно использоваться исключительно в соответствии с инструкциями производителя. Несоблюдение этих инструкций может нарушить встроенную системную защиту прибора.

Общие предупреждения о безопасности

Предупреждение: запрещается эксплуатировать систему с открытыми крышками или снятыми компонентами. 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 аннулирует гарантию.

Предупреждение: не пытайтесь производить регулирование, замену компонентов или ремонт этой системы, 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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Предупреждение о безопасности при использовании электропитания

Предостережение: Прибор должен быть установлен в месте, где можно беспрепятственно отключить шнур электропитания. Обязательно оставьте достаточное пространство за задней панелью прибора, чтобы обеспечить возможность безопасно отсоединить источник питания.

Примечания по внешнему программному обеспечению

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

Предостережение: Используйте необходимые меры предосторожности против программных вирусов и других вредоносных программ. 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 клиента.

Предупреждение: если вы установили программное обеспечение для защиты от вирусов и других вредоносных программ, убедитесь, что оно не сканирует компьютер и не выполняет никаких задач в фоновом режиме во время выполнения анализа в системе.

Знаки безопасности на масс-спектрометре



ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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.

Analyzer Ready	Анализатор готов
Check Communication	Проверьте подключение

Передняя панель приборов со снятыми крышками	
Маркировка, сообщение или предупреждение	**Описание**
	Предупреждающая мвен(аркировка информирует, что внутри устройства нет деталей, обслуживаемых пользователем, и что все обслуживание должно выполняться квалифицированным персоналом PerkinElmer.

WARNING	ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ
NO USER SERVICEABLE PARTS INSIDE	НЕТ ДЕТАЛЕЙ, ОБСЛУЖИВАЕМЫХ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕМ
REFER SERVICING TO QUALIFIED PERKINELMER PERSONNEL	ОБРАТИТЕСЬ К КВАЛИФИЦИРОВАННОМУ ПЕРСОНАЛУ PERKINELMER ЗА ОБСЛУЖИВАНИЕМ
*текст повторяется на английском и французском языках	

	Дополнительные красные наклейки на каждой из сторон запрещают пользователям отвинчивать защитные панели для доступа к прибору, это может выполнять только квалифицированный персонал PerkinElmer.

USER WARNING	ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ ДЛЯ ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

INSTRUMENT TO BE OPENED BY QUALIFIED PERKIN ELMER PERSONNEL ONLY	ПРИБОР МОЖЕТ ВСКРЫВАТЬ ТОЛЬКО КВАЛИФИЦИРОВАННЫЙ ПЕРСОНАЛ PERKINELMER
*текст повторяется на английском и французском языках	

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).

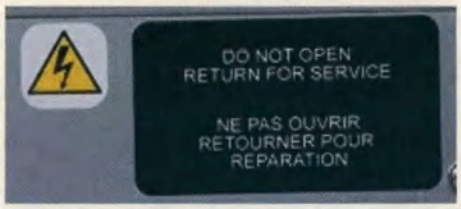
USER WARNING	ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ ДЛЯ ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ
INSTRUMENT TO BE OPENED BY QUALIFIED PERKIN ELMER PERSONNEL ONLY	ПРИБОР МОЖЕТ ВСКРЫВАТЬ ТОЛЬКО КВАЛИФИЦИРОВАННЫЙ ПЕРСОНАЛ PERKINELMER
*текст повторяется на английском и французском языках	

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.

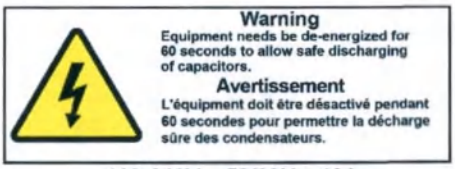
USER WARNING	ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ ДЛЯ ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ
INSTRUMENT TO BE OPENED BY QUALIFIED	ПРИБОР МОЖЕТ ВСКРЫВАТЬ ТОЛЬКО

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

PERKIN ELMER PERSONNEL ONLY	КВАЛИФИЦИРОВАННЫЙ ПЕРСОНАЛ PERKINELMER
*текст повторяется на английском и французском языках	

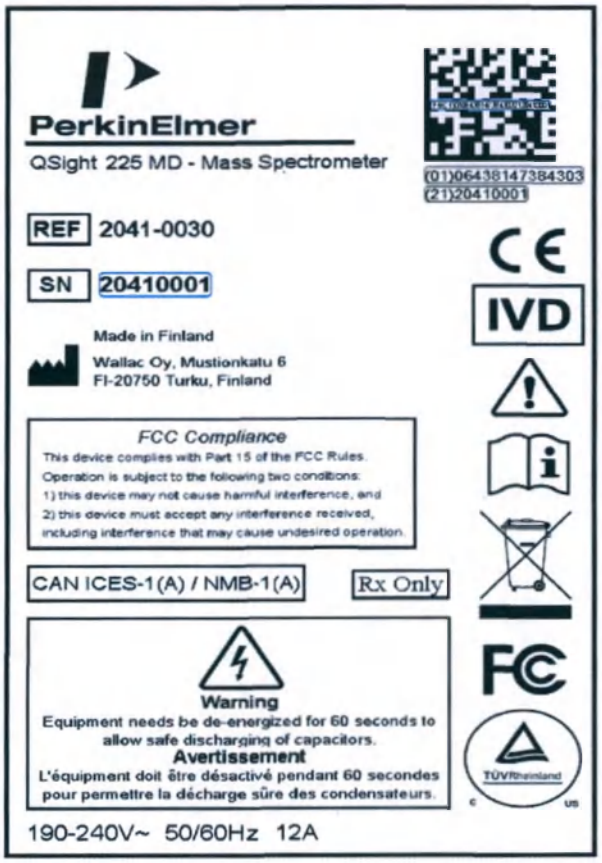
	Он сопровождается символом предупреждения об электричестве и черной надписью, в которой пользователям не рекомендуется открывать эту панель, а отправить прибор на внутреннее обслуживание в компанию PerkinElmer.

DO NOT OPEN	НЕ ВСКРЫВАТЬ
RETURN FOR SERVICE	ВЕРНУТЬ ДЛЯ ОБСЛУЖИВАНИЯ
*текст повторяется на английском и французском языках	

	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.

WARNING	ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ
Equipment needs be de-energized for 60 seconds to allow safe discharging of capacitors.	Оборудование нужно обесточить на 60 секунд, чтобы обеспечить безопасную разрядку конденсаторов.
*текст повторяется на английском и французском языках	

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.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

PerkinElmer	PerkinElmer
QSight 225 MD - Mass Spectrometer	QSight 225 MD - Масс-спектрометр
REF 2041-0030	Код 2041-0030
SN 20410001	Серийный номер 20410001
Made in Finland	Сделано в Финляндии
Wallac Oy, Mustionkatu 6	Wallac Oy (Валлак Ою), Mustionkatu 6 (Мустионкату 6)
FI-20750 Turku, Finland	FI-20750 Turku, Finland (FI-20750 Турку, Финляндия)
FCC Compliance	Соответствие требованиям FCC
This device complies with Part 15 of the FCC Rules Operation is subject to the following two conditions 1) this device may not cause harmful interference, and 2) this device must accept any interference received, including interference that may cause undesired operation	Данное устройство соответствует части 15 правил FCC Эксплуатация разрешена при соблюдении следующих двух условий 1) данное устройство не должно создавать вредных помех и 2) данное устройство должно быть в состоянии принять любые помехи, включая помехи, которые могут вызвать нежелательную работу
CAN ICES-1(A)/NMB-1(A)	CAN ICES-1(A)/NMB-1(A)
Rx Only	Продажа разрешена только специалистам
WARNING	ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ
Equipment needs be de-energized for 60 seconds to allow safe discharging of capacitors.	Оборудование нужно обесточить на 60 секунд, чтобы обеспечить безопасную разрядку конденсаторов.
*предупреждение повторяется на английском и французском языках	
190-240V- 50/60HZ 12A	190-240 В- 50/60 Гц 12A

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Опасности

Опасности химического характера

Эксплуатация системы связана с несколькими химическими опасными факторами. Необходима защитная одежда, в том числе перчатки, защитные очки и лабораторный халат. Также требуется использовать вытяжной шкаф или вытяжную систему. Операторы должны пройти полное обучение по лабораторным процедурам, включая безопасную подготовку и утилизацию химических веществ, используемых в экспериментах 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 опасными и вызывать телесные повреждения, заболевания или смерть. Прочтите предупреждения на этикетках бутылок всех опасных химических веществ и ознакомьтесь с соответствующими паспортами безопасности материалов (MSDS) перед началом эксплуатации прибора или использованием опасных реагентов.

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 для 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.

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ХИМИЧЕСКОГО ХАРАКТЕРА! Буферные растворы, используемые в системе, могут содержать опасные химические вещества. Всегда определяйте, какие растворы использовались в приборе, перед заменой реагентов или компонентов прибора. Надевайте защитную одежду при работе на приборе.

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, радиоактивные, 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 предоставленной крышки. Утилизируйте отходы в соответствии со всеми применимыми местными, 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.

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ХИМИЧЕСКОГО ХАРАКТЕРА! СИСТЕМА ВЫТЯЖКИ.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Всегда используйте систему вытяжки для удаления выделяющихся газов из лаборатории, особенно при анализе токсичных или летучих химических веществ или растворителей.

Предупреждение: ОПАСНЫЕ, РАДИОАКТИВНЫЕ, БИОЛОГИЧЕСКИ ОПАСНЫЕ МАТЕРИАЛЫ! Если с помощью прибора анализировались опасные, биологически опасные или радиоактивные материалы, примите все необходимые меры предосторожности, приведенные в паспорте безопасности материалов, при очистке интерфейса, ионного источника и компонентов вакуумной камеры.

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 ионного источника может привести к выбросу опасных паров в лабораторную среду.

Предупреждение: ОПАСНЫЕ, РАДИОАКТИВНЫЕ, БИОЛОГИЧЕСКИ ОПАСНЫЕ МАТЕРИАЛЫ! ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ! При использовании горючих соединений в ионном источнике должны применяться стандартные лабораторные правила.

Предупреждение: ОПАСНЫЕ, РАДИОАКТИВНЫЕ, БИОЛОГИЧЕСКИ ОПАСНЫЕ МАТЕРИАЛЫ! Поскольку источник содержит нагревательный элемент с рабочей температурой выше точки воспламеняемости некоторых используемых растворителей, перед каждым использованием выполняйте процедуры технического обслуживания и проверки.

Предупреждение: ОПАСНЫЕ, РАДИОАКТИВНЫЕ, БИОЛОГИЧЕСКИ ОПАСНЫЕ МАТЕРИАЛЫ! Следует ежедневно проверять индикатор вытяжки на сервере прибора перед использованием, чтобы обеспечить надлежащую очистку нагнетательной камеры. Разница между давлением в нагнетательной камере и атмосферным давлением должна составлять не менее 10 торр.

Электричество, предохранители и качество высокого напряжения

При разработке системы были предусмотрены функции безопасности, включая блокировки, чтобы свести к минимуму возможность травмирования из-за поражения электрическим током. Важно, чтобы механизмы блокировки работали, а операторы должны учитывать в работе все предупреждения и предостережения, приведенные на приборе и в сопутствующей документации. Никогда не снимайте панели до выключения прибора и отсоединения шнура питания.



Предупреждение: ВЫСОКОЕ НАПРЯЖЕНИЕ!

Ионный источник и впуск камеры для ионизации электрораспылением (ESI) находятся под высоким напряжением. Соблюдайте осторожность при работе с ионным источником, не эксплуатируйте и не обслуживайте прибор без установленных надлежащих защитных крышек. Данное указание относится также к нагнетательной камере.

Предупреждение: ДЕТАЛИ, ОБСЛУЖИВАЕМЫЕ ПОЛЬЗОВАТЕЛЯМИ, ОТСУТСТВУЮТ! Поручите обслуживание квалифицированному персоналу уполномоченного представителя. При выполнении процедур обслуживания следует соблюдать особую осторожность. Внутри корпуса прибора подается высокое напряжение.



Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ПОЖАРА ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ!

Ненадлежащие предохранители или источник питания могут повредить систему электропроводки и вызвать пожар. Перед включением прибора убедитесь, что предохранители установлены правильно, а напряжение прибора соответствует источнику питания в вашей

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

лаборатории.



Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ПОЖАРА ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ!

Блокировки сами по себе не гарантируют защиту от высокого напряжения в приборе. При проведении планового технического обслуживания убедитесь, что главный автоматический прерыватель цепи выключен, а основной источник питания отсоединен.

Предупреждение: ДЕТАЛИ, ОБСЛУЖИВАЕМЫЕ ПОЛЬЗОВАТЕЛЯМИ, ОТСУТСТВУЮТ! Чтобы уменьшить вероятность поражения электрическим током, не снимайте крышки, требующие доступа с помощью инструментов. Поручите обслуживание квалифицированному персоналу уполномоченного представителя.



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 местному законодательству.

Сжатый газ

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ВЗРЫВА! Газовые баллоны под давлением 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: Соблюдайте осторожность при перемещении прибора. Перед перемещением прибора снимите стопоры с колес;
отсоедините все электрические и газовые подключения и сдвиньте прибор, поместив руки между его серединой и днищем.



Предупреждение:

Температура корпуса ионного источника может превышать 70° С в зависимости от температуры окружающей среды и заданной температуры, а также от настроек потока газа. Не снимайте горячую нагнетательную камеру с прибора. Дайте ему 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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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 по обслуживанию оборудования уполномоченного представителя.

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

Предостережение: ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ СИСТЕМЫ! Для получения точных результатов используйте правильные настройки методов согласно руководству пользователя системы. За помощью обращайтесь к представителю центра технической поддержки уполномоченного представителя.

Предостережение: ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ СИСТЕМЫ! Убедитесь, что полученный для анализа участок данных верен и что параметр времени ввода в поток настроен в соответствии с рекомендациями, описанными в руководствах пользователя системы. Перед началом анализа проведите стандартные проверки. За помощью обращайтесь к представителю центра технической поддержки уполномоченного представителя.

Предостережение: ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ СИСТЕМЫ! Согласно руководствам пользователя системы, для правильного интегрирования поддерживайте соотношение «сигнал — шум» на достаточно высоком уровне. За помощью обращайтесь к представителю центра технической поддержки уполномоченного представителя.

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

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



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 источника, 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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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 по очистке 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 Автосемплера, 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 уполномоченного представителя.

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 лабораторные условия предусматривали надлежащую вентиляцию.

Требования к лабораторным условиям

В лаборатории необходимо поддерживать условия среды, способствующие работе прибора, роторного лопастного насоса, вытяжного вентилятора источника и компьютера, который будет использоваться для управления системой. Компания PerkinElmer не ручается за результаты анализов, полученные в условиях, не соответствующих приведенным требованиям. Система УВЭЖХ-скрининга QSight 225MD предназначена только для работы в помещении.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Условия во эксплуатации и хранения

Факторы	Технические характеристики
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
Требования к вентиляции	В лаборатории должна работать приточно-вытяжная вентиляция принудительного типа. Система должна включаться за полчаса до начала рабочего дня. Кратность воздухообмена должна быть равна 15. Разреженность воздуха должна быть равна 5-10 Па. Забор воздуха из помещений должен проводиться на нижнем уровне помещений и на верхнем.

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.

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Соответствие нормативным требованиям

Данный прибор и его компоненты соответствуют требованиям указанных ниже регулятивных органов или превышают их. На приборе имеются наклейки, подтверждающие это соответствие (см. "Знаки безопасности на масс-спектрометре", где наглядно указано расположение наклейки соответствия на приборе).

- 98/79/EC: Директива по медицинским средствам и оборудованию для лабораторной диагностики in vitro
- 2014/35/EU: Директива по низковольтному оборудованию
- 2014/30/EU: Директива по электромагнитной совместимости
- 2011/65/EC. Правила ограничения содержания вредных веществ
- 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
- Список национальных стандартов Российской Федерации, требованиям которых соответствует Система, предоставлен в Приложении к Руководству пользователя

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Обзор системы

Обзор масс-спектрометра QSight 225MD

Трехквадрупольные масс-спектрометры QSight оснащены ионными источниками Torrent , обеспечивающими гибкость и простоту эксплуатации с высокой пропускной способностью для обычных анализов.

Программное обеспечение Simplicity 3Q MD управляет масс-спектрометром, а также другими аппаратными компонентами системы скрининга УВЭЖХ QSight. Он обеспечивает полный рабочий процесс сбора данных и количественной оценки, а также функции анализа данных и отчетности. Он способен взаимодействовать с программным обеспечением MS/MS Workstation для упрощенного представления данных. Система скрининга УВЭЖХ QSight с программным обеспечением Simplicity 3Q MD подходит для использования в общей диагностике in vitro (IVD).

В масс-спектрометрии пробы в виде жидкой смеси, которая содержит представляющий интерес аналит, ионы подвижной фазы и ионы матрицы подвергаются ионизации в источнике ионов, а затем ионизированный аэрозоль направляется в ионопровод, который переносит ионы от атмосферного давления до вакуума, необходимого для масс-спектрометров, и затем в первый разделитель масс, называемый Q1. Затем ионы-предшественники проходят через CC и попадают во второй разделитель масс, называемый Q3, прежде чем быть обнаруженными.
Существует несколько различных способов настройки Q1, CC и Q3, называемых режимами сканирования, для выделения и идентификации конкретных аналитов в ваших пробах. 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.

Источник StayClean

Уникальная технология StayClean использует десольватацию, индуцированную горячей поверхностью (HSID) — уникальный интерфейс отбора проб, который может значительно увеличить время безотказной работы. 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 в горячем потоке газа, снижая химический шум и обеспечивая более высокое соотношение «сигнал — шум».

Режимы MC-сканирования

Масс-спектрометры QSight поддерживают четыре типа режима MC-сканирования с использованием одного фильтра масс. Эти режимы используют масс-фильтр Q1 или Q3 и позволяют выбрать, получать ли масс-спектр (интенсивность ионов в зависимости от массы) или наблюдать интенсивность одной массы в зависимости от времени (SIM-сканирование). Доступны следующие режимы сканирования MC:

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Режимы сканирования MC/MC

Масс-спектрометры QSight также поддерживают пять типов режима сканирования MC/MC с использованием одновременно двух фильтров масс. Сканирование MRM позволяет наблюдать зависимость интенсивности от времени, в то время как другие режимы предлагают различные подходы к получению масс-спектра. Во всех режимах существуют ион-предшественник, газ для соударений, энергия соударений и фрагментарный ион. Доступны следующие режимы:

- **Multiple Reaction Monitoring Mode (MRM, Режим мониторинга множественных реакций)** – режим MRM используется для проведения экспериментов с переходами, в которых вы указываете массу родительского соединения для фрагментации при тандемной масс-спектрометрии, 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 определения.
- **Product Scan Mode (PT, Режим сканирования продукта)** – При сканировании ионов продукта ион-предшественник выбирается на первом этапе и фрагментируется через столкновения с нейтральными молекулами, а затем все полученные массы сканируются во втором масс-анализаторе перед обнаружением. Этот тип эксперимента идеально подходит для определения переходов для количественной оценки. Обратите внимание, что ион-предшественник является синонимом родительского иона, а ион-продукт - дочернего иона.
- **Precursor Scan Mode (PR, Режим сканирования иона-предшественника)** - При сканировании ионов-предшественников ион продукта выбирается во втором масс-анализаторе, а массы предшественников 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-предшественники, которые подвергаются указанной потере указанной общей нейтрали. Как и в случае сканирования ионов-предшественников, 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-предшественник, 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 УВЭЖХ-скрининга QSight состоит из следующих компонентов:

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

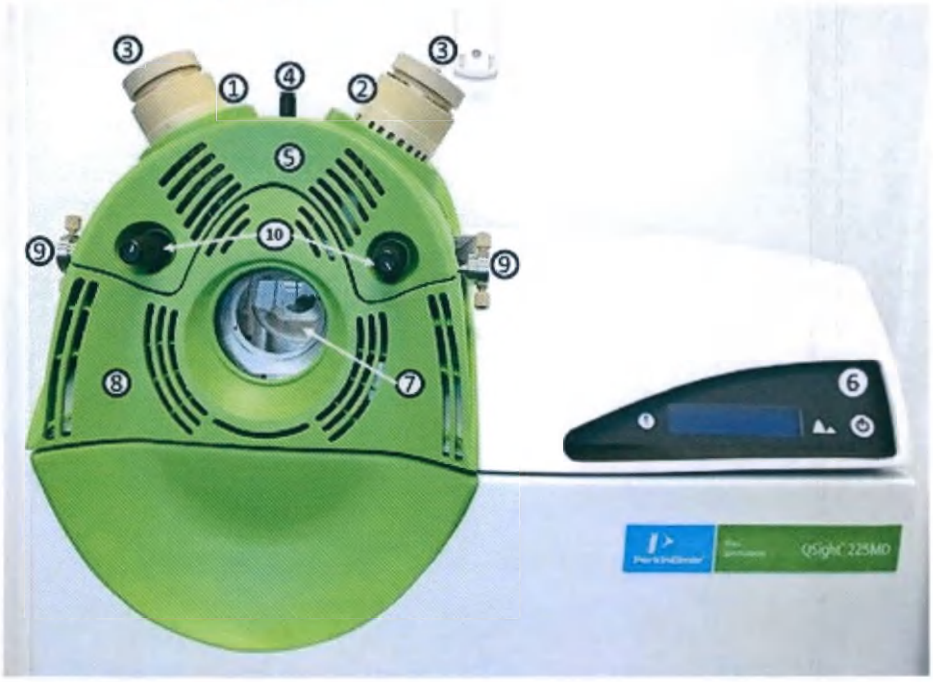


1. Программное обеспечение Simplicity 3Q MD
2. Автосемплер для УВЭЖХ QSight MD
3. Насос для УВЭЖХ QSight MD
4. Масс-спектрометр QQSight 225MD
5. Колоночный термостат QSight MD

Рисунок 2: Система скринига QSight 225MD

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.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



Analyzer Ready	Анализатор готов
Check Communication	Проверьте подключение

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

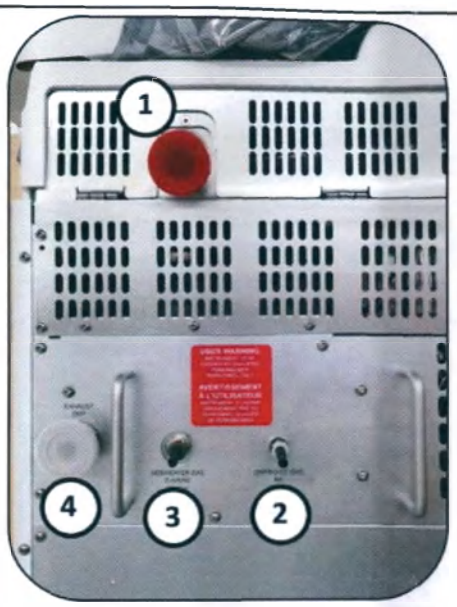
На изображении (ниже) показана вся задняя панель, а важные секции показаны более подробно на следующих изображениях, обозначенных буквами A–D.

Примечание: заднюю панель могут открывать только квалифицированные представители сервисной службы уполномоченного представителя.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU


A
B
C
D
E

A



1. **Вакуумное соединение с форвакуумным насосом**
2. **Газ-осушитель/носитель N2:** соединение для подачи газа азота.
3. **Подаваемый в распылитель газ/нагреватель/N2:** подача очищенного воздуха.
4. **Выпуск:** Основное коленчатое соединение с внешним откачивающим насосом.

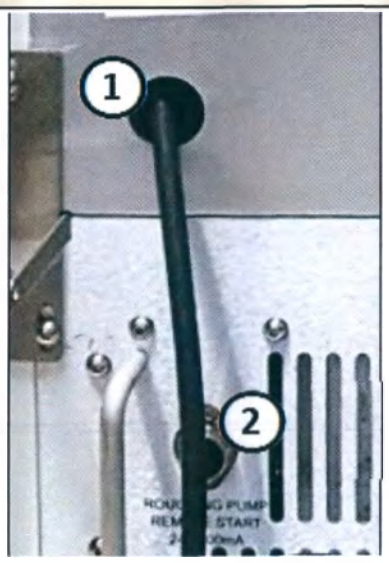
Осторожно: может быть горячим!

B



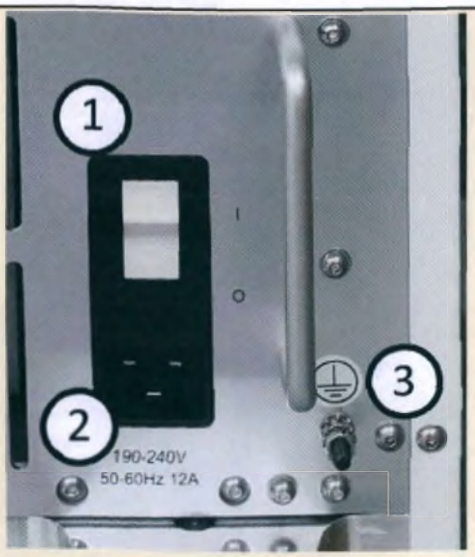
1. **Привод шприца:** соединение для насоса шприца.
2. **Вспомогательный ввод/вывод:** вспомогательный порт ввода/вывода.
3. **Замыкание контакта:** подключение замыкания контакта ЖХ.
4. **Вход с ПК:** Ethernet-соединение с компьютером, на котором запущено программное обеспечение прибора.

C



1. **Сливной шланг**
2. **Дистанционный запуск форвакуумного насоса:** соединение с форвакуумным насосом.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.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)

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Автосемплер для УВЭЖХ QSightMD

- 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 УВЭЖХ QSightMD

- 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

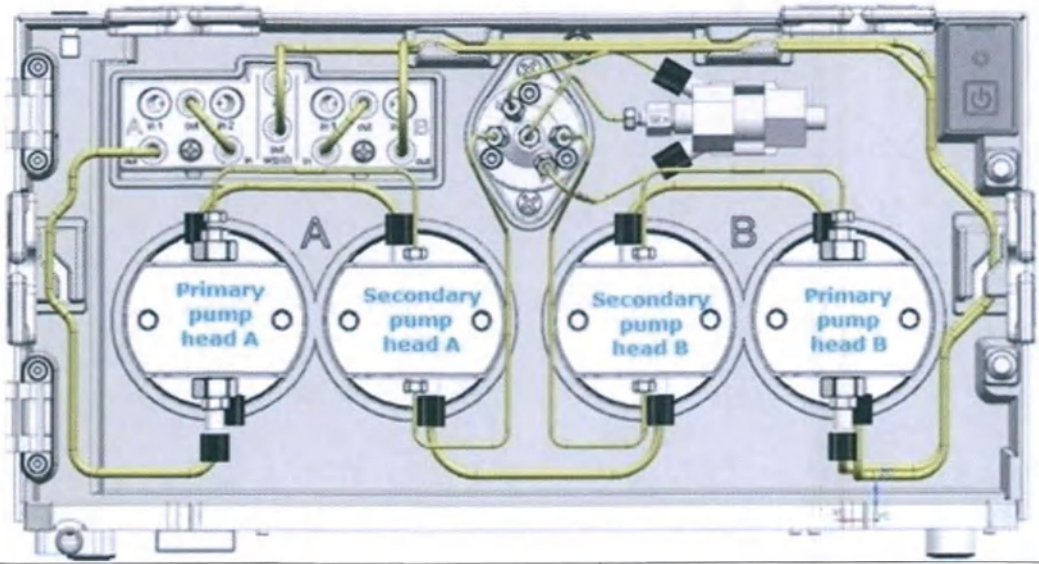
Колоночный термостат QSightMD

- 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 УВЭЖХ QSightMD

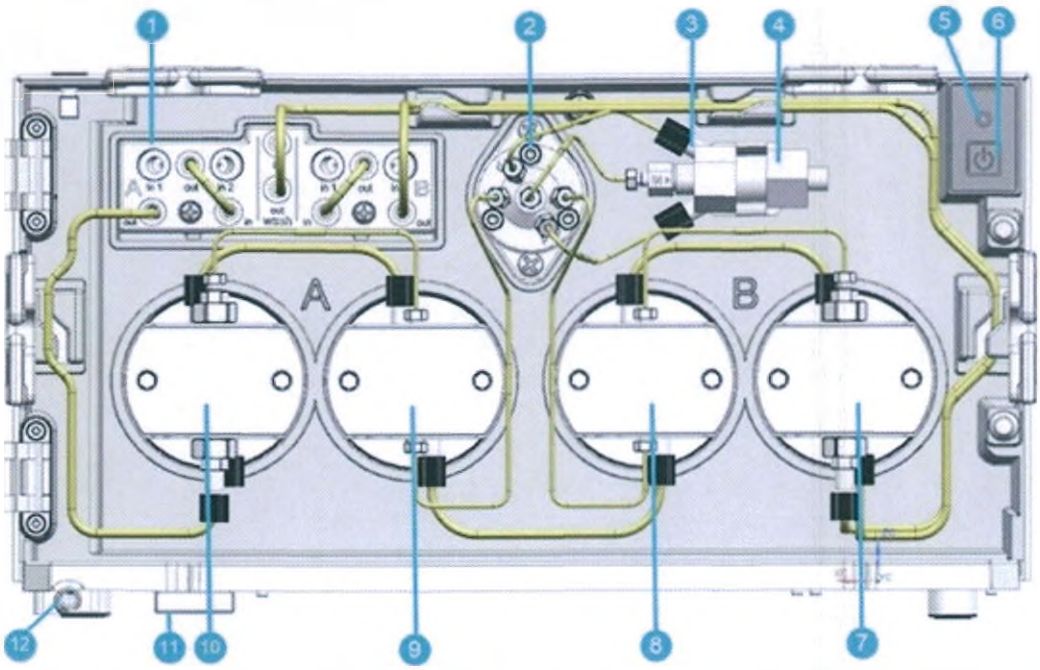
В этом разделе перечислены основные компоненты насоса для УВЭЖХ QSight MD. Насос состоит из двух насосных каналов (A и B). Каждый канал оснащен двумя головками насоса — основной и вспомогательной. Два канала обеспечивают подачу раздельных потоков. Указанные потоки объединяются в промывочном клапане и смешиваются с помощью смесителя высокого давления. Каждая головка насоса оснащена датчиком давления. Показания давления от каждого датчика отображаются в программном обеспечении.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Primary pump head A	Основная головка насоса A
Secondary pump head A	Вспомогательная головка насоса A
Primary pump head B	Основная головка насоса B
Secondary pump head B	Вспомогательная головка насоса B

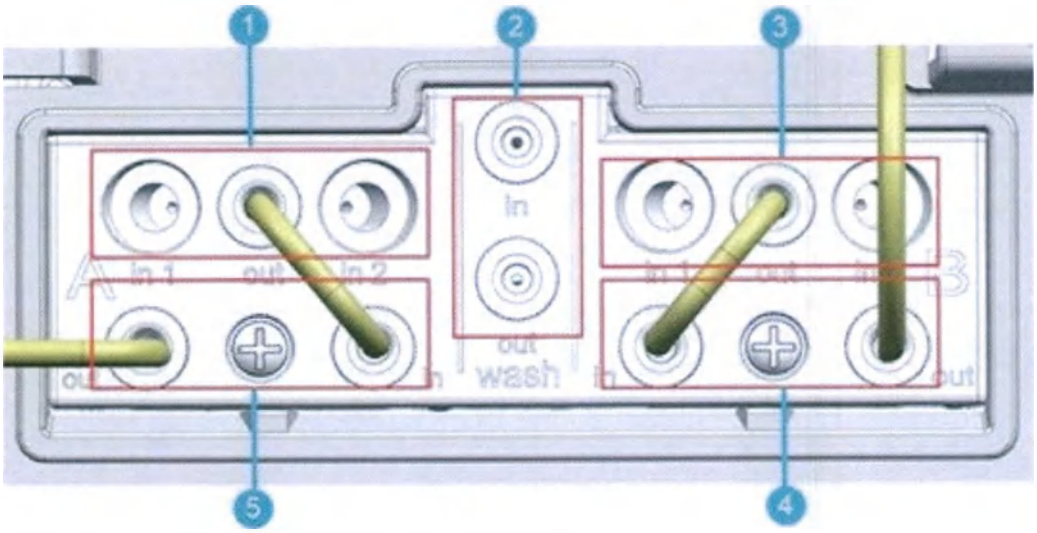
Рисунок 4: Головки насоса



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

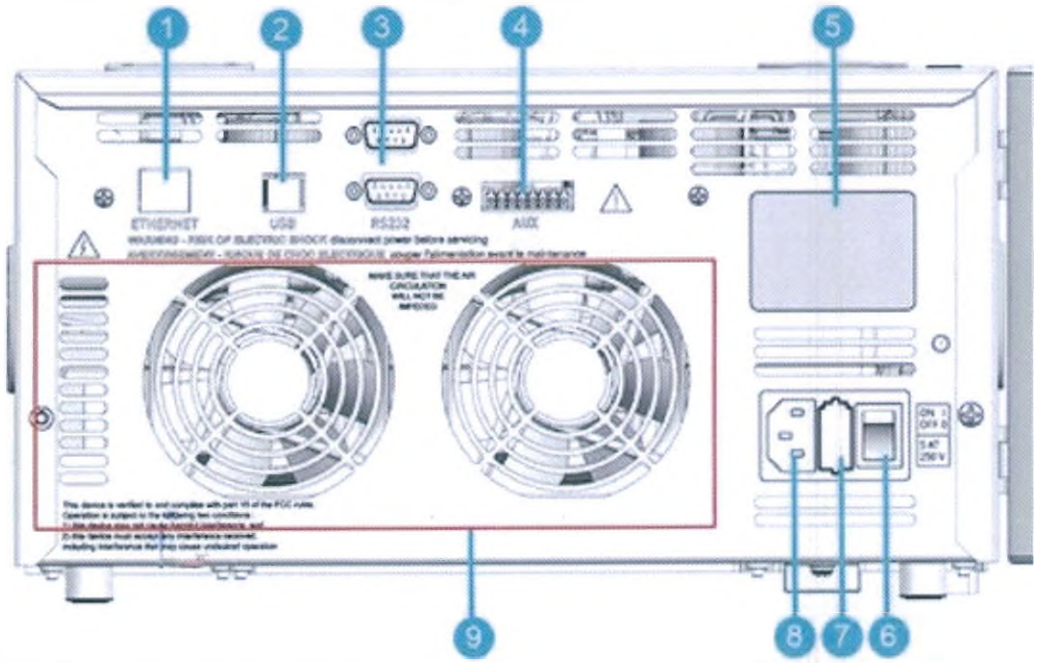
Рисунок 5: Передняя панель насоса.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



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 6: Соединения для растворителей.



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

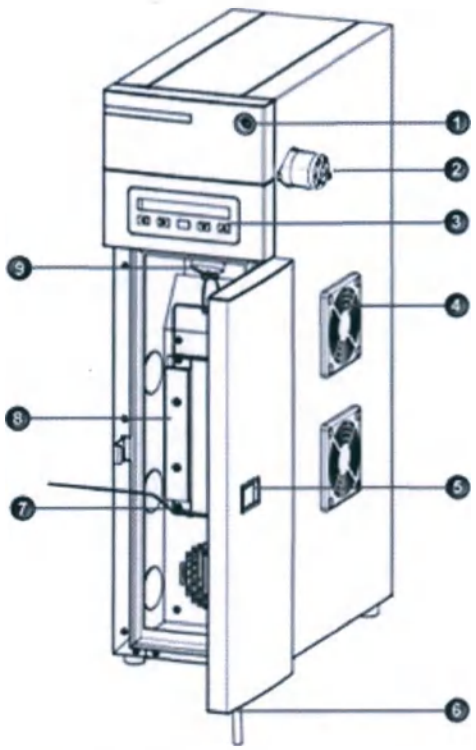
Внимание: НЕ ПЕРЕКРЫВАТЬ!

Рисунок 7: Задняя панель насоса.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Обзор колоночного термостата QSightMD

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.



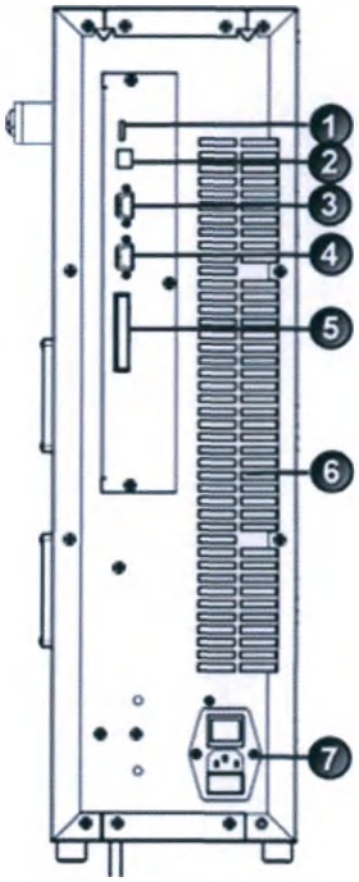
1. Светодиодный индикатор состояния
2. Разделяющий клапан
3. Дисплей и клавиатура
4. Вентиляторы

Внимание: НЕ ПЕРЕКРЫВАТЬ!

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

Рисунок 8: Колоночный термостат (вид спереди).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



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

Внимание: НЕ ПЕРЕКРЫВАТЬ!

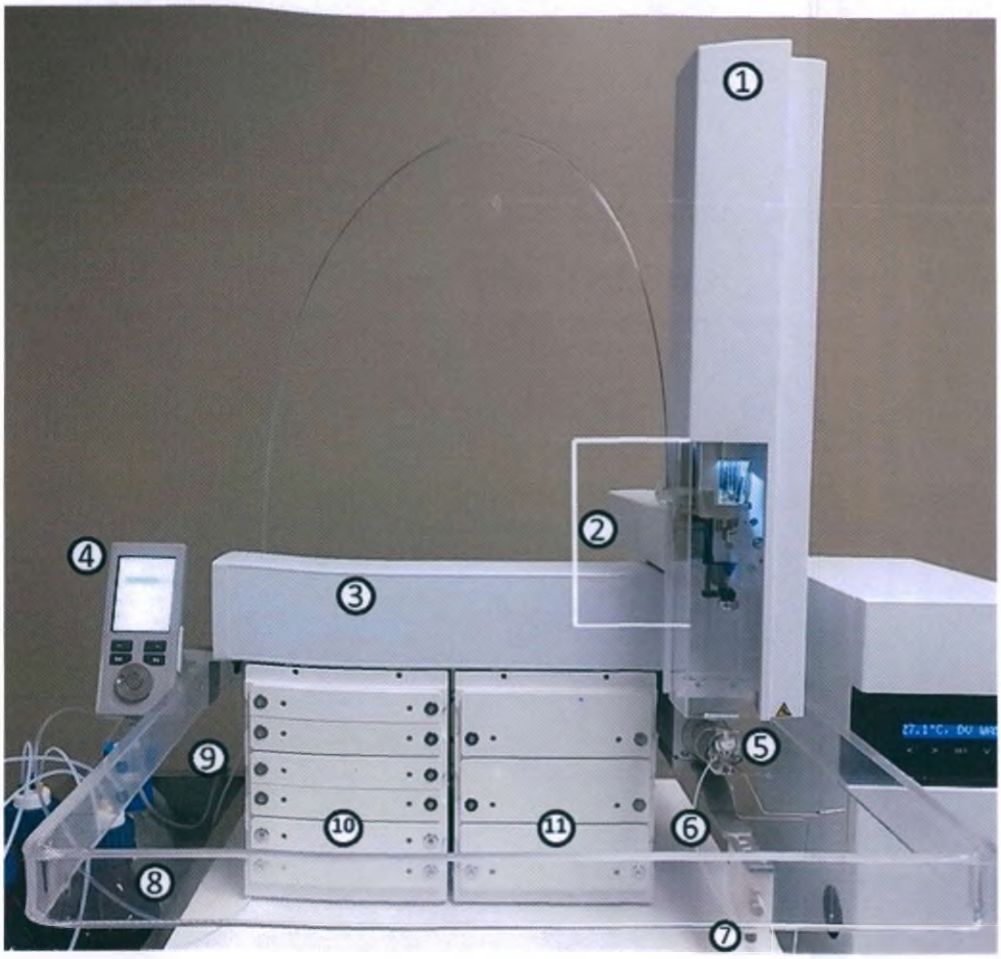
6. Вентиляционные отверстия
7. Блок предохранителей; разъем питания; переключатель ВКЛ/ВЫКЛ/переключатель напряжения

Рисунок 9: Колоночный термостат (вид сзади).

Обзор Автосемплера для УВЭЖХ QSightMD

В этом разделе описаны основные компоненты Автосемплера для УВЭЖХ QSight MD. Автосемплер позволяет автоматически вводить пробы из микротитрационных планшетов или проб.

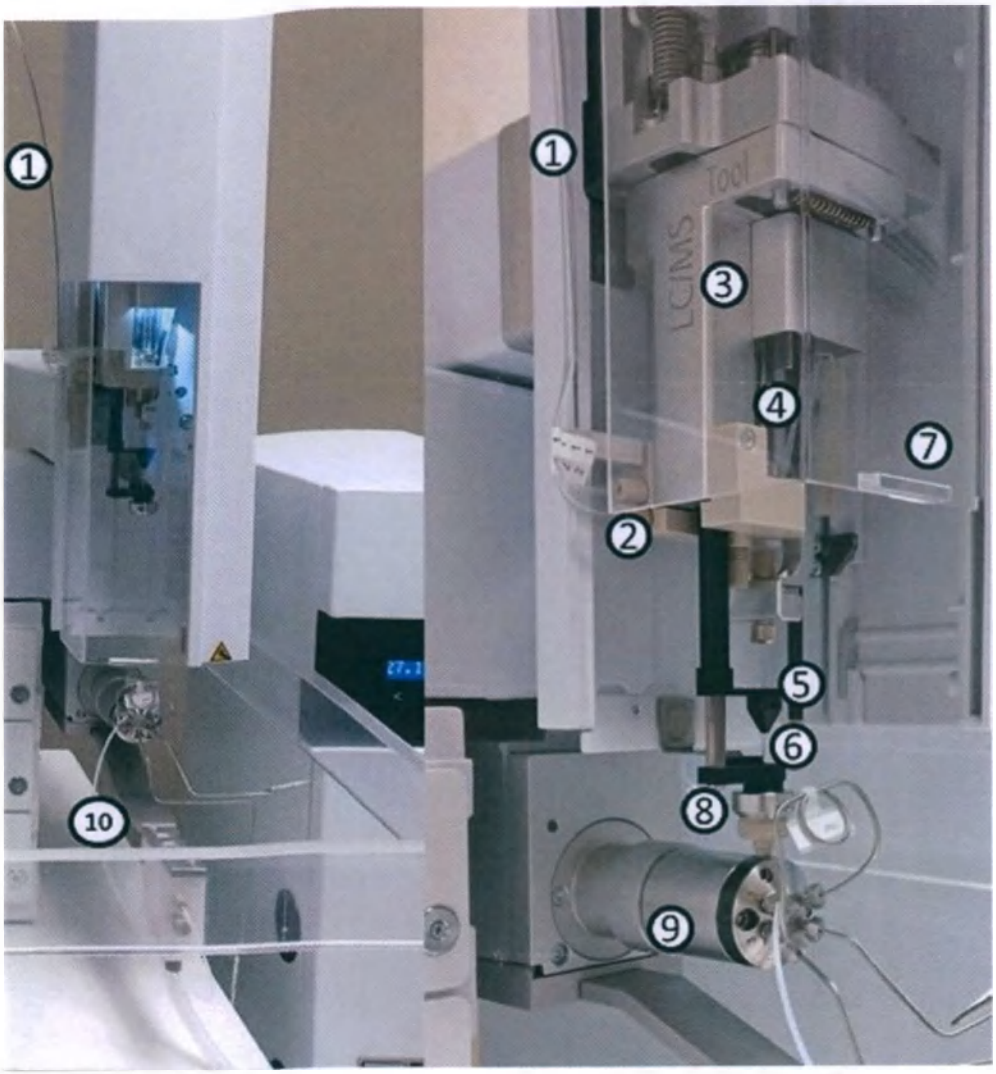
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



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 Автосемплера
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

Рисунок 10: Автосемплер для УВЭЖХ QSight MD (вид спереди).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



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

Рисунок 11: Головка Автосемплера для УВЭЖХ QSight MD.

Блок ручного управления

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



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

Рисунок 12: Блок управления вручную Автосемплером для УВЭЖХ QSight MD.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Работа программного обеспечения

Работа программного обеспечения

Программное обеспечение Simplicity 3Q MD версия 2.0 управляет масс-спектрометром QSight и его компонентами: Автосемплером УВЭЖХ, колоночным термостатом и насос для УВЭЖХ. Система скрининга УВЭЖХ QSight 225MD 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 версия 2.0 будет установлено представителем сервисной службы уполномоченного представителя во время сервисного визита. Если вам требуется переустановка или изменение параметров конфигурации программного обеспечения, обратитесь к представителю службы поддержки клиентов уполномоченного представителя.

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

Использование профилей пользователей

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

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

Пользователи уровня Сервисный имеют полный доступ ко всем операциям программного обеспечения Simplicity; пользователи уровня Обычный 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 (Обычный) 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	☑		

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

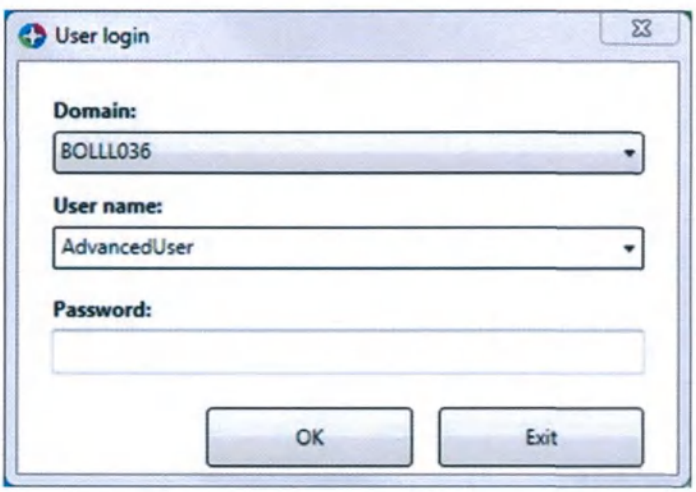
Создание списка серий	☑	☑	☑
Очередь сбора данных серии	☑	☑	☑
Вкладка DataViewer (Средство просмотра данных)	☑	☑	☑
Автоматическая калибровка и разрешение	☑	☑	☑

Права безопасности по ролям пользователей			
Редакторы методов количественного анализа/МС/ЖХ	☑	☑	
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).



User login	Вход пользователя
Domain	Домен
BOLLL036	BOLLL036
User name:	Имя пользователя
Advanced User	
Password	Пароль
OK	OK
Exit	Выход

2. Если он еще не выбран, в раскрывающемся 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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

уже входили в программу, выберите его из раскрывающегося 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 запросом подтверждения продолжения. 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 программу – либо через меню «Пуск» Windows, либо щелчком по значку Simplicity на рабочем столе –
автоматически выбирается и отображается главный экран:

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

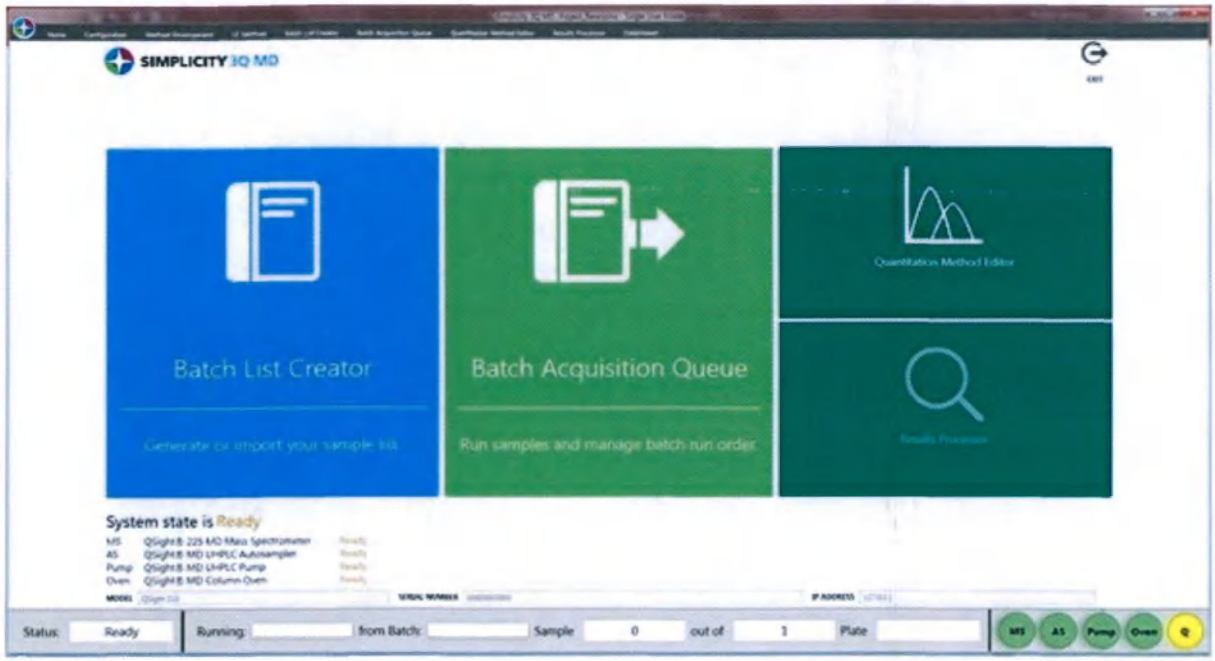


Рисунок 13: Главный экран программного обеспечения Simplicity 3Q MD (вид Продвинутого Пользователя)

Batch List Creator	Создание списка серий
Generate or import your sample list	Создать или импортировать свой список проб
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Run samples and manage batch run order	Запустить пробы в работу и задать порядок прогона серии
Quantification Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
System state is Ready	Состояние системы: Готова
MS QSight 225 MD Mass Spectrometer Ready	Масс-спектрометр QSight 225 MD Mass Spectrometer готов
AS QSight MD UHPLC Autosampler Ready	Автосемплер QSight MD UHPLC Autosampler готов
Pump QSight MD UHPLC Pump Ready	Насос QSight MD UHPLC Pump готов
Oven QSight MD Column Oven Ready	Колоночный термостат QSight MD Column Oven готов
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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 Автосемплера.
- 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 .

Лента: 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 ленты .

- **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 имя пробы.
- **From Batch** (Из серии): Отображает шаблон серии или имя рабочего списка.
- **Sample** (Проба): Указывает номер пробы.
- **Out of** (Из): Указывает общее количество проб в списке серии.
- **Plate** (Планшет): Указывает, с какого планшета исследуется проба.

Световые индикаторы: указывают на состояние оборудования масс-спектрометра (MC), автосемплера (AC), насоса, очереди сбора данных (O) и термостата. Полное описание доступных опций см. в разделе Щелчок правой кнопкой мыши на Световые индикаторы Управление .

Состояние оборудования Световых индикаторов	
MC (масс-спектрометр)	
Зеленый	Готов
Серый	Не подключен
Оранжевый	Попытка подключения

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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)
АС (Автосемплер)	
Зеленый	Готов
Желтый	Инициализация
Красный	Ошибка
Щелкните левой кнопкой мыши, чтобы получить подробные сведения	Обновление статуса

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.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)
О (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**
Открытые данные	Загрузка файлов данных и отображение DataViewer (Средство просмотра данных), если он не отображается.
Выйти из системы	Текущий пользователь вышел из системы; отображается диалоговое окно входа в систему.
Новый проект	Создайте новую папку проекта. **Примечание:** Эта опция отключена во время получения

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

	данных.
Open Project (Открыть проект)	Загрузите ранее созданную папку проекта. **Примечание:** Эта опция отключена во время получения данных.
Данные для печати	Печать текущего выбранного файла данных с выбранными свойствами принтера.
About (О программе)	Отображение сведений на программное обеспечение Simplicity (включая название, авторское право, версию, модель и дату сборки)

Опции меню Simplicity orb	
Боковая панель	Недавние документы - показать недавно открытые документы.
	Очистить недавние элементы - очистка списка недавних документов.
Выход	Закрывает приложение Simplicity.

Ленточное меню

Чтобы перейти к вкладкам ленты и начать работу, выберите нужный значок на вкладке Home (Главная) или щелкните 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, щелкните 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
- Управление лентой метода ЖХ
- Элементы управления ленты для создания списка серий и очереди сбора данных серии
- Элементы управления ленты для редактора методов количественного анализа
- Элементы управления ленты для DataViewer (Средство просмотра данных)

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	

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

	**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.

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

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 Автосемплером для УВЭЖХ QSight MD
- Варианты прямого управления колоночным термостатом QSight MD
- Опции прямого управления насосом для УВЭЖХ QSight MD

Варианты прямого управления Автосемплером для УВЭЖХ QSight MD

Опции прямого управления Автосемплером для УВЭЖХ QSight MD 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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

	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 УВЭЖХ QSight MD

Опции на вкладке Direct Control (Прямое управление) насоса для УВЭЖХ QSight 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)

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).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

	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.
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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

	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 представителя.

Вкладка Configuration (Конфигурация)

На вкладке Configuration (Конфигурация) пользователи продвинутого уровня могут настраивать параметры рабочего списка.

Настройки рабочего списка

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

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) на ленте.
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 вы измените настройки рабочего списка во время сбора данных, данные будут сохранены в исходном месте. Настройки вступят в силу после завершения сбора данных.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

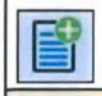
Разработка метода

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

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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.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 МС.
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) — 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 прибора.
Группа инструментов Выберите необходимые инструменты, установив флажок рядом с каждой опцией инструмента.	
флажки	**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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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.

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 МС.

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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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 MC Experiment Creator (Создание эксперимента) (см. раздел Управление панелью MC Experiment Creator (Создание эксперимента) (центральная)). 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.

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 MC 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 раскрывающемся 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 выполнения): 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).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

- **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 раскрывающемся 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 раскрывающемся 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 раскрывающемся 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 раскрывающемся 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 раскрывающемся 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.
    - **Dwell Time (мс)** (Время задержки): Время сканирования в определенной точке пика.
    - **Resolution (Q1:Q3)** (Разрешение): В раскрывающемся списке выберите относительное разрешение для Q1 и Q3.
  - **Настройки режима сканирования иона-предшественника (PR)**

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

- **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 раскрывающемся 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 раскрывающемся 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 раскрывающемся списке выберите относительное разрешение для Q1 и Q3.

Элементы и опции на правой панели

Элементы управления подвкладки MC 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.
-  **Значок <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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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 этим методом МС.
- **Поле Injection Volume** (Объем инъекции): Указывает желаемый объем инъекции. Введите для ввода или редактирования объема.
- **Поле Vial Position** (Положение виалы): Указывает заданную позицию лунки/виалы. Нажмите кнопку Select Vial (Выбрать виалу), чтобы ввести или изменить эту настройку.
- **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 автодозатора для предстоящих проб.

Разработка метода и оптимизация соединений

Первые процедуры в этом разделе описывают основные общие процессы создания метода МС. 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 МС

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 МС Method Creator (Создание метода) добавьте и настройте экспериментальные компоненты для этого метода:

- В раскрывающемся 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 МС 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 щелкните в любой ячейке Q1 Mass (Масса Q1), Q3 Mass (Масса Q1) или Dwell Time (Время задержки) (мс), а затем щелкните 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, в группе ленты Experiment (Эксперимент) нажмите Add Experiment (Добавить эксперимент). Настройте, как указано выше. Повторяйте,

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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 метода MC .

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 МС 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 раскрывающемся 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 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 МС). 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 растворителям, используемым в вашей лаборатории.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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 МС).**
7. Продолжите настройку метода, как описано в разделе Создание нового метода МС .

Загрузка существующего метода метода МС

1. На ленте экрана **Method Development** (Разработка метода) нажмите **Load Method** (Загрузить метод). Появится диалоговое окно **Open MS Method browse** (Открыть обзор метода МС).
2. Найдите и выберите нужный метод МС, 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 ленте 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 МС), чтобы начать сбор данных.

Как загрузить метод МС из существующих данных

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).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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

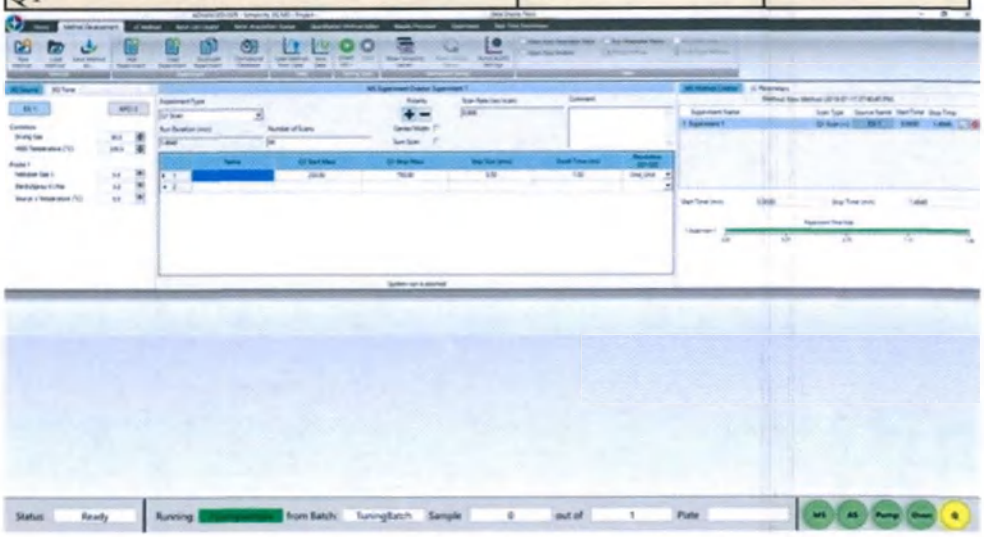
Вы можете использовать общий метод сканирования Q1 и продукта для нахождения масс ионов-предшественников и его продукта.

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 или APCI.

1. Проверьте псевдомолекулярные массы (то есть [M+H]+ для положительного режима или [M-H]- для отрицательного режима), выполнив Q1 scan (Сканирование Q1).
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 положительное сканирование Q1 для полного сканирования: На центральной панели в раскрывающемся 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 MC		
Диапазон сканирования массы (приблизительно)	Размер шага (а. е. м.)	Время задержки (мс)
на 20-50 выше молекулярной массы Q1	0.5	1



Method Development	Разработка метода
Experiment Type	Тип эксперимента
ESI	ESI
APCI	APCI
Polarity	Полярность
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

AS	AC
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

4. Запустите насос шприца с расходом 30 мкл/мин и убедитесь, что шланг направлен в масс-спектрометр.

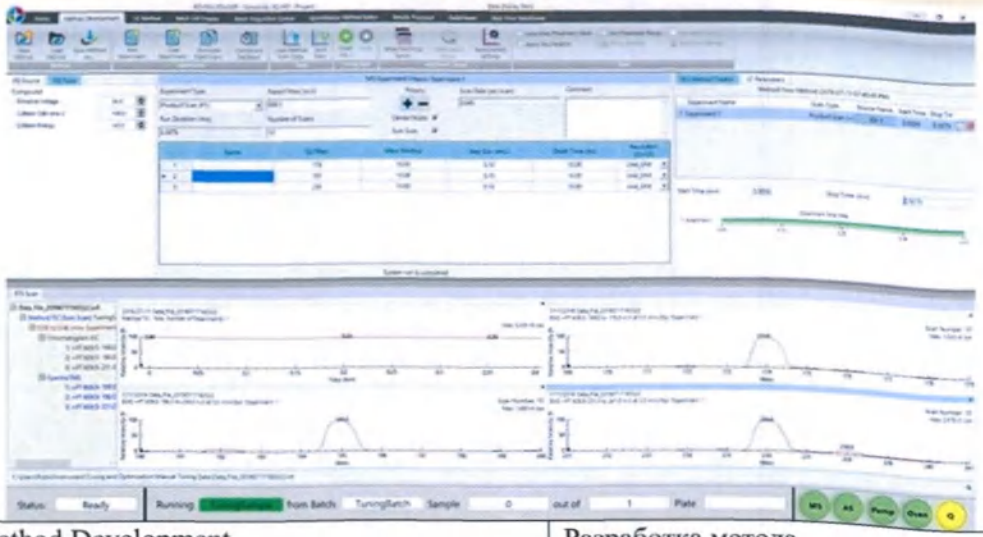
5. На вкладке **3Q Source** (Источник 3Q) введите универсальные параметры источника и входное напряжение, как показано ниже. Ниже указаны рекомендуемые начальные значения для положения датчика при низком расходе (более подробные сведения указаны в Приложении Б).

   Приложение: В таблицах ниже перечислены стандартные методы для режима положительных ионов; при переключении в режим отрицательных ионов измените знак значений для параметров Electrospray Voltage (Напряжение электроспрея), Corona Discharge (Коронный разряд) 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		**Параметры, зависящие от соединения**	**Значения Q1 в режиме положительных ионов**
Горизонтальное расстояние зонда (полных оборотов черной ручки в сторону от отверстия)		Входное напряжение	30
Вертикальное расстояние зонда (мм)			
Позиция иглы ESI (мм) (выступ иглы)			
Газ-осушитель			
Температура HSID (°C)			
Подаваемый в распылитель газ			
Температура источника ESI (°C)			
Напряжение электроспрея (только для зонда ESI)			

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Method Development	Разработка метода
Start MS	Запуск МС
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

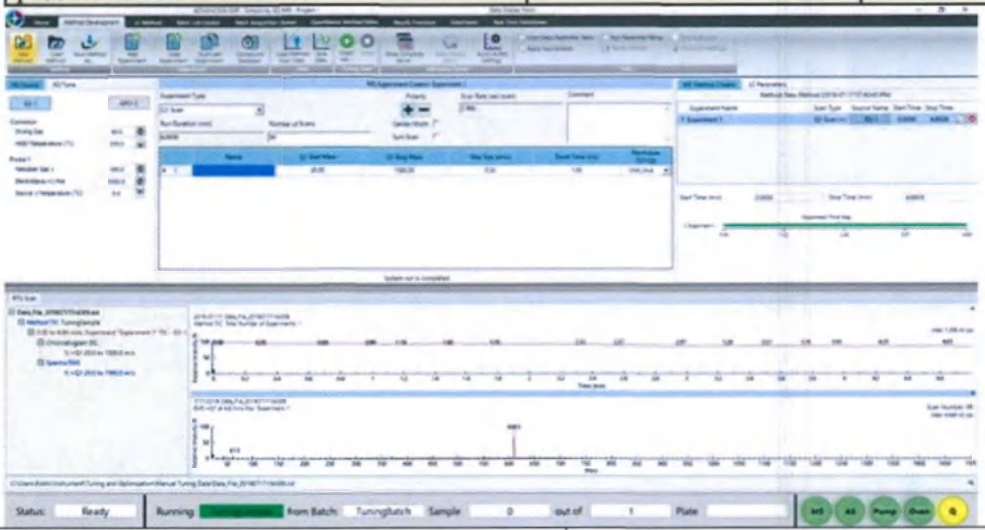
11. Отмените выбор функции линейного изменения и соберите 10 сканирований; эти сканирования могут потребоваться вам позже.

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



Method Development	Разработка метода
Experiment Type	Тип эксперимента
Product Scan	Сканирование продукта
Polarity	Полярность
Start	Запуск
Stop mass	Стоп-масса
Step size	Размер шага
Dwell Time	Время задержки
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

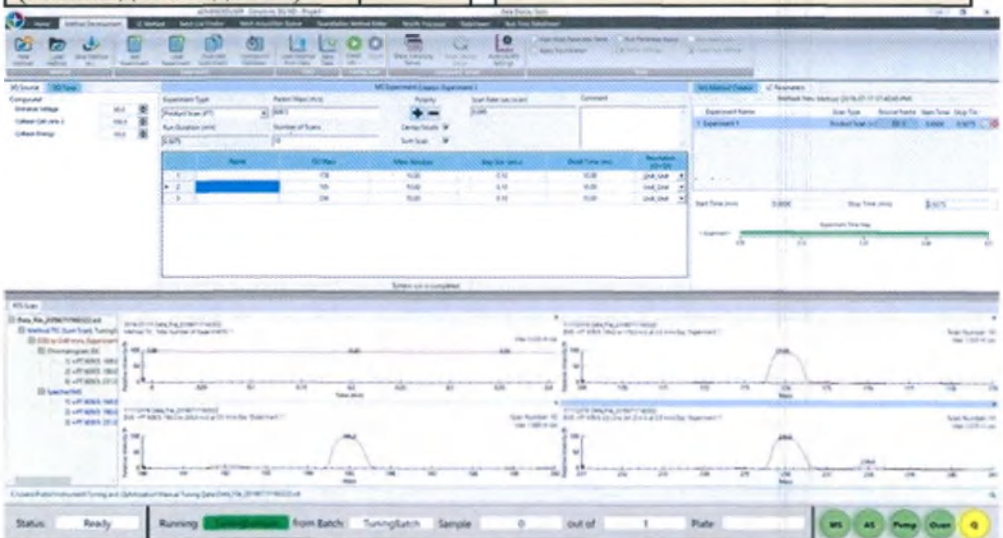
изменения выберите два максимальных фрагмента и увеличьте их масштаб (сузив диапазон массы для идентифицированных фрагментов), убедитесь, что после этого шага снят флажок Run Parameter Ramp (Выполнить линейное изменение параметров). Если в окончательном методе должно быть два фрагмента (перехода), лучше 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**	**Параметры, зависящие от соединения**	**Настройки режима положительных ионов**
Газ-осушитель	60	Входное напряжение	35
Температура HSID (°C)	250	Линза ячейки столкновений 2	-60
Подаваемый в распылитель газ	85	Энергия столкновения	-20
Температура источника (°C)	0		
Напряжение электроспрея (только для зонда ESI)	4500		



Method Development	Разработка метода
Experiment Type	Тип эксперимента
Product Scan	Сканирование продукта
Polarity	Полярность

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Start	Запуск
Stop mass	Стоп-масса
Step size	Размер шага
Dwell Time	Время задержки
Electrospray Voltage	Напряжение электроспрея
Entrance Voltage	Входное напряжение
Collision Cell Lens 2	Линза ячейки столкновений 2
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

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).

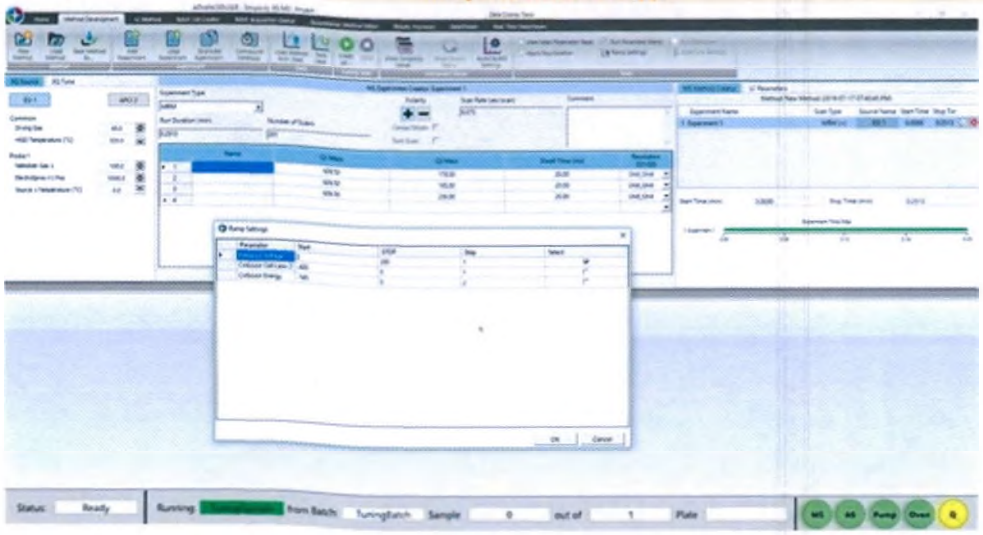
   Функция Run Parameter Ramp (Выполнить линейное изменение параметров) позволяет по отдельности оптимизировать каждую MRM-пару. Максимальной интенсивности для каждого перехода можно добиться путем оптимизации зависимых от соединения параметров:

- 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.

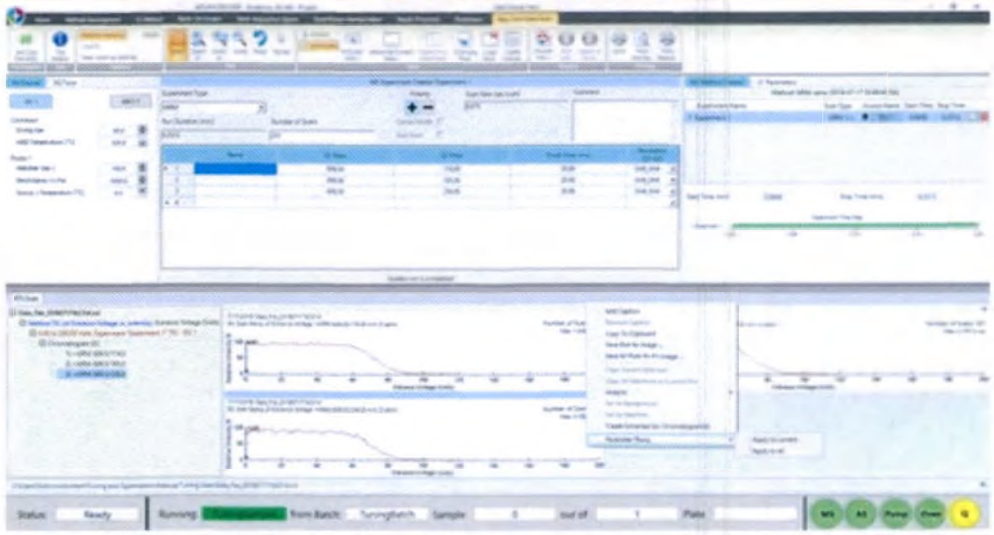
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Method Development	Разработка метода
Experiment Type	Тип эксперимента
Product Scan	Сканирование продукта
Polarity	Полярность
Start	Запуск
Stop mass	Стоп-масса
Step size	Размер шага
Dwell Time	Время задержки
Start MS Scan	Запуск сканирования МС
Ramp Settings	Настройки линейного изменения
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

6. Когда сканирование с линейным изменением будет завершено, в каждом временном интервале пика отобразится значение, при котором интенсивность пика будет максимальной. Чтобы применить оптимизацию параметра линейного изменения сканирования к каждой паре ионов MRM, щелкните 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)).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Method Development	Разработка метода
Parameter Ramp	Линейное изменение параметров
Apply to All	Применить ко всем
Mass Parameter	Параметр масс
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

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).

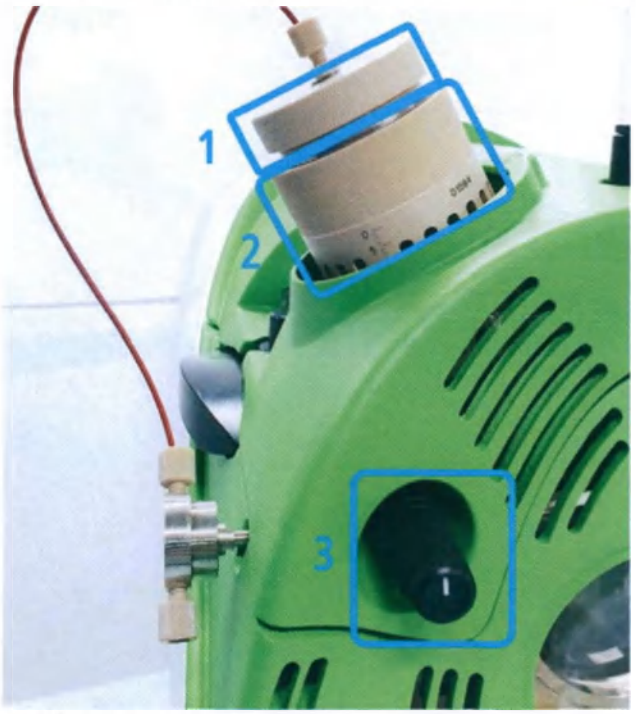
   Примечание: Если элюант имеет высокое содержание воды, начните с более высокой температуры HSID. Проверьте температуру HSID, нажав на световой индикатор МС.

   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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Ручная оптимизация источников

В процессе разработки метода МС 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:



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

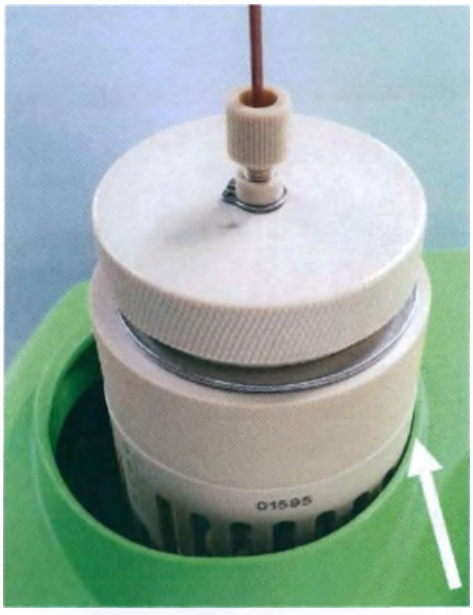
Примечание: Если ваши методы включают несколько MRM-переходов для одного и того же соединения, оптимизируйте все исходные позиции для самых низких переходов.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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 Поверните против часовой стрелки для перемещения к отверстию



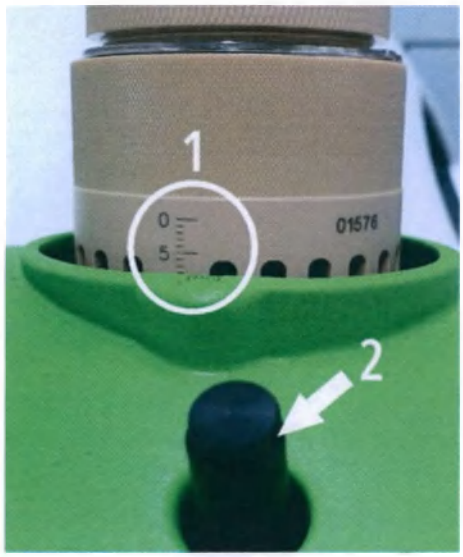
Зонд должен находиться на одном уровне с оболочкой

- 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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

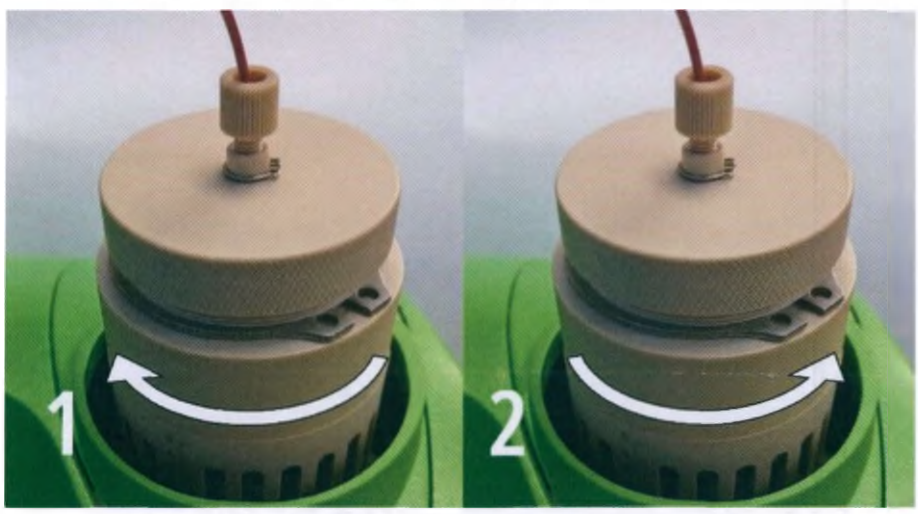
2. **Оптимизируйте ось X путем регулировки зонда:**

- 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:



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

- Запишите положение зонда для дальнейшего использования.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

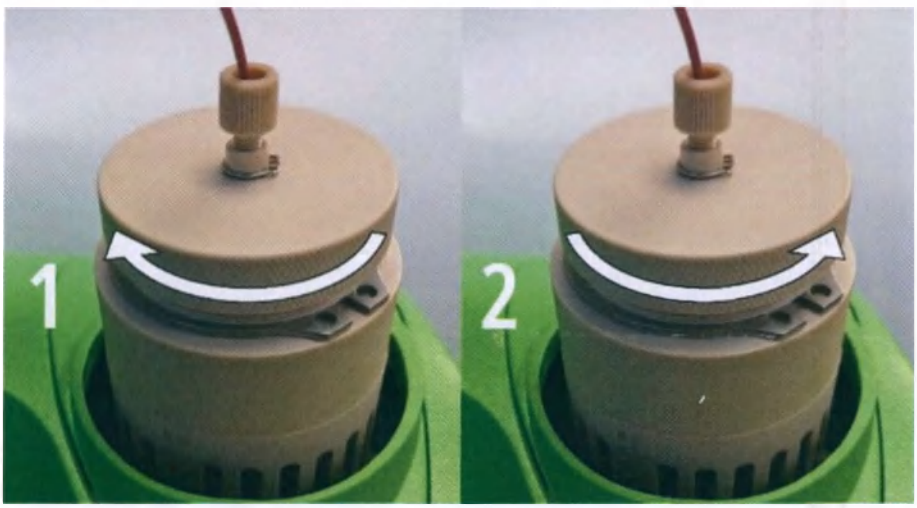
3. **Оптимизируйте ось Y (выступание иглы пробы), отрегулировав колпачок зонда:**

- 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

Оптимальным считается то положение, в котором высота сигнала и его стабильность максимальны.

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.

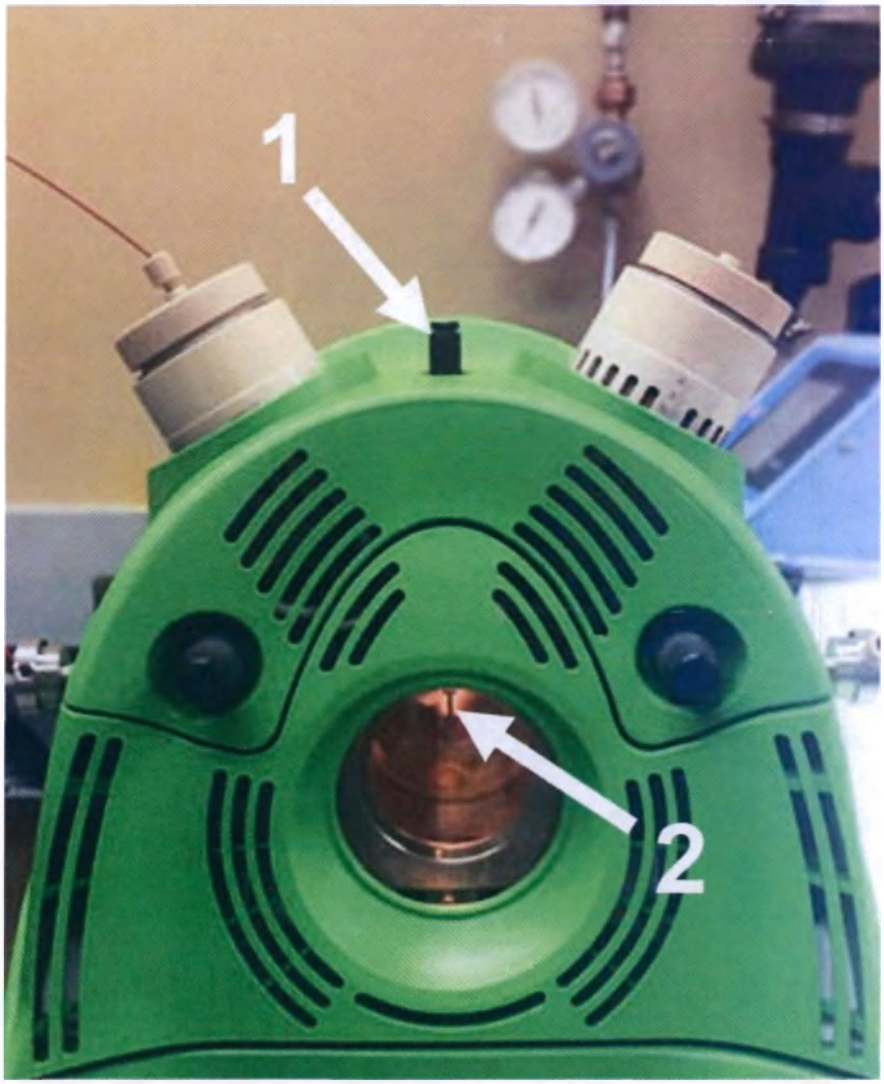
- Убедитесь, что положения оси Z (черная ручка) и оси X (высота зонда) все еще правильные.
- Запишите положение крышки зонда для сверки в будущем.

Оптимизация положения иглы короны (только зонды APCI)

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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.

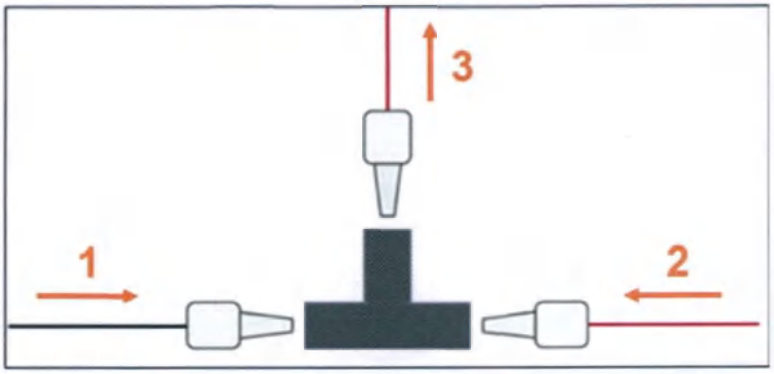
Приборы, настроенные для оптимизации MRM с высокими скоростями потока

Для оптимизации параметров источника при скоростях потока, используемых в анализе ВЭЖХ, 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:

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



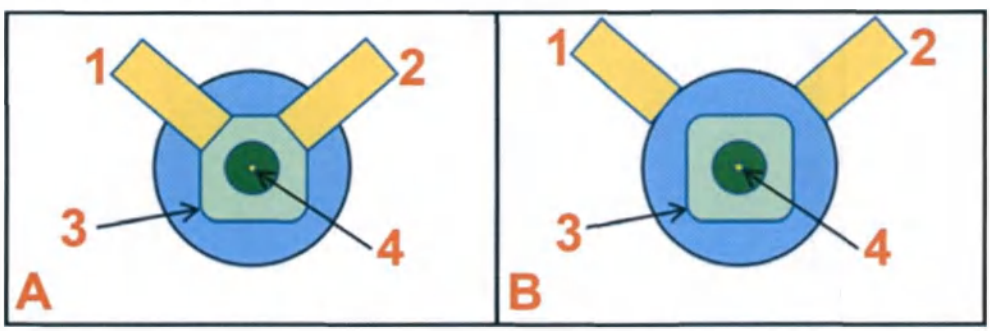
1.500 мкл/мин из ЖХ
2.10 мкл/мин из шприца
3.Объединенный поток в МС

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.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

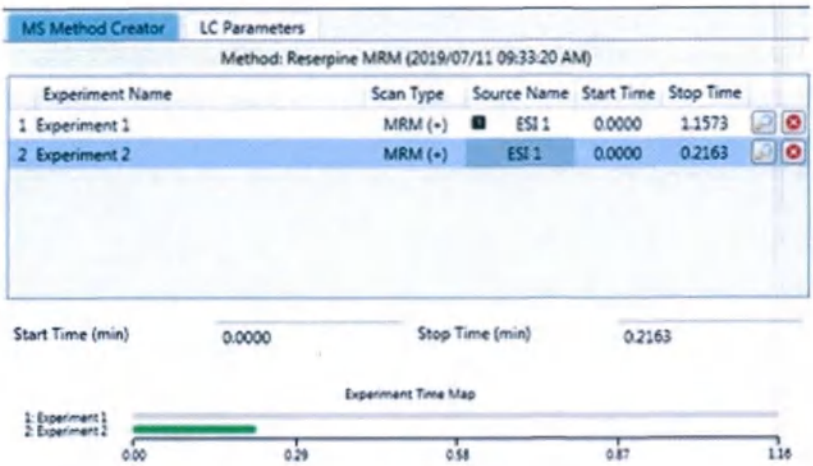
Диапазон оптимизации при различных уровнях расхода				
Расход растворителя для ЖХ, мкл/мин	Газ-осушитель, поток	Подаваемый в распылитель раз, поток	Температура источника (°C)	Температура HSID (°C)
от 5 до 50	50-100	от 50 до 150	0	от 150 до 300
от 50 до 200	90-150	от 75 до 250	от 50 до 400	от 150 до 300

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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)

MS Method Creator	Создание метода МС
LC Parameters	Параметры ЖХ
Method: Reserpine MRM (2019/07/11 09:33:20 AM)	Метод: MRM с резерпином (11.07.2019 09:33:20)
Experiment Name	Название эксперимента
Scan Type	Тип сканирования
Source Name	Название источника
Start Time	Время начала
Stop Time	Время остановки
Start Time (min)	Время начала (мин)
Stop Time (min)	Время остановки (мин)
Experiment Time Map	График эксперимента
1: Experiment 1	1: Эксперимент 1
2: Experiment 2	2: Эксперимент 2

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, объектив ячейки столкновения 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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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).

- 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.



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).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

- 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 МС, или могут применяться динамически. Пожалуйста, обратитесь к разделу Динамический газ-осушитель , чтобы добавить эту функцию в ваш метод МС, а также обратитесь к разделу Оптимизация диапазона при различных скоростях потока 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

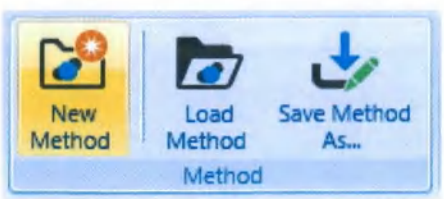
Динамический газ-осушитель может помочь сохранить иглу зонда чистой в перерывах между введениями зонда, сводя к минимуму возможность засорения иглы зонда. Данная функция управляется на вкладке «Разработка метода» и доступна для большинства типов экспериментов (динамический газ-осушитель в настоящее время 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 МС) 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/МС/МС во время создания метода и не совместим с методами МС, 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**



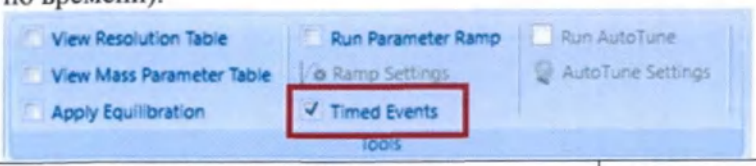
(Разработка метода), создайте новый **MS Method** (Метод МС), нажав на **New Method** (Новый метод) в ленте меню:

New Method	Новый метод
Load Method	Загрузить метод
Save Method As…	Сохранить метод как…
Method	Метод

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 сушильного газа.

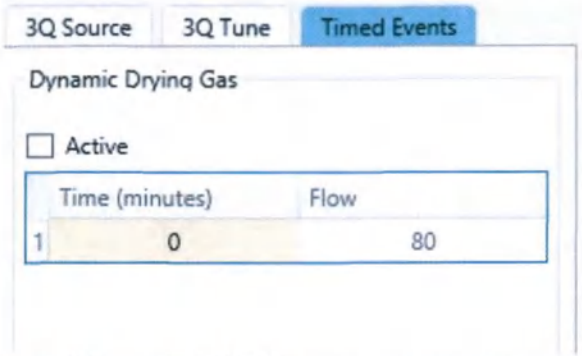
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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



View Resolution Table	Просмотр таблицы разрешений
View Mass Parameter Table	Просмотр таблицы параметров масс
Apply Equilibration	Применить уравновешивание
Run Parameter Ramp	Запуск линейного изменения параметров
Ramp Settings	Настройки линейного изменения
Timed Events	События по времени
Run AutoTune	Запустить автонастройку
AutoTune Settings	Параметры автонастройки
Tools	Инструменты

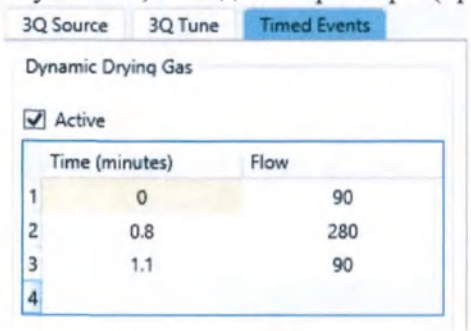
В левой части экрана **MS Experiments Creator** (Создание экспериментов МС) появится новая вкладка **Timed Events** (События по времени). Общие значения газа-осушителя на вкладке **3Q**



Source (Источник 3Q) будут выделены серым цветом и отменены значениями динамического газа-осушителя (введены на следующем этапе).

3Q Source	Источник 3Q
3Q Tune	Настройка 3Q
Timed Events	События по времени
Dynamic Drying Gas	Динамический газ-осушитель
Active	Активен
Time (minutes)	Время (минут)
Flow	Поток

4. Установите флажок Active (Активен), чтобы активировать функцию динамического газа-осушителя, и введите параметры (примерные значения показаны ниже):

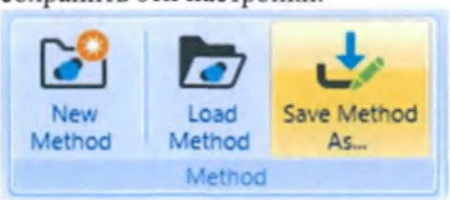


3Q Source	Источник 3Q
3Q Tune	Настройка 3Q
Timed Events	События по времени
Dynamic Drying Gas	Динамический газ-осушитель

Active	Активен
Time (minutes)	Время (минут)
Flow	Поток

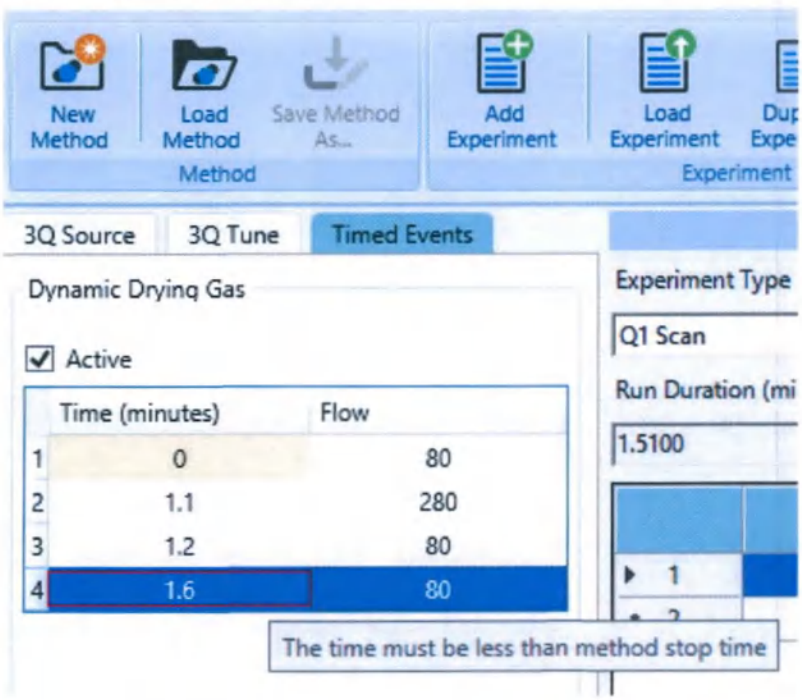
Значения потока динамического газа-осушителя должны находиться в диапазоне от 50 до 300, а время вводится с шагом 0,1 минуты (6 секунд). Значения времени должны вводиться в хронологическом порядке, а конечное значение должно быть меньше времени Длительности выполнения. Таблица для Динамического газа-осушителя допускает максимум 10 записей. Рекомендуемые значения газа-осушителя см. в разделе Оптимизация MPM - конфигурация прибора с высоким потоком. 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.



New Method	Новый метод
Load Method	Загрузить метод
Save Method As…	Сохранить метод как…
Method	Метод

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.



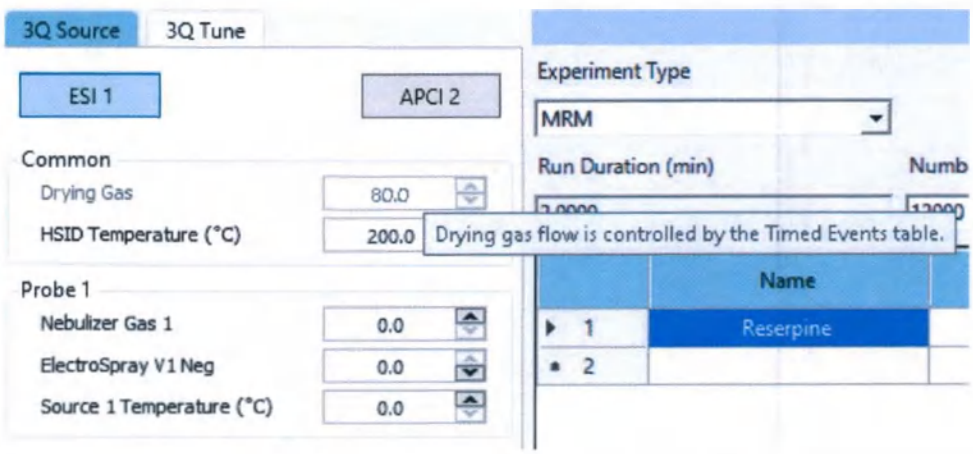
New Method	Новый метод
Load Method	Загрузить метод
Save Method As…	Сохранить метод как…
Method	Метод
Add Experiment	Добавить эксперимент
Load Experiment	Загрузить эксперимент
Duplicate Experiment	Дублировать эксперимент

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

3Q Source	Источник 3Q
3Q Tune	Настройка 3Q
Timed Events	События по времени
Dynamic Drying Gas	Динамический газ-осушитель
Active	Активен
Time (minutes)	Время (минут)
Flow	Поток
Experiment Type	Тип эксперимента
Q1 Scan	Сканирование Q1
Run Duration (min)	Продолжительность выполнения (мин)
The time must be less than method stop time	Время должно быть меньше, чем время остановки метода

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 включены и скрыты, если снят флажок **Timed Events** (События по времени) в ленте меню. Если вкладка Timed Events (События по времени) не видна и значение Общего газа-осушителя выделено серым цветом, то настройки динамического газа-осушителя активны. При наведении курсора мыши на настройки Общего 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.



3Q Source	Источник 3Q
3Q Tune	Настройка 3Q
ESI 1	ESI 1
APCI 2	APCI 2
Common	Общие
Drying Gas	Газ-осушитель
HSID Temperature (°C)	Температура HSID (°C)
Probe 1	Зонд 1
Nebulizer Gas 1	Газ распылителя 1
ElectroSpray V1 Neg	Электроспрей V1 отрицательный
Source 1 Temperature (°C)	Температура источника 1 (°C)
Experiment Type	Тип эксперимента
MRM	MRM
Run Duration (min)	Продолжительность выполнения (мин)
Drying gas flow is controlled by the Timed Events table.	Поток газа-осушителя регулируется по таблице Событий по времени.
Name	Название
Reserpine	Резерпин

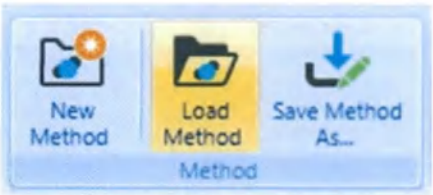
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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 МС, 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 отредактировать и сохранить для использования для Динамического газа-осушителя. Для добавления Динамического газа-осушителя к существующему методу МС, выполните следующие действия:

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



New Method	Новый метод
Load Method	Загрузить метод
Save Method As…	Сохранить метод как…
Method	Метод

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

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 раскрывающемся 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 темпов 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 соответствующие установленные параметры Автонастройки.
9. Для применения значения отчета сеанса Автонастройки к таблице Mass Parameter Ramp (Линейное изменение параметра массы), щелкните правой кнопкой мыши по графику

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

хроматограммы/спектра данных и выберите один из следующих вариантов, по желанию:

- Применить к текущему
- Применить ко всем

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.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 Автосемплера 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 Автосемплере для УВЭЖХ QSight MD при активной программе Simplicity 3Q MD может привести к сбою программы. Перед добавлением или удалением параметров планшета из Автосемплера завершайте работу программного обеспечения.

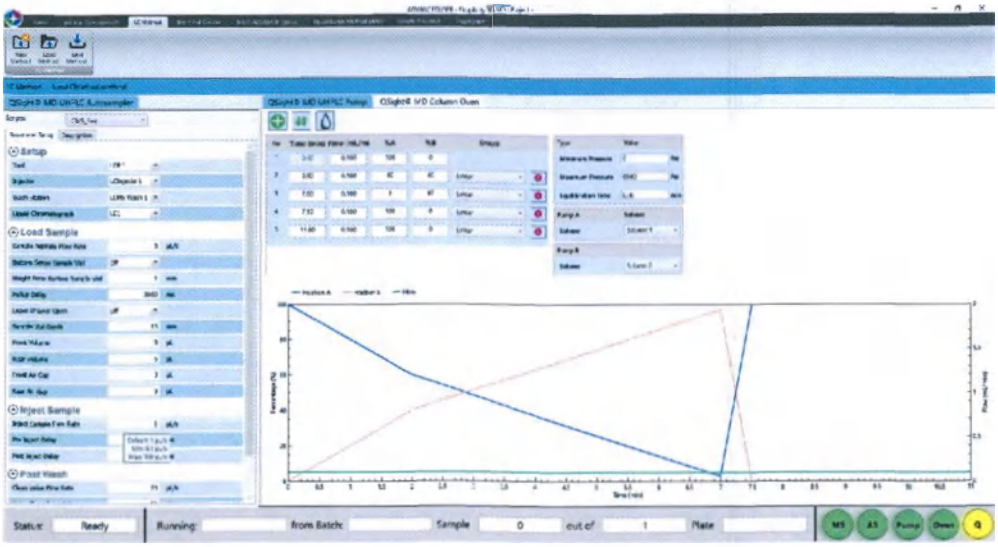


Примечание: Во избежание загрязнения керамики зонда и потенциального повреждения системы, Перед подключением и запуском ЖХ убедитесь, что газы и нагрев включены и подаются в систему.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.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).



ADVANCEDUSER - Simplicity 3Q MD : Project -	ПРОДВИНУТЫЙ ПОЛЬЗОВАТЕЛЬ - Simplicity 3Q MD : Проект -
Home	Главная
Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
New Method	Новый метод
Load Method	Загрузить метод
Save Method	Сохранить метод
LC Method NewLCMethod.method	Метод ЖХ NewLCMethod.method
QSight MD UHPLC Autosampler	Автосемплер QSight MD UHPLC Autosampler
Scripts:	Скрипты:
LCMS_Fast	LCMS_Fast
Parameter Setup	Конфигурация параметров
Description	Описание
Setup	Конфигурация
Tool	Инструмент
Injector	Дозатор
Wash Station	Блок промывки
Liquid Chromatograph	Жидкостный хроматограф
LCP1	LCP1
LCInjector1	LCInjector1
LCMS Wash 1	LCMS Wash 1
LC1	LC1
Load Sample	Загруженная проба
Sample Aspirate Flow Rate	Скорость потока при распылении пробы
Bottom Sense Sample Vial	Виала для проб, направленная вниз
Height From Bottom Sample Vial	Высота виалы для проб от нижней точки
Pullup Delay	Задержка перед извлечением иглы
Leave Drawer Open	Оставить выдвижную секцию открытой

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Sample Vial Depth	Глубина виалы для проб
Front Volume	Передний объем
Rear Volume	Задний объем
Front Air Gap	Передний воздушный зазор
Rear Air Gap	Задний воздушный зазор
Off	Выкл
mm	мм
µL	мкл
Inject Sample	Дозирование пробы
Inject Sample Flow Rate	Скорость потока при дозировании пробы
Pre Inject Delay	Задержка перед дозированием
Post Inject Delay	Задержка после дозирования
Post Wash	Последующая промывка
Clean Valve Flow Rate	Скорость потока через чистый клапан
Default: 1 µL/s	По умолчанию: 1 мкл/с
Min: 0.1 µL/s	Мин.: 0,1 мкл/с
Max: 100 µL/s	Макс.: 100 мкл/с
QSight MD UHPLC Pump	Насос QSight MD UHPLC Pump
QSight MD Column Oven	Колоночный термостат QSight MD Column Oven
No	№
Time (min)	Время (мин)
Flow (mL/mi	Поток (мл/мин)
%A	%A
%B	%B
Shape	Форма
Linear	Линейная
Type	Тип
Value	Значение
Minimum Pressure	Минимальное давление
Maximum Pressure	Максимальное давление
Equilibration Time	Время эквилибровки
Pump A	Насос А
Solvent	Растворитель
Solvent 1	Растворитель 1
Pump B	Насос В
Solvent	Растворитель
Solvent 2	Растворитель 2
Fraction A	Фракция А
Fraction B	Фракция В
Flow	Поток
Percentage (%)	Процентная доля (%)
Flow (mL/min)	Поток (мл/мин)
Time (min)	Время (мин)
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

2. Задайте необходимые параметры для каждого установленного компонента.

Варианты метода Автосемплера УВЭЖХ QSight MD

Редактор метода ЖХ для Автосемплера УВЭЖХ QSight MD предлагает:

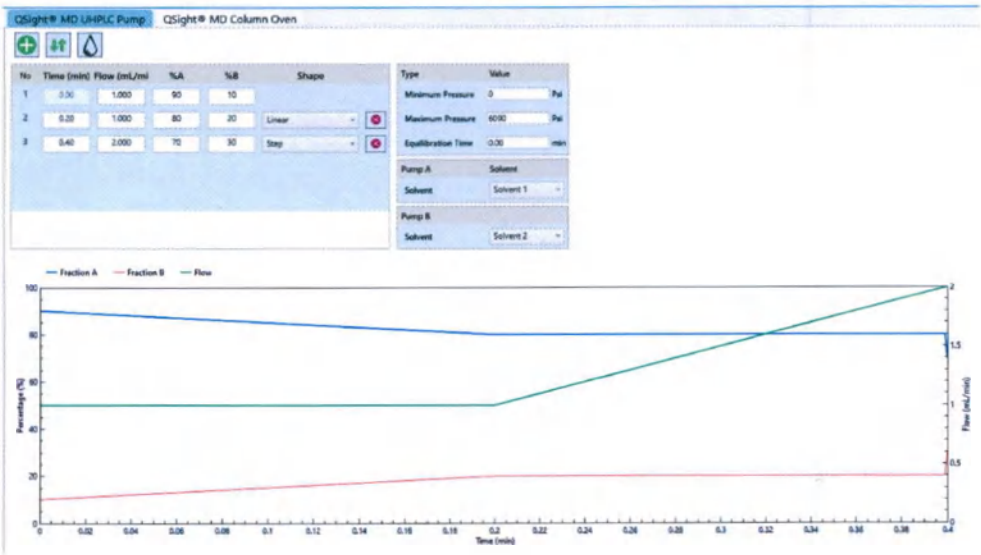
*LCMS_Только стандартный сценарий

Сценарии	• LCMS_Fast: Общие настройки Автосемплера без параметров промывки статора • LCMS_Standard: Общие настройки Автосемплера с параметрами промывки статора
Настройка	В этом разделе показаны текущие компоненты, установленные на Автосемплере.
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

Варианты метода насоса для УВЭЖХ QSight MD

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



QSight MD UHPLC Pump	Насос QSight MD UHPLC Pump
QSight MD Column Oven	Колоночный термостат QSight MD Column Oven
No	№
Time (min)	Время (мин)
Flow (mL/mi	Поток (мл/мин)
%A	%A
%B	%B
Shape	Форма
Linear	Линейная
Type	Тип
Value	Значение
Minimum Pressure	Минимальное давление
Maximum Pressure	Максимальное давление
Equilibration Time	Время уравновешивания
Pump A	Насос A
Solvent	Растворитель
Solvent 1	Растворитель 1
Pump B	Насос B
Solvent	Растворитель
Solvent 2	Растворитель 2
Fraction A	Фракция A
Fraction B	Фракция B
Flow	Поток
Percentage (%)	Процентная доля (%)
Flow (mL/min)	Поток (мл/мин)
Time (min)	Время (мин)

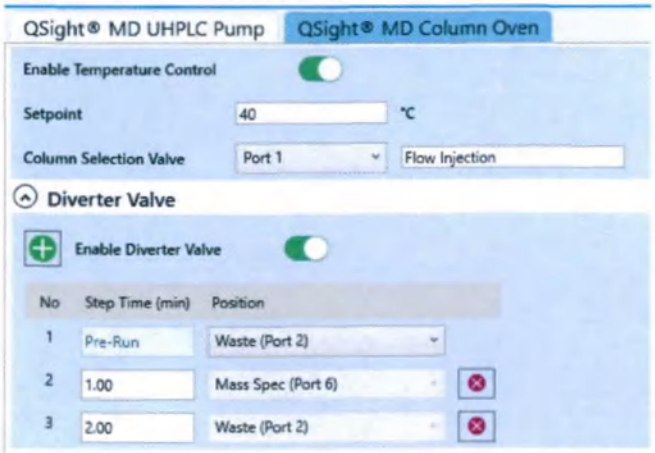
Редактор метода ЖХ для УВЭЖХ насоса QSight MD предлагает:

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).

Варианты метода термостата



QSight MD UHPLC Pump	Насос QSight MD UHPLC Pump
QSight MD Column Oven	Колоночный термостат QSight MD Column Oven
Enable Temperature Control	Включить температурный контроль
Setpoint	Уставка
Column Selection Valve	Клапан выбора колонки

Port 1	Порт 1
Flow Injection	Проточно-инжекционный
Diverter Valve	Разделяющий клапан
Enable Diverter Valve	Включить распределительный клапан
No	№
Step Time (min)	Время шага (мин)
Position	Положение
Pre-Run	Перед прогоном
Waste (Port 2)	Отходы (Порт 2)
Mass Spec (Port 6)	Масс-спектрометр (порт 6)
Waste (Port 2)	Отходы (Порт 2)

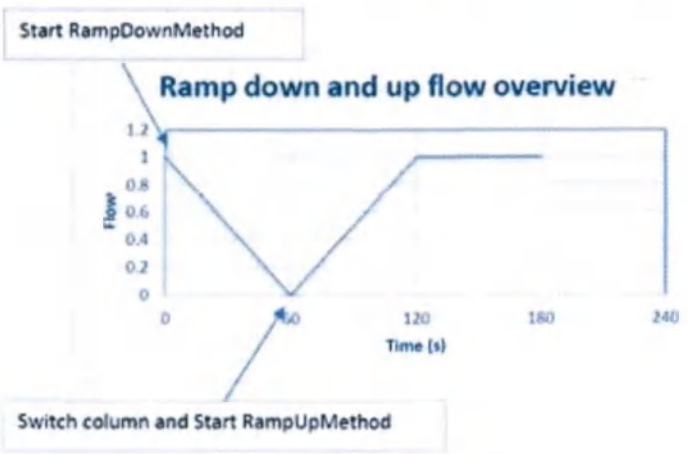
Настройки колоночного термостата QSight MD:

- **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 раскрывающемся списке Выбор колонки щелкните, 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:



Time (s)	Flow
0	1
60	0
120	1
180	1

StartRampDownMethod	Отходы (Порт 2)
Ramp down and up flow overview	Общий вид при линейном уменьшении и увеличении потока
Flow	Поток
Time (s)	Время (с)
Switch column and Start RampUpMethod	Переключиться на другую колонку и запустить метод линейного увеличения

В приведенном выше примере:

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

- 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.

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.

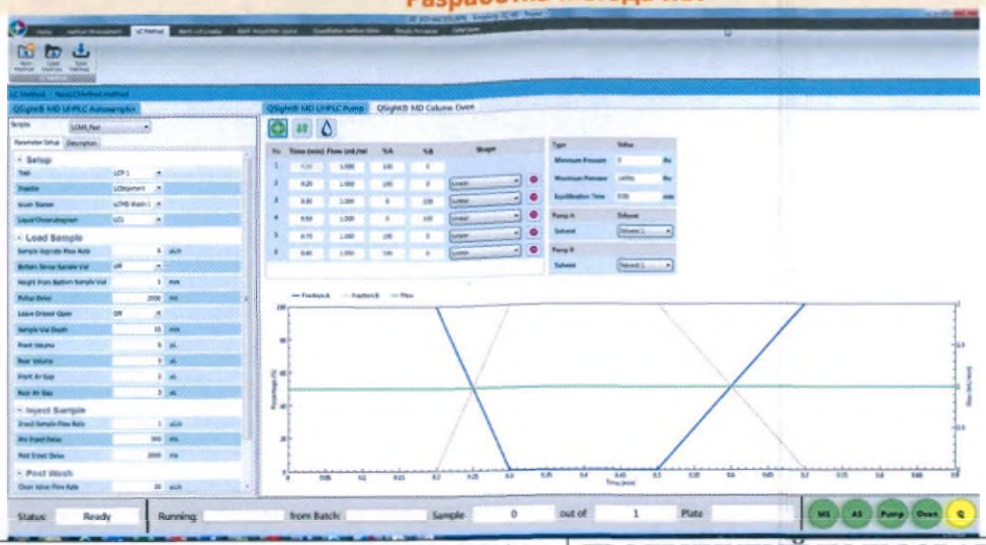
- **Отводящий клапан:**
  - +: Нажмите зеленую кнопку +, чтобы добавить этап в приведенную ниже таблицу списка процессов отводящего клапана (максимум 20 этапов). Для каждого этапа необходимо указать время. Этапы автоматически переключаются между масс-спектрометром и спускной линией.
  - Включение отводящего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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



ADVANCEDUSER - Simplicity 3Q MD : Project -	ПРОДВИНУТЫЙ ПОЛЬЗОВАТЕЛЬ - Simplicity 3Q MD : Проект -
Home	Главная
Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
New Method	Новый метод
Load Method	Загрузить метод
Save Method	Сохранить метод
LC Method NewLCMethod.method	Метод ЖХ NewLCMethod.method
QSight MD UHPLC Autosampler	Автосемплер QSight MD UHPLC Autosampler
Scripts:	Скрипты:
LCMS_Fast	LCMS_Fast
Parameter Setup	Конфигурация параметров
Description	Описание
Setup	Конфигурация
Tool	Инструмент
Injector	Дозатор
Wash Station	Блок промывки
Liquid Chromatograph	Жидкостный хроматограф
LCP1	LCP1
LCInjector1	LCInjector1
LCMS Wash 1	LCMS Wash 1
LC1	LC1
Load Sample	Загруженная проба
Sample Aspirate Flow Rate	Скорость потока при распылении пробы
Bottom Sense Sample Vial	Виала для пробы, направленная вниз
Height From Bottom Sample Vial	Высота виалы для пробы от нижней точки
Pullup Delay	Задержка перед извлечением иглы
Leave Drawer Open	Оставить выдвижную секцию открытой
Sample Vial Depth	Глубина виалы для пробы
Front Volume	Передний объем
Rear Volume	Задний объем
Front Air Gap	Передний воздушный зазор
Rear Air Gap	Задний воздушный зазор
Off	Выкл
mm	мм
µL	мкл

Inject Sample	Дозирование пробы
Inject Sample Flow Rate	Скорость потока при дозировании пробы
Pre Inject Delay	Задержка перед дозированием
Post Inject Delay	Задержка после дозирования
Post Wash	Последующая промывка
Clean Valve Flow Rate	Скорость потока через чистый клапан
QSight MD UHPLC Pump	Насос QSight MD UHPLC Pump
QSight MD Column Oven	Колоночный термостат QSight MD Column Oven
No	№
Time (min)	Время (мин)
Flow (mL/mi	Поток (мл/мин)
%A	%A
%B	%B
Shape	Форма
Linear	Линейная
Type	Тип
Value	Значение
Minimum Pressure	Минимальное давление
Maximum Pressure	Максимальное давление
Equilibration Time	Время эквилибровки
Pump A	Насос А
Solvent	Растворитель
Solvent 1	Растворитель 1
Pump B	Насос В
Solvent	Растворитель
Solvent 2	Растворитель 2
Fraction A	Фракция А
Fraction B	Фракция В
Flow	Поток
Percentage (%)	Процентная доля (%)
Flow (mL/min)	Поток (мл/мин)
Time (min)	Время (мин)
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

3. Запустите метод как есть или создайте Серию с помощью Создания списка серий.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Запуск серий

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

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

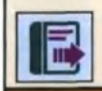
Элементы управления ленты меню Создания списка серий и Очередь сбора данных серии

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	

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

	**Show/Hide Concentration Table** (Показать/скрыть таблицу концентрации) — Нажмите, чтобы включить или выключить отображение таблицы концентрации.

Экран Создания списка серий	
Группа Автосемплеров	
	**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	

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Запуск серий

	**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.

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 Автосемплер 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 Автосемплер, 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.

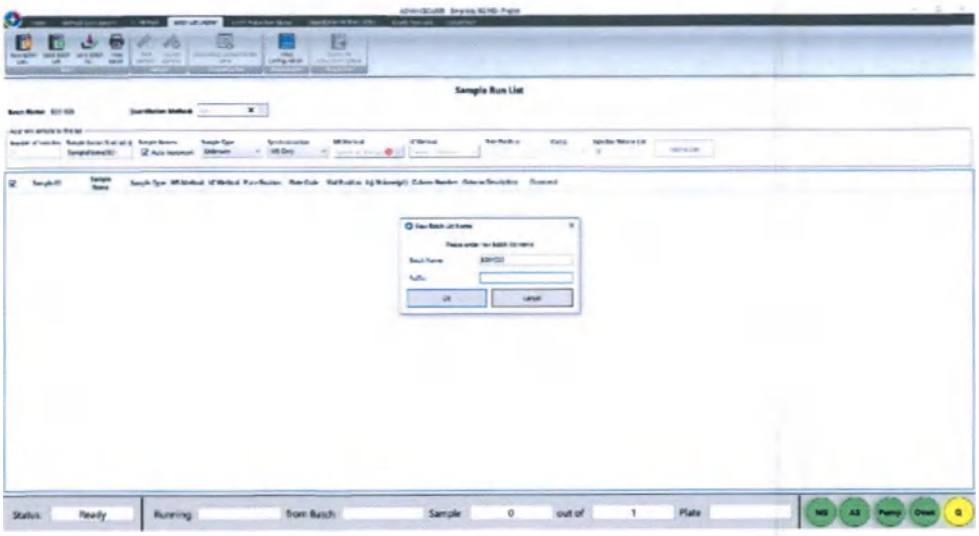
Примечание: Серии также могут быть созданы на MSMS Workstation (Рабочей станции МС/МС). В программе эти серии называются рабочими списками. Дополнительные сведения см. в разделе Запуск сборов.

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Примечание: Чтобы использовать существующий шаблон серии для создания новой серии, щелкните 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) :



ADVANCEDUSER - Simplicity 3Q MD : Project -	ПРОДВИНУТЫЙ ПОЛЬЗОВАТЕЛЬ - Simplicity 3Q MD : Проект -
Home	Главная
Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
New Batch List...	Новый список серий…
Load Brach List	Загрузить список серий
Save Batch As...	Сохранить список серий как…
Print Batch	Печать серии
Batch	Серия
Add Sample	Добавить пробу
Delete Sample	Удалить пробу
Show/Hide Concentration Table	Показать/Скрыть таблицу концентраций
Concentration	Концентрация
Trays Configuration	Конфигурация лотков
Autosampler	Автосемплер
Submit to Acquisition Queue	Добавить в очередь сбора данных
Acquisition	Сбор данных
Sample Run List	Список прогонов проб
Batch Name B201028	Название серии B201028
Quantitation Method	Метод количественного анализа
Add new sample to the list	Добавить новую пробу в список
Number of samples:	Количество проб:
Sample Name (Start with):	Название проб (формат начала):
SampleName0001	НазваниеПробы0001
Sample Names:	Названия проб
Auto Increment	Автоматическое увеличение номера
Sample Type:	Тип пробы:
Unknown	Неизвестный
Synchronization:	Синхронизация

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

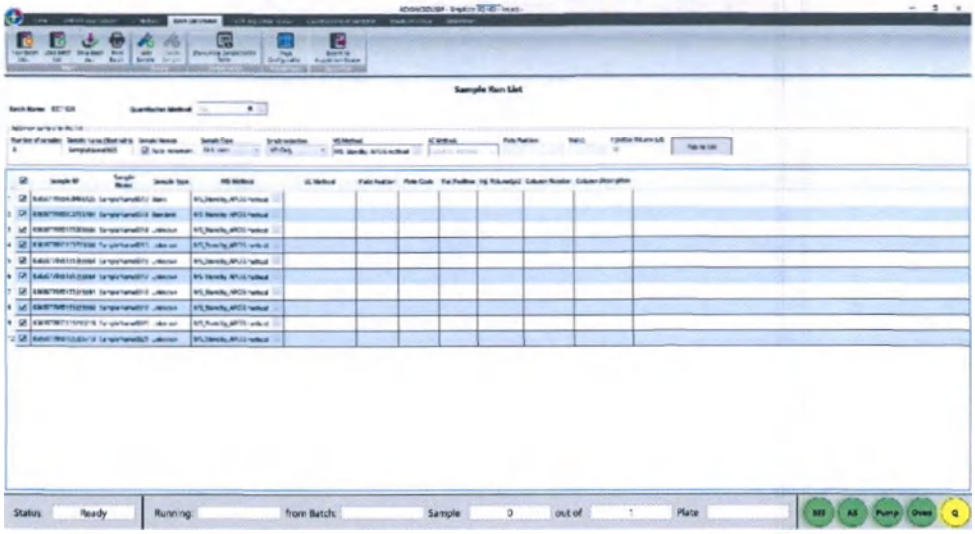
MS Only	Только МС
MS Method:	Метод МС:
Select MS Method	Выбрать метод МС
LC Method:	Метод ЖХ
Select LC Method	Выбрать метод ЖХ
Plate Position:	Положение планшета
Vial(s):	Виала (виалы):
Select MS Method	Выбрать метод МС
Select LC Method	Выбрать метод ЖХ
Injection Volume (ul):	Объем дозирования (мкл)
Add to List	Добавить в список
Sample ID	Идентификатор пробы
Sample Name	Название пробы
Sample Type	Тип пробы
MS Method	Метод МС
LC Method	Метод ЖХ
Plate Position	Положение планшета
Plate Code	Код планшета
Vial Position	Положение виалы
Inj. Volume (uL)	Объем дозирования (мкл)
Column Number	Номер колонки
Column Description	Описание колонки
Comment	Комментарий
New Batch List Name	Название списка для новой серии
Please enter new batch list name	Пожалуйста, введите название списка для новой серии
Batch Name:	Название серии:
Suffix:	Суффикс:
B201028	B201028
OK	ОК
Cancel	Отмена
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

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):

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Запуск серий



ADVANCEDUSER - Simplicity 3Q MD : Project -	ПРОДВИНУТЫЙ ПОЛЬЗОВАТЕЛЬ - Simplicity 3Q MD : Проект -
Home	Главная
Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
New Batch List...	Новый список серий…
Load Brach List	Загрузить список серий
Save Batch As...	Сохранить список серий как…
Print Batch	Печать серии
Batch	Серия
Add Sample	Добавить пробу
Delete Sample	Удалить пробу
Show/Hide Concentration Table	Показать/Скрыть таблицу концентраций
Concentration	Концентрация
Trays Configuration	Конфигурация лотков
Autosampler	Автосемплер
Submit to Acquisition Queue	Добавить в очередь сбора данных
Acquisition	Сбор данных
Sample Run List	Список прогонов проб
Batch Name B201028	Название серии B201028
Quantitation Method	Метод количественного анализа
Add new sample to the list	Добавить новую пробу в список
Number of samples:	Количество проб:
Sample Name (Start with):	Название проб (формат начала):
SampleName0022	НазваниеПробы0022
Sample Names:	Названия проб
Auto Increment	Автоматическое увеличение номера
Sample Type:	Тип пробы:
Unknown	Неизвестный
Synchronization:	Синхронизация
MS Only	Только МС
MS Method:	Метод МС:
Select MS Method	Выбрать метод МС
MS_Standby_APCI3.method	MS_Standby_APCI3.method
LC Method:	Метод ЖХ
Select LC Method	Выбрать метод ЖХ

Plate Position:	Положение планшета
Vial(s):	Виала (виалы):
Select MS Method	Выбрать метод МС
Select LC Method	Выбрать метод ЖХ
Injection Volume (ul):	Объем дозирования (мкл)
Add to List	Добавить в список
Sample ID	Идентификатор пробы
Sample Name	Название пробы
Sample Type	Тип пробы
MS Method	Метод МС
LC Method	Метод ЖХ
Plate Position	Положение планшета
Plate Code	Код планшета
Vial Position	Положение виалы
Inj. Volume (uL)	Объем дозирования (мкл)
Column Number	Номер колонки
Column Description	Описание колонки
SampleName0012	НазваниеПробы0012
SampleName0013	НазваниеПробы0013
SampleName0014	НазваниеПробы0014
SampleName0015	НазваниеПробы0015
SampleName0016	НазваниеПробы0016
SampleName0017	НазваниеПробы0017
SampleName0018	НазваниеПробы0018
SampleName0019	НазваниеПробы0019
SampleName0020	НазваниеПробы0020
SampleName0021	НазваниеПробы0021
Unknown	Неизвестно
MS_Standby_APCI3.method	MS_Standby_APCI3.method
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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).

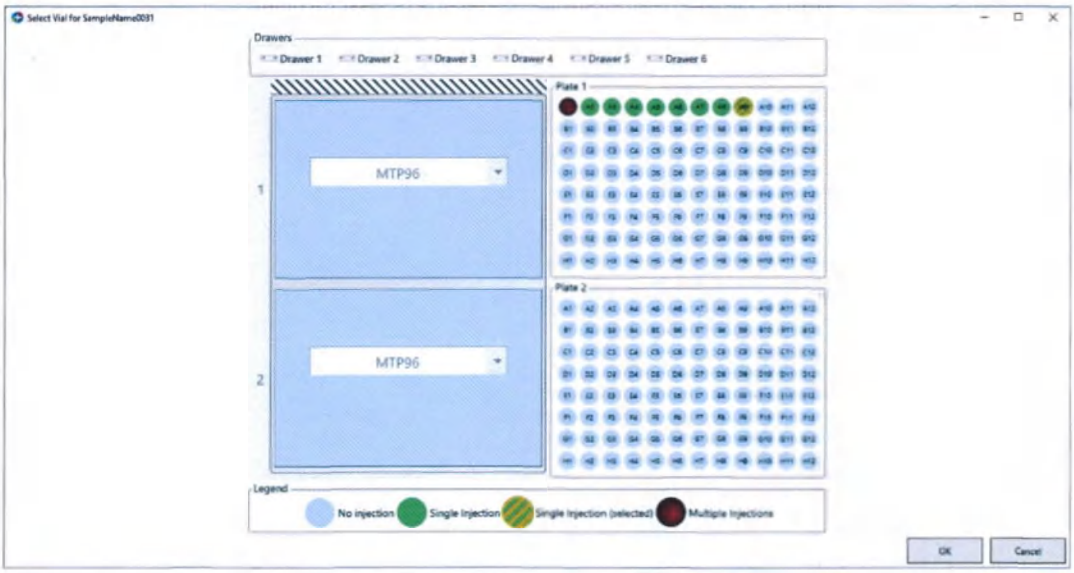
Работа с пробами

Рабочий процесс подготовки проб

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

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 щелкните 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.



Select vial for SampleName0031	Выбор виалы для НазваниеПробы0031
Drawers	Выдвижные ящики
Drawer 1	Ящик 1
Drawer 2	Ящик 2
Drawer 3	Ящик 3
Drawer 4	Ящик 4
Drawer 5	Ящик 5
Drawer 6	Ящик 6
MTP96	MTP96
Plate 1	Планшет 1

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Plate 2	Планшет 2
Legend	Условные обозначения
No injection	Без дозирования
Single injection	Одно дозирование
Single injection (selected)	Одно дозирование (выбранное)
Multiple injections	Множественное дозирование
OK	ОК
Cancel	Отмена

Рисунок 14: Диалоговое окно Trays Configuration (Конфигурации лотков)

Примечание: Если вы добавляете несколько проб с помощью одного и того же метода, щелкните в верхней или первой соответствующей ячейке таблицы MS Method (Метод МС), щелкните 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, щелкните 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.

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).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Понимание названий проб

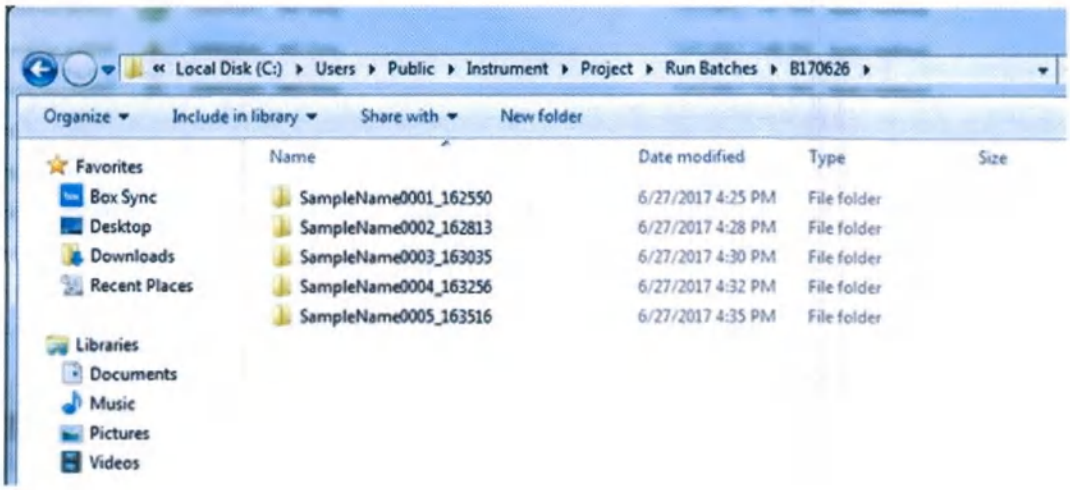
Идентификаторы проб

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.



Local Disk (C:) > Users > Public > Instrument > Project > Run Batches > B170626	Локальный диск (C:) > Пользователи > Публичный > Прибор > Проект > Текущие серии > B170626
Organize	Упорядочить
Include in library	Добавить в библиотеку
Share with	Поделиться
New folder	Новая папка
Favorites	Быстрый доступ
Box Sync	Синхронизация
Desktop	Рабочий стол
Downloads	Загрузки
Recent Places	Недавние места
Libraries	Библиотеки
Documents	Документы
Music	Музыка
Pictures	Изображения
Videos	Видео
Name	Имя
Date modified	Дата изменения
Type	Тип

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Size	Размер
SampleName0001_162550	НазваниеПробы0001.162550
SampleName0002_162813	НазваниеПробы0002_162813
SampleName0003_163035	НазваниеПробы0003_163035
SampleName0004_163256	НазваниеПробы0004_163256
SampleName0005_163516	НазваниеПробы0005_163516
File Folder	Папка с файлами

Рисунок 15: Пример названий проб, дополненных временными метками

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 (щелкните, 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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Запуск серий

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.

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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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

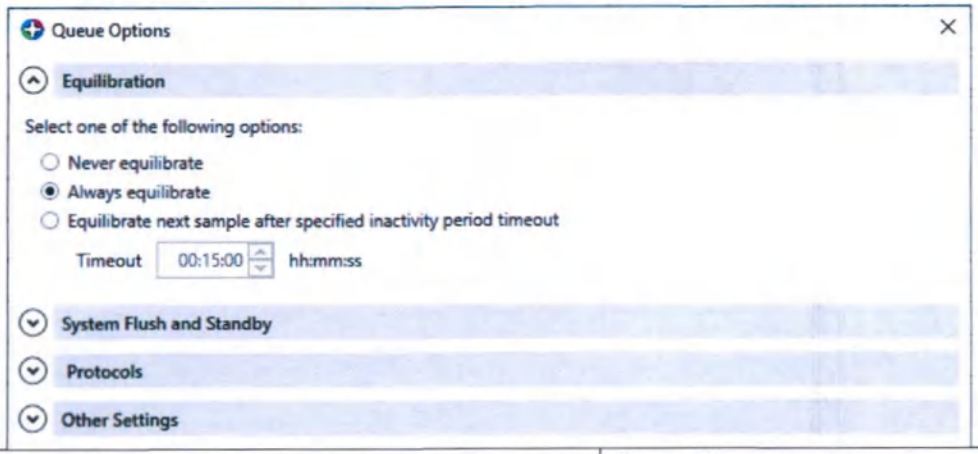
Настройка Equilibration (Уравновешивание) управляет методом ЖХ/МС, используемым для кондиционирования системы перед вводом проб и обычно проверяется. Выберите один из следующих вариантов:

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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Queue Options	Настройки очереди
Equilibration	Уравновешивание
Select one of the following options:	Выберите один из следующих вариантов:
Never equilibrate	Никогда не уравновешивать
Always equilibrate	Всегда уравновешивать
Equilibrate next sample after specified inactivity period timeout	Уравновешивать следующую пробу после указанного времени бездействия
Timeout	Время бездействия
hh:mm:ss	чч:мм:сс
System Flush and Standby	Промывка системы и режим ожидания
Protocols	Протоколы
Other Settings	Другие настройки

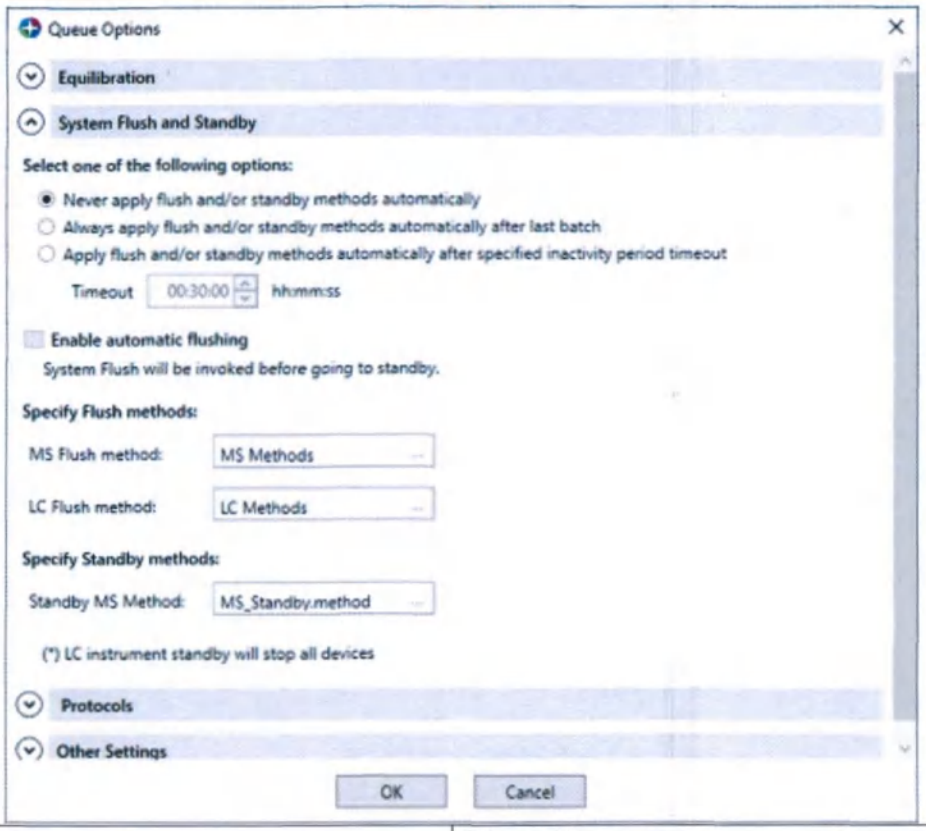
Рисунок 16: Queue options (Настройки очереди) - Equilibration (Уравновешивание)

System Flush and Standby (Промывка системы и режим ожидания)

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

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Queue Options	Настройки очереди
Equilibration	Уравновешивание
System Flush and Standby	Промывка и перевод системы в режим ожидания
Select one of the following options:	Выберите одну из следующих опций:
Never apply flush and/or standby methods automatically	Никогда не применять методы промывки и/или режим ожидания автоматически
Always apply flush and/or standby methods automatically after last batch	Всегда применять методы промывки и/или режим ожидания автоматически после последней серии
Apply flush and/or standby methods automatically after specified inactivity period timeout	Применять методы промывки и/или режим ожидания автоматически после истечения заданного времени бездействия
Timeout	Время бездействия
00:30:00 hh:mm:ss	00:30:00 чч:мм:сс
Enable automatic flushing	Включить автоматическую промывку
System Flush will be invoked before going to standby.	Системная промывка будет вызываться перед переходом в режим ожидания.
Specify Flush methods:	Укажите методы промывки:
MS Flush method:	Метод промывки МС:
MS Methods	Методы МС
LC Flush method:	Метод промывки ЖХ:
LC Methods	Методы ЖХ
Specify Standby methods:	Укажите методы ожидания:
Standby MS Method:	Метод ожидания MS:
MS_Standby method	Метод ожидания_ MS
(*) LC instrument standby will stop all devices	(*) Режим ожидания прибора ЖХ остановит все устройства.
Protocols	Протоколы
Other Settings	Другие настройки
OK	OK
Cancel	Отмена

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 промывка и/или перехода в режим ожидания автоматически:	Функция режима ожидания отключена.
Всегда применяйте методы промывка 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.

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

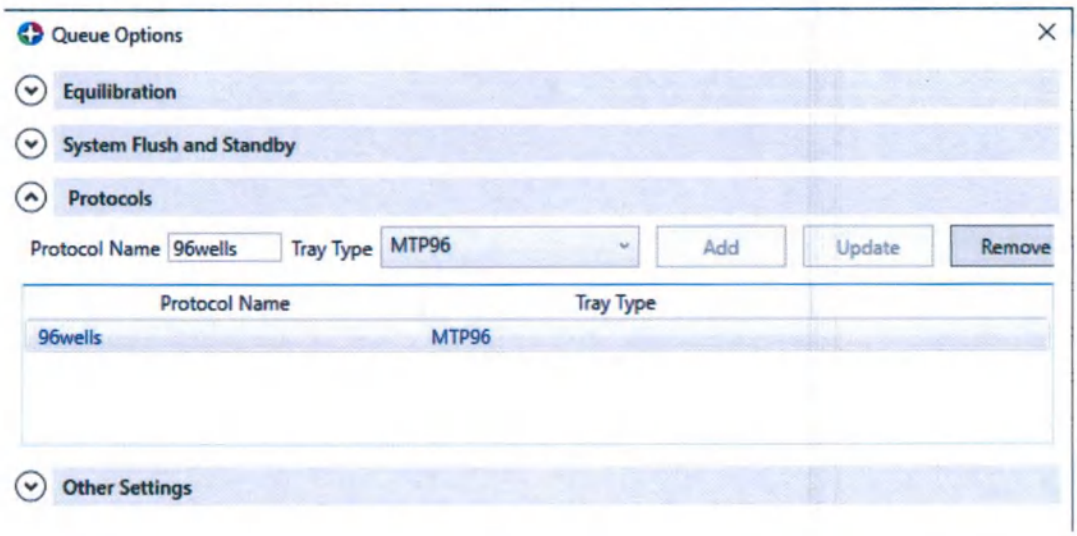
После создания или загрузки рабочего списка программа автоматически связывает рабочий список с методами в текущем проекте (при изменении активных проектов, программное обеспечение всегда ищет методы в новом активном проекте). Чтобы сбор данных по рабочему списку был успешным, методы необходимо называть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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Queue Options	Настройки очереди
Equilibration	Уравновешивание
System Flush and Standby	Промывка и перевод системы в режим ожидания
Protocols	Протоколы
Protocol Name	Название протокола
96wells	96 лунок
Tray Type	Тип лотка
MTP96	MTP96
Add	Добавить
Update	Обновить
Remove	Удалить
Other Settings	Другие настройки

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

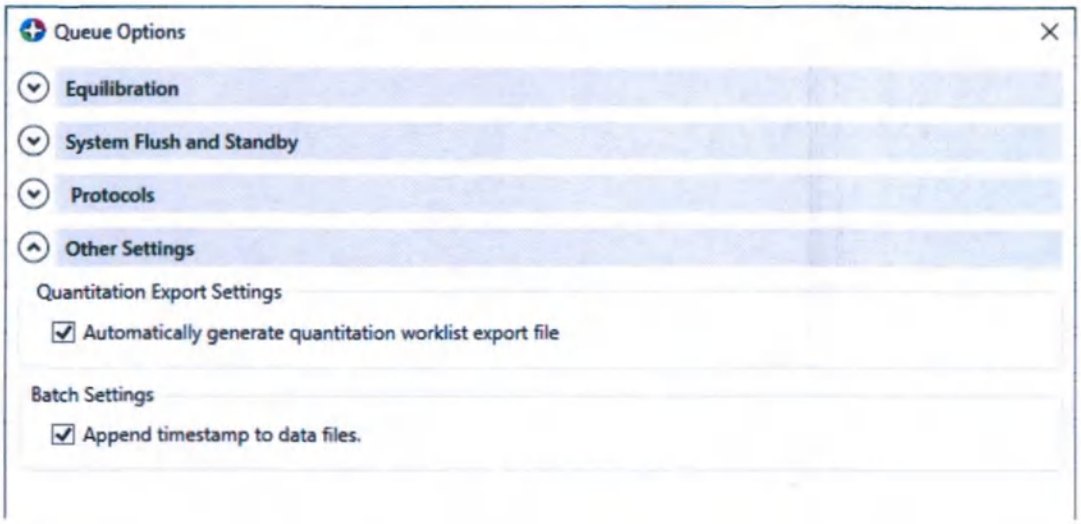
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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 (Настройки рабочего списка).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Настройки серии: Пользователь может указать автоматическое добавление временных меток к файлам данных (включено по умолчанию).



Queue Options	Настройки очереди
Equilibration	Уравновешивание
System Flush and Standby	Промывка и перевод системы в режим ожидания
Protocols	Протоколы
Other Settings	Другие настройки
Quantitation Export Settings	Настройки экспорта количественного анализа
Automatically generate quantitation worklist export file	Автоматическое создание файла экспорта рабочего списка количественного анализа
Batch Settings	Настройки серии
Append timestamp to data files.	Добавление временной метки к файлам данных

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. 84). 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:

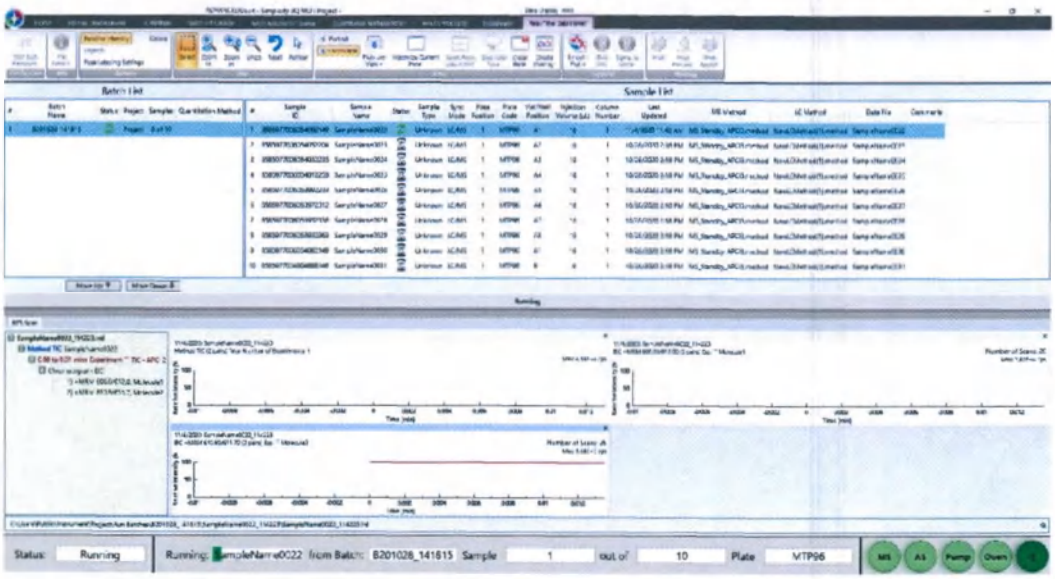
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Значок состояния	Функция
	Ожидание
	Выполняется сбор данных

Значок состояния	Функция
	Данные успешно собраны
	Сбор данных прерван
	Ошибка сбора данных

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:



ADVANCEDUSER - Simplicity 3Q MD : Project -	ПРОДВИНУТЫЙ ПОЛЬЗОВАТЕЛЬ - Simplicity 3Q MD : Проект -
Data Display Tools	Инструменты отображения данных
Home	Главная
Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Запуск серий

Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
Sort Sub Elements	Сортировка вложенных элементов
File Explorer	Проводник
File Details	Сведения о файле
Info	Информация
Relative intensity	Относительная интенсивность
Legend	Условные обозначения
Peak Labeling Settings	Настройки маркировки пиков
Colors	Цвета
Options	Опции
Select	Выбрать
Zoom in	Увеличить
Undo	Отменить
Reset	Сбросить
Pointer	Указатель
Plot	График
Portrait	Портретная ориентация
Landscape	Альбомная ориентация
Plots per View	Графиков на экране
Maximize current pane	Развернуть текущую панель
Reset from Maximized	Сбросить развернутую панель
Duplicate Pate	Дублировать панель
Close Pane	Закрыть панель
Create Overlay	Создать наложение
View	Просмотр
Smooth Plot	Сгладить график
EMS Info	Информация EMS
Signal to Noise	Сигнал/ шум
Analysis	Анализ
Print	Печать
Print Preview	Предварительный просмотр печати
Print Report	Печать отчета
Printing	Печать
Batch List	Список серий
Batch Name	Название серии
Status	Статус
Project	Проект
Samples	Пробы
Quantitation Method	Метод количественного анализа
Sample List	Список образцов
Sample ID	Идентификатор пробы
Sample Name	Имя пробы
Status	Статус
Sample Type	Тип пробы
Sync Mode	Режим синхронизации
Plate Position	Положение планшета
Plate Code	Код планшета
Vial/Well Position	Положение фиалы/лунки
Injection Volume (µL)	Объем инъекции (мкл)
Column Number	Номер колонки
Last Updated	Последнее обновление
MS Method	Метод МС
LC Method	Метод ЖХ
Data File	Файл данных
Comments	Комментарии

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

SampleName0022	НазваниеПробы0022
Unknown	Неизвестно
LC/MS	ЖХ/МС
MTP96	MTP96
MS_Standby_APCI13.method	МС_Ожидание_APCI13.method
NewLCMethod(1).method	НовыйЖХМетод (1).method
Move Up	Поднять
Move Down	Опустить
Running	В работе
RTS Scan	Скан RTS
SampleName0022_114223.ird	НазваниеПробы 0022_114223.ird
Method TIC SampleName0022	Метод TIC НазваниеПробы0022
0.00 to 0.01 mins Experiment "" TIC - APCI 2	0.00 - 0.01 минут Эксперимент "" TIC - APCI 2
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
1) + MRM 606.0/612.0, Moleculel	1) + MRM 606.0/612.0, Moleculel
2) + MRM 610.9/611.7, Molecule2	2) + MRM 610.9/611.7, Molecule2
11/4/2020: SampleName0022_114223	11/4/2020: НазваниеПробы0022_114223
Method TIC (2 pairs) Total Number of Experiments: 1	Метод TIC (2 пары) Всего экспериментов: 1
Relative intensity (%)	Относительная интенсивность (%)
Max: 4.59E+4 cps	Макс: 4.59E+4 имп/с
EIC *MRM 610.90/611.70 (2 pairs) Exp "" Molecule2	EIC *MRM 610.90/611.70 (2 pairs) Exp "" Молекула 2
EiC +MRM 606.00/612.03 (2 pairs) Exp "" Molecule1	EiC +MRM 606.00/612.03 (2 pairs) Exp "" Молекула 1
Time (min)	Время (мин)
C:\Users\Public\Instrument\Project\Run Batches\B201028_141815\SampleName0022_114223\SampleName0022_114223.ird	C:\Пользователи\Публичный\Прибор\Проект\Текущие серии\B201028_141815\НазваниеПробы0022_114223\НазваниеПробы0022_114223.ird
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

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) .

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

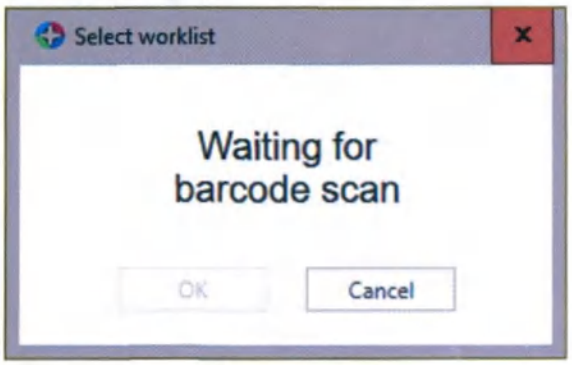
рабочего списка, можно хранить на сетевом диске (см. Настройки рабочего списка).

- 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.

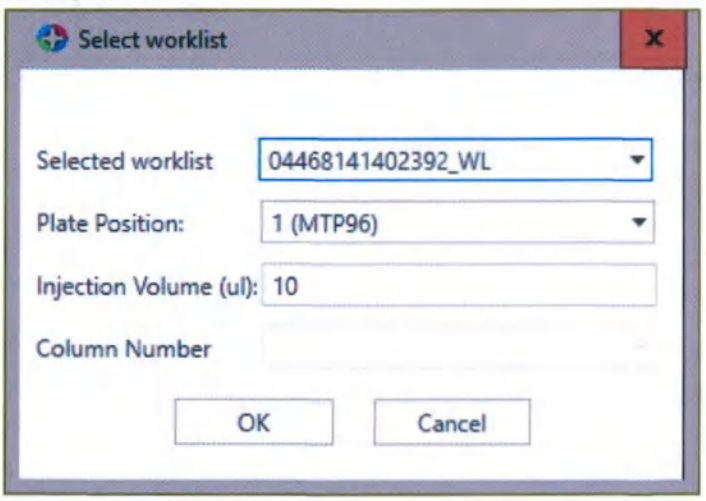
1. Запустите программное обеспечение Simplicity 3Q MD и перейдите на вкладку **Batch Acquisition Queue** (Очередь сбора данных серии) в ленте меню.
2. Нажмите кнопку **Load Worklist** (Загрузить рабочий список), откроется окно **Select Worklist** (Выбор рабочего списка):



Select worklist	Выбор рабочего списка
Waiting for barcode scan	Ожидание сканирования штрих-кода
OK	ОК
Cancel	Отмена

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:

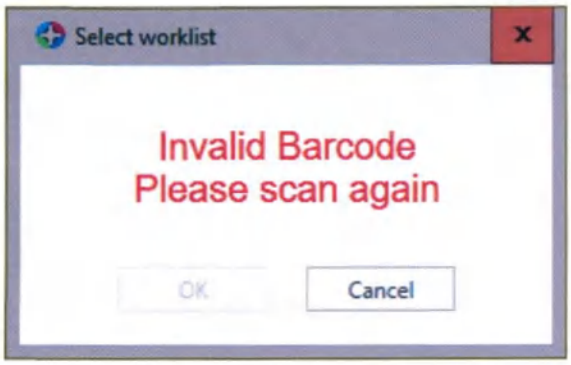


Select worklist	Выбор рабочего списка
Selected worklist	Выбранный рабочий список
Plate Position	Положение планшета
1 (MTP96)	1 (MTP96)
Injection Volume (µl)	Объем дозирования (мкл)
Column number	Номер колонки
OK	ОК

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Cancel	Отмена

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



Select worklist	Выбор рабочего списка
Invalid Barcode	Недействительный штрих-код
lease scan again	Пожалуйста, отсканируйте еще раз
ЭК	ОК
Cancel	Отмена

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.

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, Рабочая станция MC/MC) для отчетности и дальнейшего анализа. Для выполнения этих задач в программе предусмотрены два модуля, которые позволяют:

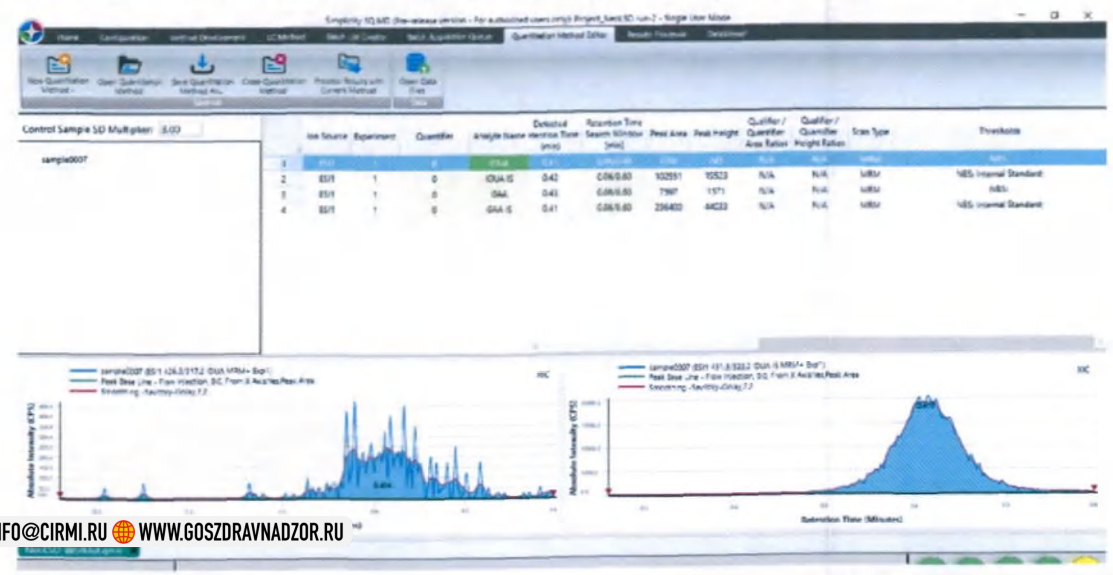
- Указывать параметры количественного анализа в Методе количественного анализа
- Обрабатывать данных для создания Таблицы результатов

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:



ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Количественная оценка данных и обработка результатов

Simplicity 3Q MD	Simplicity 3Q MD
Home	Главная
Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
New Quantitation Method	Новый метод количественного анализа
Open Quantitation Method	Открыть метод количественного анализа
Save Quantitation Method As...	Сохранить метод количественного анализа как...
Close Quantitation Method	Закрыть метод количественного анализа
Process Results with Current Method	Обработать результаты текущим методом
Method	Метод
Open Data Files	Открыть файлы данных
Data	Данные
Control Sample SD Multiplier:	Множитель СО контрольной пробы:
sample0007	Проба0007
Ion Source	Источник ионов
Experiment	Эксперимент
Quantifier	Квантификатор
Analyte Name	Название аналита
Detected Retention Time (min)	Обнаруженное время удерживания (мин)
Retention Time Search Window (min)	Окно поиска времени удерживания (мин)
Peak Area	Площадь пика
Peak Height	Высота пика
Qualifier / Quantifier Area Ratios	Отношения площади квалификатора / квантификатора
Qualifier / Quantifier Height Ratios	Отношение высоты пика квалификатора / квантификатора
Scan Type	Тип сканирования
Thresholds	Пороги
ESI1	ESI1
IDUA	IDUA
IDUA IS	IDUA IS
GAA	GAA
GAA IS	GAA IS
N/A	НЭД
MRM	MRM
NBS	NBS
NBS: Internal Standard	NBS: внутренний стандарт
Sample0007 (ESI1 426.2/3172 IDUA MRM- Exp1)	Проба0007 (ESI1 426.2/3172 IDUA MRM- Exp1)
Peak Base Line - Flow injection, B:0, From X Axis/Yes,Peak Area	Базовая линия пика – проточно-инжекционная, B:0, от оси X/Да, Площадь пика
Smoothing -Savitzky-Golay,7,2	Сглаживание -Савицкого-Голая,7,2
Absolute Intensity (CPS)	Абсолютная интенсивность (имп/с)
Retention Time (Minutes)	Время удерживания (минуты)
Sampie0007 (ESH 431.3/3222 IDUA IS MRM* Exp1)	Проба0007 (ESH 431.3/3222 IDUA IS MRM* Exp1)
Peak Base Line - Flow injection, B:0, From X AxisYes.Peak Area	Базовая линия пика – проточно-инжекционная, B:0, от оси X/Да.Площадь пика
Smoothing -Savitzky-Golay.7,2	Сглаживание -Савицкого-Голая.7,2
Absolute Intensity (CPS)	Абсолютная интенсивность (имп/с)
Retention Time (Minutes)	Время удерживания (минуты)
Status	Статус
Ready .	Готов
Running	В работе

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

Рисунок 21: Экран Quantitation Method (Метод количественного анализа)

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.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)	Редактировать содержимое ячейки
Copy (Копировать)	Копировать выделенные ячейки или строки в буфер обмена
Paste (Вставить)	Вставить содержимое буфера обмена в выбранную

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

	ячейку
aste Cell To All Below (Вставить ячейку во все ячейки ниже)	Вставить содержимое буфера обмена в сторону понижения, начиная с выбранной ячейки
Paste To All Selected (Вставить во все выбранные)	Вставить содержимое буфера обмена во все выбранные ячейки
Delete Row(s) (Удалить строку (строки))	Удаляет выбранную строку (строки)

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, щелкните 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 МС, 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 МС.

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

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 щелкните в ячейке, а затем выберите вариант из раскрывающегося 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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

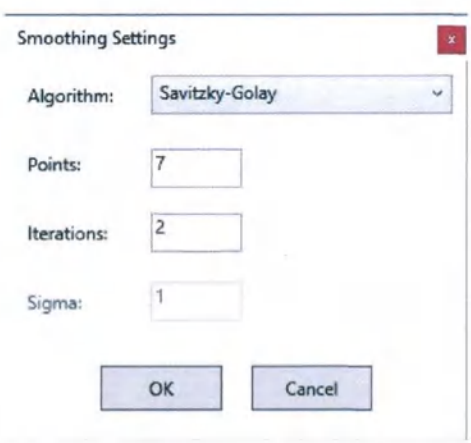
каждого пика программное обеспечение оценивает площадь пика как для пробы, так и для внутреннего стандарта, а затем рассчитывает измеренное значение (обычно равное рассчитанной концентрации).

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

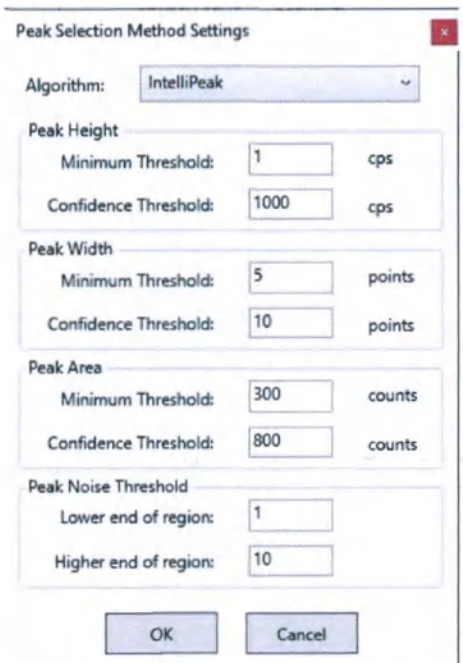
Smoothing (Сглаживание): Отображает выбранный алгоритм сглаживания (если таковой имеется) вместе с любыми заданными параметрами, такими как количество точек и заданных итераций. Для изменения настроек сглаживания для данной пробы, дважды щелкните в соответствующей ячейке **Smoothing** (Сглаживание);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

В раскрывающемся 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, щелкните правой кнопкой мыши в ячейке таблицы и выберите **Paste Cell 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 щелкните в соответствующей ячейке **Smoothing** (Сглаживание); появится диалоговое окно **Quantitation Method Settings** (Настройки метода количественного анализа) с выбранной вкладкой **Peak** (Пик):



Smoothing Settings	Настройки сглаживания
Algorithm	Алгоритм
Savitzky-Golay	Савицкого-Голая
Points	Точки
Iterations	Итерации
Sigma	Сигма
OK	OK
Cancel	Отмена



Peak Selection Method Settings	Настройки метода выбора пиков
Algorithm:	Алгоритм:
IntelliPeak	IntelliPeak
Peak height	Высота пика
Minimum Threshold:	Минимальный порог:
Confidence Threshold:	Порог доверия:
cps	имп/с
Peak Width	Ширина пика
points	точек
Peak Area	Площадь пика
counts	импульсов
Peak Noise Threshold	Порог шума пика
Lower end of region:	Нижний конец области:
Higher end of region:	Верхний конец области:
OK	OK
Cancel	Отмена

В раскрывающемся 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, щелкните 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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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, щелкните 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 щелкните 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 щелкните 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, щелкните по **Default Settings** (Настройки по умолчанию).
Thresholds (Пороговые значения):	Отображает верхний и нижний параметры флажков для пробы, введенные в MSMS Workstation.

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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 щелкните **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 щелкните **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.

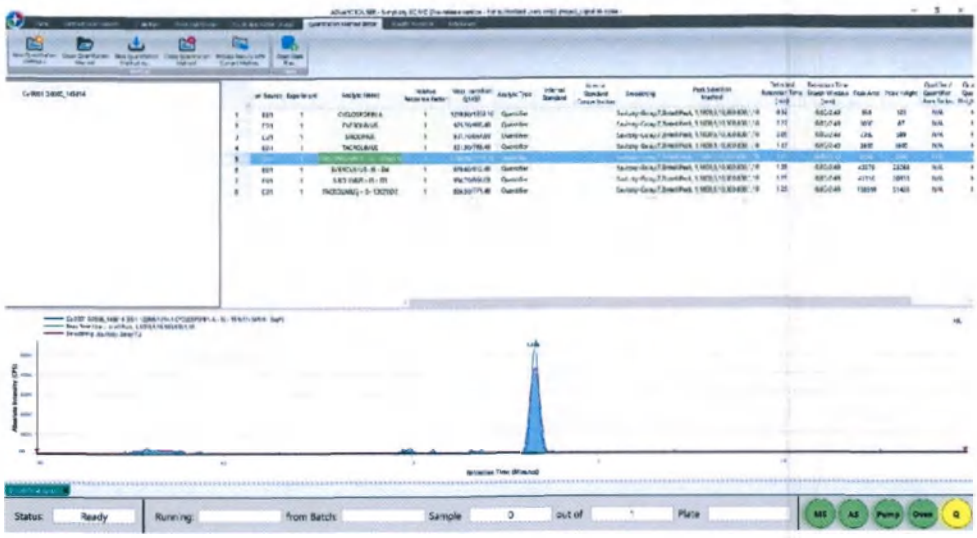
Как открыть существующий метод количественного анализа

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 щелкните **Open** (Открыть).
3. Измените настройки метода по желанию, а затем щелкните **Save Quantitation Method As (Сохранить метод количественной оценки как).** и введите уникальное имя для данного метода.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Определение параметров количественного анализа для интересующего пика

1. На экране **Quantitation Method Editor** (Редактор метода количественного анализа) в таблице данных найдите и дважды щелкните 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):



Simplicity 3Q MD	Simplicity 3Q MD
Home	Главная
Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
New Quantitation Method	Новый метод количественного анализа
Open Quantitation Method	Открыть метод количественного анализа
Save Quantitation Method As...	Сохранить метод количественного анализа как...
Close Quantitation Method	Закрыть метод количественного анализа
Process Results with Current Method	Обработать результаты текущим методом
Method	Метод
Open Data Files	Открыть файлы данных
Data	Данные
Cal0001 0.0005_143814	Cal0001 0.0005_143814
Ion Source	Источник ионов
Experiment	Эксперимент
Quantifier	Квантификатор
Analyte Name	Название аналита
Detected Retention Time (min)	Обнаруженное время удерживания (мин)
Retention Time Search Window (min)	Окно поиска времени удерживания (мин)
Peak Area	Площадь пика
Peak Height	Высота пика
Qualifier / Quantifier Area Ratios	Отношения площади квалификатора / квантификатора
Qualifier / Quantifier Height Ratios	Отношение высоты пика квалификатора / квантификатора
Quantifier	Квантификатор
Savitzky-Golay,7,2IntelliPeak,	Савицкого-Голая,7,2IntelliPeak,

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Cal0001 0.0005_143814 (ESI1 1230.9/1214.1 CYCLOSPORIN A - IS - 15N(11) MRM- Exp1)	Cal0001 0.0005_143814 (ESI1 1230.9/1214.1 ЦИКЛОСПОРИН А - ВС - 15N(11) MRM- Exp1)
Peak Base Line - IntelliPeak, 1,1000,5,10,300,800,1,10	Базовая линия пика - IntelliPeak, 1,1000,5,10,300,800,1,10
Smoothing -Savitzky-Golay,7,2	Сглаживание - Савицкого-Голая, 7,2
Absolute Intensity (CPS)	Абсолютная интенсивность (имп/с)
Retention Time (Minutes)	Время удерживания (минуты)
Sampie0007 (ESH 431.3/3222 IDUA IS MRM* Exp1)	Проба0007 (ESH 431.3/3222 IDUA IS MRM* Exp1)
Peak Base Line - Flow injection, B:0, From X AxisYes.Peak Area	Базовая линия пика – проточно-инжекционная, B:0, от оси X/Да.Площадь пика
Smoothing -Savitzky-Golay.7,2	Сглаживание -Савицкого-Голая.7,2
Absolute Intensity (CPS)	Абсолютная интенсивность (имп/с)
Retention Time (Minutes)	Время удерживания (минуты)
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

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.

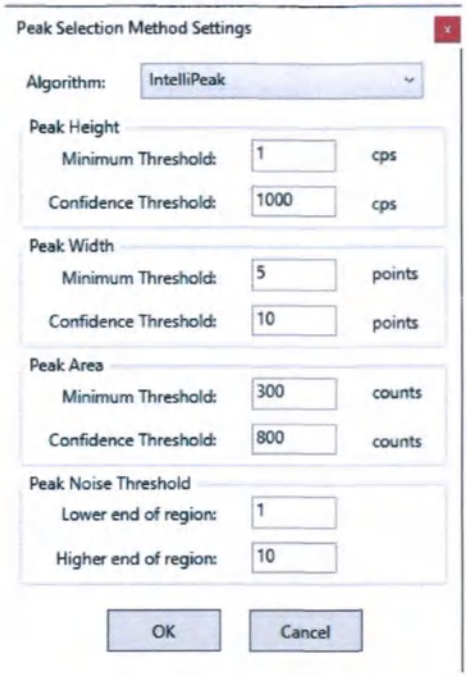
   Примечание: Концентрация Внутреннего стандарта должна быть установлена в строке Internal Standard (Внутренний стандарт), а не в строке Analyte (Аналит0. Например, если AnalyteA (АналитА) использует AnalyteA_IS (АналитА_IS) в качестве внутреннего стандарта, установите концентрацию в строке, относящейся к AnalyteA_IS.

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

   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. 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, щелкните 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 щелкните по соответствующей ячейке в колонке Метод выбора пика.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Peak Selection Method Settings	Настройки метода выбора пиков
Algorithm:	Алгоритм:
IntelliPeak	IntelliPeak
Peak height	Высота пика
Minimum Threshold:	Минимальный порог:
Confidence Threshold:	Порог доверия:
cps	имп/с
Peak Width	Ширина пика
points	точек
Peak Area	Площадь пика
counts	импульсов
Peak Noise Threshold	Порог шума пика
Lower end of region:	Нижний конец области:
Higher end of region:	Верхний конец области:
OK	OK
Cancel	Отмена

В раскрывающемся 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 щелкните мышью, чтобы определить

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

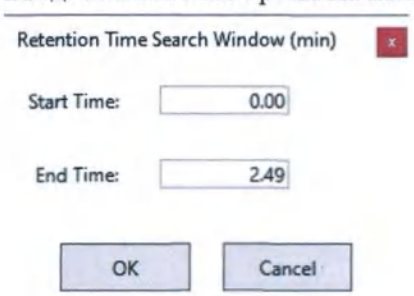
границы области фонового шума. Программное обеспечение будет оценивать все сигналы, обнаруженные за этими границами, в сочетании с другими факторами алгоритма, чтобы найти соответствующие пики. Для того, чтобы применить одинаковые настройки выбора пиков ко всем аналитам в вашем наборе проб, щелкните 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.

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 щелкните 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:



Retention Time Search Window	Окно поиска времени удерживания
Start Time	Время начала
End Time	Время окончания
OK	OK
Cancel	Отмена

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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, щелкните 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.

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.

Экран Results Processor (Обработчик результатов)(доступен всем пользователям)	
	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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

	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)	Копировать выделенные ячейки или строки в буфер обмена
Paste (Вставить)	Вставить содержимое буфера обмена в выбранную ячейку
Paste Cell To All Below (Вставить ячейку во все ячейки ниже)	Вставить содержимое буфера обмена в сторону понижения, начиная с выбранной ячейки
Paste To All Selected (Вставить во все выбранные)	Вставить содержимое буфера обмена во все выбранные ячейки

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 щелкните по ячейке, чтобы изменить тип пробы (выберите из следующего: Blank (Пустой), Double Blank (Двойной пустой), Quality Control) Контроль качества),

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

	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.
Average Peak Height (Средняя высота пика):	Отображает среднее значение высоты пика для всех одинаковых аналитов. Если значение не вычислено, в ячейке отображается Н/Д.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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 (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).

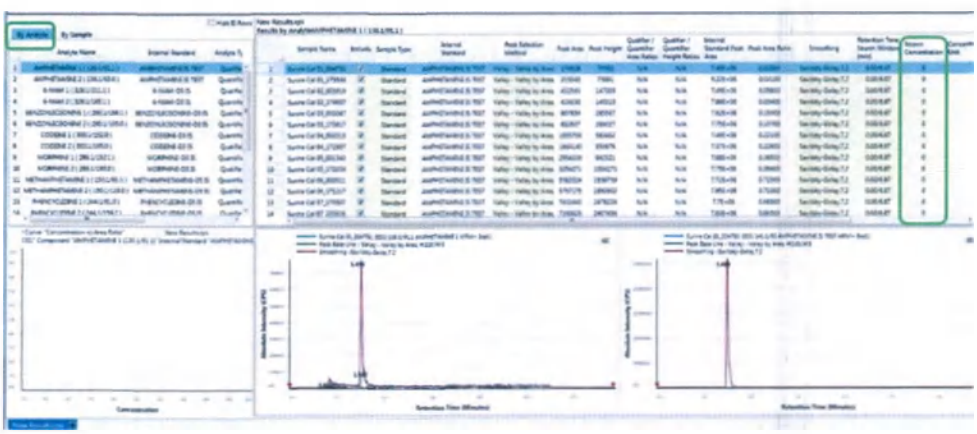
Примечание: Если колонки сигнала к шуму не видны в Таблице результатов, вам может понадобиться отобразить их, щелкнув правой кнопкой мыши на верхней строке и выбрав в меню Показать/Скрыть колонки.

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:



ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Hide IS Rows	Скрыть строки ВС
By Analyte	По аналиту
By Sample	По образцу
Analyte Name	Название анализа
Internal Standard	Внутренний стандарт
New Results.rpx	Новые результаты.rpx
Sample Name	Название пробы
Include	Включить
Sample Type	Тип пробы
Internal Standard	Внутренний стандарт
Peak Selection Method	Метод отбора пиков
Peak Area	Площадь пика
Peak Height	Высота пика
Qualifier / Quantifier / Area Ratios	Квалификатор / Квантификатор / Соотношения площади
Qualifier / Quantifier / Height Ratios	Квалификатор / Квантификатор / Соотношения высоты
Internal Standard	Внутренний стандарт
Peak Area	Площадь пика
Peak Area Ratio	Отношение площади пика
Smoothing	Сглаживание
Retention Time/Search Window (min)	Время удерживания/окно поиска (мин)
Known Concentration	Известная концентрация
Concentr. Unit	Концентрация Единица
Surine Cal.	Сурин Кал.
Standard	Стандарт
Valley - Valley by Area	Долина - Долина по площади
Savitzky-Golay,7,2s.rpx	Савицкого-Голая,7,2s.rpx
Peak Base Line - Valley - Valley Dy Area. H100, W:5	Базовая линия пик - долина - долина Dy Область. H100, W:5
Smoothing -Saviztky-Golay.7.2	Сглаживание -Савицкий-Голай.7.2
Concentration	Концентрация
Retention Time (Minutes)	Время удерживания (минуты)
New Results.rpx	Новые результаты.rpx

3. Выделите интересующий вас аналит. Появится соответствующая калибровочная кривая.
4. Выделите интересующую вас пробу. Соответствующая хроматограмма отображается справа внизу.
5. Дважды щелкните 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 щелкните 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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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 MC/MC 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).

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 MC
Положение виалы	Метод ЖХ
Объем инъекции (мкл)	Метод количественной оценки
Тип пробы	Версия программного обеспечения
Штрих-код планшета*	Модель прибора
Серийный номер прибора	

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

*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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.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:

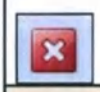
- Графический просмотр результатов в DataViewers (Средство просмотра данных)
- Для работы с графиками в DataViewer (Средство просмотра данных)
- Наложение графиков
- Отображение значений сигнала к шуму

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	

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

<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	

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, щелкните 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 щелкните 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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

	**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).

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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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, щелкните 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.

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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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:



Simplicity 3Q MD	Simplicity 3Q MD
Home	Главная
Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
Open Data	Открыть данные
Close	Закрыть
Sort Sub Elements	Сортировка вложенных элементов
File Explorer	Проводник
File Details	Сведения о файле
Info	Информация
Relative intensity	Относительная интенсивность
Legend	Условные обозначения
Peak Labeling Settings	Настройки маркировки пиков
Colors	Цвета
Options	Опции
Select	Выбрать

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Zoom in	Увеличить
Undo	Отменить
Reset	Сбросить
Pointer	Указатель
Plot	График
Portrait	Портретная ориентация
Landscape	Альбомная ориентация
Plots per View	Графиков на экране
Maximize current pane	Развернуть текущую панель
Reset from Maximized	Сбросить развернутую панель
Duplicate Pate	Дублировать панель
Close Pane	Закрыть панель
Create Overlay	Создать наложение
View	Просмотр
Smooth Plot	Сгладить график
EMS Info	Информация EMS
Signal to Noise	Сигнал/ шум
Analysis	Анализ
Print	Печать
Print Preview	Предварительный просмотр печати
Print Report	Печать отчета
Tab-0000	Таб-0000
7) + MRM 3843/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V	7) + MRM 3843/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V
8) + MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V	8) + MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V
9) + MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V	9) + MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V
10) + MRM 426.2/317.2, IDUA CC: -20 V, EV: 12 V	10) + MRM 426.2/317.2, IDUA CC: -20 V, EV: 12 V
11) + MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V	11) + MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V
12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V	12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V
RRF 0007.1358O2.ird	RRF 0007.135802.ird
Method TIC RRF 0007	Метод TIC RRF 0007
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ESI 1	0,00 - 0,59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI 1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
1) +MRM 391.4/2713, ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V	1) +MRM 391.4/2713, ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V
2) +MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V. EV: 11 V	2) +MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V. EV: 11 V
3) +MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V	3) +MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V
4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V, EV: 12 V	4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V, EV: 12 V
5) +MRM 489.3/3893, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V	5) +MRM 489.3/3893, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V
6) +MRM 503.3/4033, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V	6) +MRM 503.3/4033, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V
7) +MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V	7) +MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V
8) +MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V	8) +MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V
9) +MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V	9) +MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V
10) +MRM 426.2/317.2, IDUA, CC: -	10) +MRM 426.2/317.2, IDUA, CC: -20 V, EV: 12 V

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

20 V, EV: 12 V	
11) +MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V	11) +MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V
12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V	12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V
RRF 0008_135858.ird	RRF 0008_135858.ird
Method TIC RRF 0008	Метод TIC RRF 0008
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ES11	0,00 - 0,59 мин Эксперимент ""Эксперимент 1"TIC - ES11
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
1) + MRM 391.4/271 Д ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V	1) + MRM 391.4/271 E ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V
2) + MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V, EV: 11 V	2) + MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V, EV: 11 V
3) + MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V	3) + MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V
4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V.. EV: 12 V	4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V.. EV: 12 V
5) + MRM 489.3/389.3, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V	5) + MRM 489.3/389.3, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V
6) + MRM 503.3/403.3, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V	6) + MRM 503.3/403.3, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V
7) + MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V	7) + MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V
8) + MRM 398.4/264.3, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V	8) + MRM 398.4/264.3, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V
9) +MRM 412.4/264.3, GALC, CC: -28 V. EV: 10 V	9) +MRM 412.4/264.3, GALC, CC: -28 V. EV: 10 V
10) + MRM 426.2/317.2, IDUA. CC: -20 V. EV: 12 V	10) + MRM 426.2/317.2, IDUA. CC: -20 V. EV: 12 V
11) + MRM 4843/384.2, GLA CC: -20 V, EV: 11 V	11) + MRM 4843/384.2, GLA CC: -20 V, EV: 11 V
12) + MRM 4983/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V	12) + MRM 4983/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V
2018-05-24: RRF 0008.135858	2018-05-24: RRF 0008.135858
Method TIC (12 pairs) Total Number of Experiments: 1	Метод TIC (12 пар) Общее количество экспериментов: 1
Max: 4.70E-6 cps	Максимум: 4,70E-6 имп/с
RRF 0008.135853	RRF 0008.135853
391-40/271.30 (12 pairs) EV: 11 V CC: -28 V Exp "Experiment 1"	391-40/271.30 (12 пар) EV: 11 В CC: -28 В Эксп "Эксперимент 1"
Max: 4.00E-2 cps	Максимум: 4.00E-2 имп/с
5/24/2018: RRF 0008.135858	5/24/2018: RRF 0008.135858
EIC +MRM 405.40/264.30 (12 pairs) EV: 11 V CC: -28 V Exp "Experiment 1"	EIC +MRM 405.40/264.30 (12 пар) EV: 11 В CC: -28 В Exp "Эксперимент 1"
Max: 2.75E-2 cps	Максимум: 2,75E-2 имп/с
5/24/2018: RRF 0008.135858	5/24/2018: КК 0008.135858
EIC +MRM 417.40/264.30 (12 pairs) EV: 10 V CC: -28 V Exp "Experiment 1"	EIC +MRM 417.40/264.30 (12 пар) EV: 10 В CC: -28 В "Эксперимент 1"
Max: 9.82E-5 cps	Максимум: 9,82E-5 имп/с
5/24/2018: RR= 0008.135858	5/24/2018: RR= 0008.135858
EIC +MRM 431.30/322.20 (12 pairs) EV: 12 V CC: -20 V Exp "Experiment 1"	EIC +MRM 431.30/322.20 (12 пар) EV: 12 В CC: -20 В Exp "Эксперимент 1".
Max: 1.0OE-2 cps	Максимум: 1,0OE-2 имп/с
5/24/2018: RRF 0038.135858	5/24/2018: RRF 0038.135858

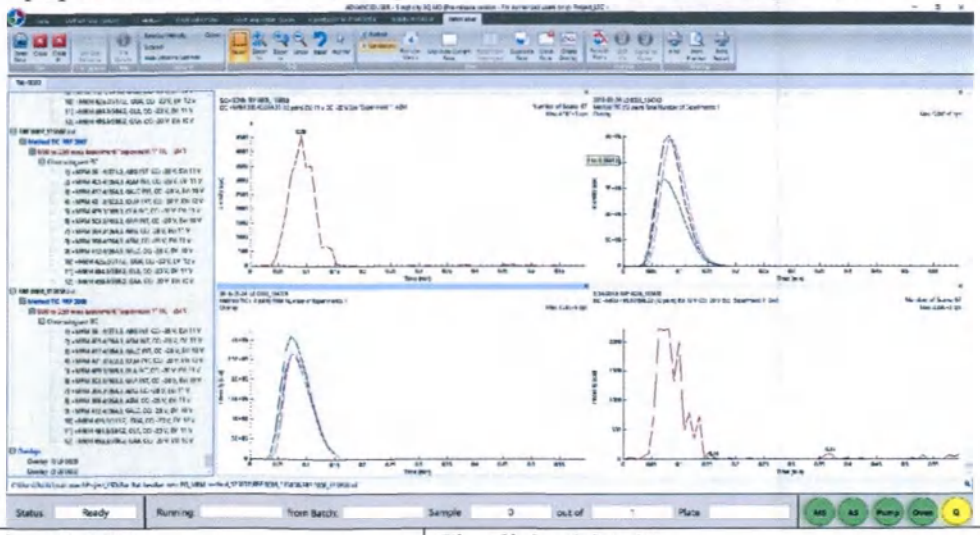
EIC +MRM 48930/389.30 (12 pairs) EV: 11 V CC: -20 V Exp "Experiment 1"	EIC +MRM 48930/389.30 (12 пар) EV: 11 В CC: -20 В Exp "Эксперимент 1"-.
Max: 1.42E-6 cps	Максимум: 1,42E-6 имп/с
5/24/2018: RRF 0008.135858	5/24/2018: RRF 0008.135858
EIC +MRM 503.30/403.30 (12 pairs) EV: 10 V CC: -20 V Exp "Experiment 1"	EIC +MRM 503.30/403.30 (12 пар) EV: 10 В CC: -20 В Exp Эксперимент 1"
Max: 8.13E-3 cps	Максимум: 8,13E-3 имп/с
5/24/2018: RRF 0038.135858	5/24/2018: RRF 0038.135858
EIC +MRM 384.30/264.33 (12 pairs) EV: 11 V CC: -28 V Exp "Experiment 1"	EIC +MRM 384.30/264.33 (12 пар) EV: 11 В CC: -28 В Exp Эксперимент 1"
Max: 4.03E-2 cps	Максимум: 4,03E-2 имп/с
5/24/2018: RRF 0008.135858	5/24/2018: RRF 0008.135858
EIC +MRM 398.40/264.30 (12 pairs) EV: 11 V CC: -28 V Exp "Experiment 1"	EIC +MRM 398.40/264.30 (12 пар) EV: 11 В CC: -28 В Exp "Эксперимент 1"
Max: 4.58E-3 cps	Максимум: 4,58E-3 имп/с
5/24/2018: RRF 0008.135858	5/24/2018: RRF 0008.135858
EIC +MRM 412.40/264.30 (12 pairs) EV: 10 V CC; -28 V Exp "Experiment 1"	EIC +MRM 412.40/264.30 (12 пар) EV: 10 В CC; -28 В Exp "Эксперимент 1"
Max: 9.60E-5 cps	Максимум: 9,60E-5 имп/с
5/24/2018: RRF 0008.135858	5/24/2018: RRF 0008.135858
EIC +MRM 42620/317.20 (12 pairs) EV: 12 V CC: -20 V Exp "Experiment 1"	EIC +MRM 42620/317.20 (12 пар) EV: 12 В CC: -20 В Exp "Эксперимент 1"
Max: 125E*2 cps	Максимум: 125E*2 имп/с
5/24/2018: RRF 0008.135858	5/24/2018: RRF 0008.135858
EIC +MRM 484.30/384.20 (12 pairs) EV: 11 V CC: -20 V Exp "Experiment 1"	EIC +MRM 484.30/384.20 (12 пар) EV: 11 В CC: -20 В "Эксперимент 1"
Max: 1.39E-6 cps	Максимум: 1,39E-6 имп/с
Relative Intensity (%)	Относительная интенсивность (%)
Time (min)	Время (мин)
C:\Users\Public\Instrument\Project_LSD\Run Batches\Baroness PQ_MRM methocM25051 \RRF 0008_135858\RRF 0008_135858.ird	C:\Пользователи\Публичный\Прибор\Проект_LSD\Текущие_серии \Baroness PQ_MRM метод_M25051 \RRF 0008_135858\RRF 0008_135858.ird
Printing	Печать
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

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).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Просмотр, рецензирование и построение графиков данных

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



Simplicity 3Q MD -	Simplicity 3Q MD
Home	Главная
Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
Open Data	Открыть данные
Close	Закрыть
Sort Sub Elements	Сортировка вложенных элементов
File Explorer	Проводник
File Details	Сведения о файле
Info	Информация
Relative intensity	Относительная интенсивность
Legend	Условные обозначения
Peak Labeling Settings	Настройки маркировки пиков
Colors	Цвета
Options	Опции
Select	Выбрать
Zoom in	Увеличить
Undo	Отменить
Reset	Сбросить
Pointer	Указатель
Plot	График
Portrait	Портретная ориентация
Landscape	Альбомная ориентация
Plots per View	Графиков на экране
Maximize current pane	Развернуть текущую панель
Reset from Maximized	Сбросить развернутую панель
Duplicate Pate	Дублировать панель
Close Pane	Закрыть панель
Create Overlay	Создать наложение
View	Просмотр
Smooth Plot	Сгладить график
EMS Info	Информация EMS
Signal to Noise	Сигнал/ шум
Analysis	Анализ
Print	Печать
Print Preview	Предварительный просмотр печати

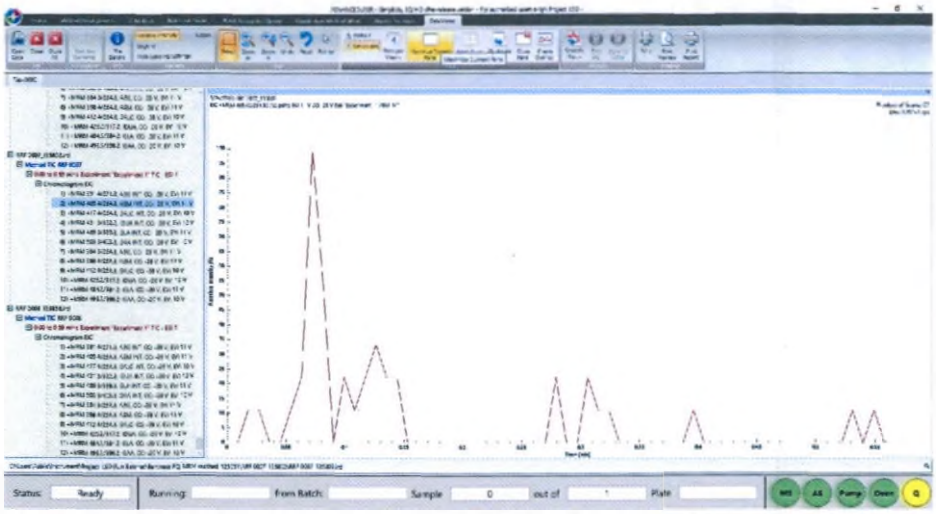
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Print Report	Печать отчета
Tab-0000	Таб-0000
7) + MRM 3843/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V	7) + MRM 3843/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V
8) + MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V	8) + MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V
9) + MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V	9) + MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V
10) + MRM 426.2/317.2, IDUA CC: -20 V, EV: 12 V	10) + MRM 426.2/317.2, IDUA CC: -20 V, EV: 12 V
11) + MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V	11) + MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V
12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V	12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V
RRF 0007.1358O2.ird	RRF 0007.135802.ird
Method TIC RRF 0007	Метод TIC RRF 0007
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ESI 1	0,00 - 0,59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI 1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
1) +MRM 391.4/2713, ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V	1) +MRM 391.4/2713, ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V
2) +MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V. EV: 11 V	2) +MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V. EV: 11 V
3) +MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V	3) +MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V
4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V, EV: 12 V	4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V, EV: 12 V
5) +MRM 489.3/3893, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V	5) +MRM 489.3/3893, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V
6) +MRM 503.3/4033, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V	6) +MRM 503.3/4033, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V
7) +MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V	7) +MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V
8) +MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V	8) +MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V
9) +MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V	9) +MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V
10) +MRM 426.2/317.2, IDUA, CC: -20 V, EV: 12 V	10) +MRM 426.2/317.2, IDUA, CC: -20 V, EV: 12 V
11) +MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V	11) +MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V
12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V	12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V
RRF 0008_135858.ird	RRF 0008_135858.ird
Method TIC RRF 0008	Метод TIC RRF 0008
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ES11	0,00 - 0,59 мин Эксперимент ""Эксперимент 1"TIC - ES11
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
1) + MRM 391.4/271 Д ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V	1) + MRM 391.4/271 E ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V
2) + MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V, EV: 11 V	2) + MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V, EV: 11 V
3) + MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V	3) + MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V
4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V.. EV: 12 V	4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V.. EV: 12 V
5) + MRM 489.3/389.3, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V	5) + MRM 489.3/389.3, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

6) + MRM 503.3/403.3, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V	6) + MRM 503.3/403.3, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V
7) + MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V	7) + MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V
8) + MRM 398.4/264.3, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V	8) + MRM 398.4/264.3, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V
9) +MRM 412.4/264.3, GALC, CC: -28 V. EV: 10 V	9) +MRM 412.4/264.3, GALC, CC: -28 V. EV: 10 V
10) + MRM 426.2/317.2, IDUA. CC: -20 V. EV: 12 V	10) + MRM 426.2/317.2, IDUA. CC: -20 V. EV: 12 V
11) + MRM 4843/384.2, GLA CC: -20 V, EV: 11 V	11) + MRM 4843/384.2, GLA CC: -20 V, EV: 11 V
12) + MRM 4983/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V	12) + MRM 4983/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V
2018-05-24: RRF 0008.135858	2018-05-24: RRF 0008.135858
5/24/2013: RRF 0008.135858	5/24/2013: RRF 0008.135858
EIC +MRM 398.43/264.30 (12 pairs) EV: 11 V CC: -28 V Exp "Experiment 1" ASM	EIC +MRM 398.43/264.30 (12 пар) EV: 11 В CC: -28 В Эксперимент 1 ASM
Number of Scans: 67	Количество сканирований: 67
Max: 4.53E-3 cps	Макс: 4.53E-3 имп/с
2018-05-24: L9 0035.134740	2018-05-24: L9 0035.134740
Method TIC (12 pairs) Total Number of Experiments: 1	Метод TIC (12 пар) Общее количество экспериментов: 1
Overlay	Наложение
Max: 5.04E-6 cps	Максимум: 5.04E-6 имп/с
0 to 0.59413	от 0 до 0.59413
201S-05-24: L8 0032.134009	201S-05-24: L8 0032.134009
Method TIC (12 pairs) Total Number of Experiments: 1	Метод TIC (12 пар) Общее количество экспериментов: 1
Overlay	Наложение
Max: 3.28E-6 cps	Максимум: 3.28E-6 имп/с
5/24/2018: RRF 0008.135858	5/24/2018: RRF 0008.135858
EIC +MRM 498.30/398.20 (12 pairs) EV: 10 V CC: -20 V Exp "Experiment 1" GAA	EIC +MRM 498.30/398.20 (12 пар) EV: 10 В CC: -20 В Эксперимент 1 GAA
Number of Scans: 67	Количество сканирований: 67
Max: 2.23 E-3 cps	Максимум: 2.23 E-3 имп/с
Relative Intensity (%)	Относительная интенсивность (%)
Time (min)	Время (мин)
C:\Users\Public\Instrument\Project_LSD\Run Batches\Baroness PQ_MRM methocM25051 \RRF 0008_135858\RRF 0008_135858.ird	C:\Пользователи\Публичный\Прибор\Проект_LSD\Текущие_серии\Baroness PQ_MRM метод_M25051 \RRF 0008_135858\RRF 0008_135858.ird
Printing	Печать
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

4. Вы можете просмотреть данные либо в относительном масштабе (у-скорректированные), либо в абсолютном масштабе, соответственно выбрав или отменив выбор **Relative Intensity** (Относительная интенсивность).
5. Чтобы увеличить график, щелкните 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:

Simplicity 3Q MD (Pre-release version - For authorized users only): Project.LSD -	Simplicity 3Q MD (Предварительная версия - Только для авторизованных пользователей): Project.LSD -
Home	Главная
Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
Open Data	Открыть данные
Close	Закрыть
Sort Sub Elements	Сортировка вложенных элементов
File Explorer	Проводник
File Details	Сведения о файле
Info	Информация
Relative intensity	Относительная интенсивность
Legend	Условные обозначения
Peak Labeling Settings	Настройки маркировки пиков
Colors	Цвета
Options	Опции
Select	Выбрать
Zoom in	Увеличить
Undo	Отменить
Reset	Сбросить
Pointer	Указатель
Plot	График
Portrait	Портретная ориентация
Landscape	Альбомная ориентация
Plots per View	Графиков на экране
Maximize current pane	Развернуть текущую панель
Reset from Maximized	Сбросить развернутую панель
Duplicate Pate	Дублировать панель
Close Pane	Закрыть панель

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Просмотр, рецензирование и построение графиков данных

Create Overlay	Создать наложение
View	Просмотр
Smooth Plot	Сгладить график
EMS Info	Информация EMS
Signal to Noise	Сигнал/ шум
Analysis	Анализ
Print	Печать
Print Preview	Предварительный просмотр печати
Print Report	Печать отчета
Tab-0000	Таб-0000
7) + MRM 3843/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V	7) + MRM 3843/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V
8) + MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V	8) + MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V
9) + MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V	9) + MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V
10) + MRM 426.2/317.2, IDUA CC: -20 V, EV: 12 V	10) + MRM 426.2/317.2, IDUA CC: -20 V, EV: 12 V
11) + MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V	11) + MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V
12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V	12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V
RRF 0007.1358O2.ird	RRF 0007.135802.ird
Method TIC RRF 0007	Метод TIC RRF 0007
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ESI 1	0,00 - 0,59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI 1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
1) +MRM 391.4/2713, ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V	1) +MRM 391.4/2713, ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V
2) +MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V. EV: 11 V	2) +MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V. EV: 11 V
3) +MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V	3) +MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V
4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V, EV: 12 V	4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V, EV: 12 V
5) +MRM 489.3/3893, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V	5) +MRM 489.3/3893, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V
6) +MRM 503.3/4033, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V	6) +MRM 503.3/4033, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V
7) +MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V	7) +MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V
8) +MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V	8) +MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V
9) +MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V	9) +MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V
10) +MRM 426.2/317.2, IDUA, CC: -20 V, EV: 12 V	10) +MRM 426.2/317.2, IDUA, CC: -20 V, EV: 12 V
11) +MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V	11) +MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V
12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V	12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V
RRF 0008_135858.ird	RRF 0008_135858.ird
Method TIC RRF 0008	Метод TIC RRF 0008
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ES11	0,00 - 0,59 мин Эксперимент ""Эксперимент 1"TIC - ES11
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
1) + MRM 391.4/271 Д ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V	1) + MRM 391.4/271 E ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V

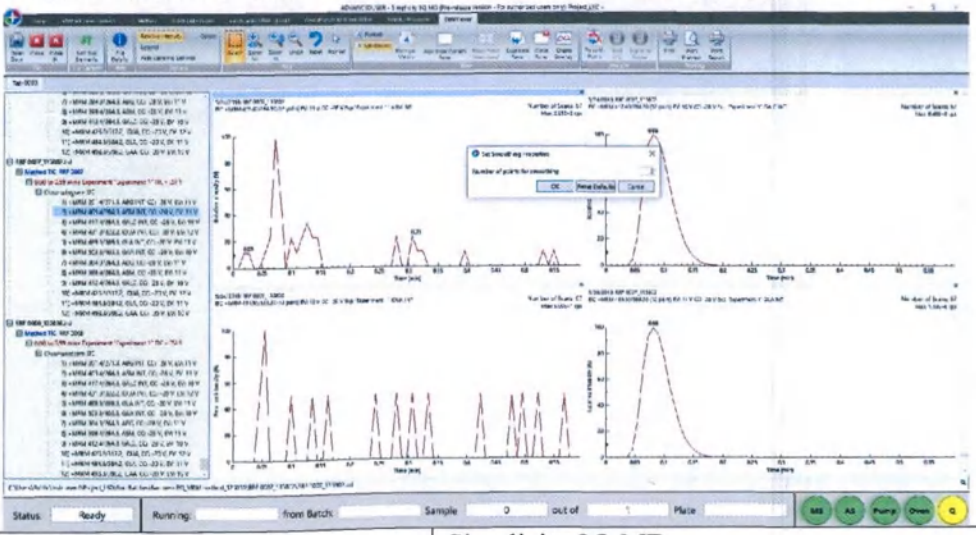
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

2) + MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V, EV: 11 V	2) + MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V, EV: 11 V
3) + MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V	3) + MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V
4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V.. EV: 12 V	4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V.. EV: 12 V
5) + MRM 489.3/389.3, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V	5) + MRM 489.3/389.3, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V
6) + MRM 503.3/403.3, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V	6) + MRM 503.3/403.3, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V
7) + MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V	7) + MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V
8) + MRM 398.4/264.3, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V	8) + MRM 398.4/264.3, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V
9) +MRM 412.4/264.3, GALC, CC: -28 V. EV: 10 V	9) +MRM 412.4/264.3, GALC, CC: -28 V. EV: 10 V
10) + MRM 426.2/317.2, IDUA. CC: -20 V. EV: 12 V	10) + MRM 426.2/317.2, IDUA. CC: -20 V. EV: 12 V
11) + MRM 4843/384.2, GLA CC: -20 V, EV: 11 V	11) + MRM 4843/384.2, GLA CC: -20 V, EV: 11 V
12) + MRM 4983/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V	12) + MRM 4983/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V
2018-05-24: RRF 0008.135858	2018-05-24: RRF 0008.135858
5/24/2013 RRF 0007.135802	5/24/2013 RRF 0007.135802
EIC *MRM 405.3/264.30 (12 pairs) EV: 11 V CC: -28 V Exp "Experiment 1" ASM INT	EIC *MRM 405.3/264.30 (12 пар) EV: 11 V CC: -28 V Exp "Эксперимент 1" ASM INT
Number of Scans: 67	Количество сканирований: 67
Max: 2.25E+2 cps	Максимум: 2.25E+2 имп/с
Relative Intensity (%)	Относительная интенсивность (%)
Time (min)	Время (мин)
C:\Users\Public\Instrument\Project_LSD \Run Batches\Baroness PQ_MRM methocM25051 \RRF 0008_135858\RRF 0008_135858.ird	C:\Пользователи\Публичный\Прибор\Проект_LSD\Текущие_серии\ Baroness PQ_MRM метод_M25051 \RRF 0008_135858\RRF 0008_135858.ird
Printing	Печать
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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



Simplicity 3Q MD	Simplicity 3Q MD
Home	Главная
Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
Open Data	Открыть данные
Close	Закрыть
Sort Sub Elements	Сортировка вложенных элементов
File Explorer	Проводник
File Details	Сведения о файле
Info	Информация
Relative intensity	Относительная интенсивность
Legend	Условные обозначения
Peak Labeling Settings	Настройки маркировки пиков
Colors	Цвета
Options	Опции
Select	Выбрать
Zoom in	Увеличить
Undo	Отменить
Reset	Сбросить
Pointer	Указатель
Plot	График
Portrait	Портретная ориентация
Landscape	Альбомная ориентация
Plots per View	Графиков на экране
Maximize current pane	Развернуть текущую панель
Reset from Maximized	Сбросить развернутую панель
Duplicate Pate	Дублировать панель
Close Pane	Закрыть панель
Create Overlay	Создать наложение
View	Просмотр
Smooth Plot	Сгладить график
EMS Info	Информация EMS
Signal to Noise	Сигнал/ шум
Analysis	Анализ
Print	Печать
Print Preview	Предварительный просмотр печати

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Print Report	Печать отчета
Tab-0000	Таб-0000
7) + MRM 3843/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V	7) + MRM 3843/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V
8) + MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V	8) + MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V
9) + MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V	9) + MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V
10) + MRM 426.2/317.2, IDUA CC: -20 V, EV: 12 V	10) + MRM 426.2/317.2, IDUA CC: -20 V, EV: 12 V
11) + MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V	11) + MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V
12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V	12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V
RRF 0007.1358O2.ird	RRF 0007.135802.ird
Method TIC RRF 0007	Метод TIC RRF 0007
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ESI 1	0,00 - 0,59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI 1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
1) +MRM 391.4/2713, ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V	1) +MRM 391.4/2713, ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V
2) +MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V. EV: 11 V	2) +MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V. EV: 11 V
3) +MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V	3) +MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V
4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V, EV: 12 V	4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V, EV: 12 V
5) +MRM 489.3/3893, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V	5) +MRM 489.3/3893, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V
6) +MRM 503.3/4033, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V	6) +MRM 503.3/4033, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V
7) +MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V	7) +MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V
8) +MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V	8) +MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V
9) +MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V	9) +MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V
10) +MRM 426.2/317.2, IDUA, CC: -20 V, EV: 12 V	10) +MRM 426.2/317.2, IDUA, CC: -20 V, EV: 12 V
11) +MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V	11) +MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V
12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V	12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V
RRF 0008_135858.ird	RRF 0008_135858.ird
Method TIC RRF 0008	Метод TIC RRF 0008
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ES11	0,00 - 0,59 мин Эксперимент ""Эксперимент 1"TIC - ES11
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
1) + MRM 391.4/271 Д ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V	1) + MRM 391.4/271 E ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V
2) + MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V, EV: 11 V	2) + MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V, EV: 11 V
3) + MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V	3) + MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V
4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V.. EV: 12 V	4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V.. EV: 12 V
5) + MRM 489.3/389.3, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V	5) + MRM 489.3/389.3, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

6) + MRM 503.3/403.3, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V	6) + MRM 503.3/403.3, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V
7) + MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V	7) + MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V
8) + MRM 398.4/264.3, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V	8) + MRM 398.4/264.3, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V
9) +MRM 412.4/264.3, GALC, CC: -28 V. EV: 10 V	9) +MRM 412.4/264.3, GALC, CC: -28 V. EV: 10 V
10) + MRM 426.2/317.2, IDUA. CC: -20 V. EV: 12 V	10) + MRM 426.2/317.2, IDUA. CC: -20 V. EV: 12 V
11) + MRM 4843/384.2, GLA CC: -20 V, EV: 11 V	11) + MRM 4843/384.2, GLA CC: -20 V, EV: 11 V
12) + MRM 4983/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V	12) + MRM 4983/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V
2018-05-24: RRF 0008.135858	2018-05-24: RRF 0008.135858
5/24/2013: RRF 0008.135858	5/24/2013: RRF 0008.135858
EIC +MRM 398.43/264.30 (12 pairs) EV: 11 V CC: -28 V Exp "Experiment 1" ASM	EIC +MRM 398.43/264.30 (12 пар) EV: 11 В CC: -28 В Эксперимент 1 ASM
Number of Scans: 67	Количество сканирований: 67
Max: 4.53E-3 cps	Макс: 4.53E-3 имп/с
2018-05-24: L9 0035.134740	2018-05-24: L9 0035.134740
Method TIC (12 pairs) Total Number of Experiments: 1	Метод TIC (12 пар) Общее количество экспериментов: 1
Overlay	Наложение
Max: 5.04E-6 cps	Максимум: 5.04E-6 имп/с
0 to 0.59413	от 0 до 0.59413
201S-05-24: L8 0032.134009	201S-05-24: L8 0032.134009
Method TIC (12 pairs) Total Number of Experiments: 1	Метод TIC (12 пар) Общее количество экспериментов: 1
Overlay	Наложение
Max: 3.28E-6 cps	Максимум: 3.28E-6 имп/с
5/24/2018: RRF 0008.135858	5/24/2018: RRF 0008.135858
EIC +MRM 498.30/398.20 (12 pairs) EV: 10 V CC: -20 V Exp "Experiment 1" GAA	EIC +MRM 498.30/398.20 (12 пар) EV: 10 В CC: -20 В Эксперимент 1 GAA
Number of Scans: 67	Количество сканирований: 67
Max: 2.23 E-3 cps	Максимум: 2.23 E-3 имп/с
Relative Intensity (%)	Относительная интенсивность (%)
Time (min)	Время (мин)
Set Smoothing Properties	Установка свойств сглаживания
Number of points for smoothing	Количество точек для сглаживания
OK	OK
Reset Defaults	Сброс настроек по умолчанию
Cancel	Отмена
C:\Users\Public\Instrument\Project_LSD \Run Batches\Baroness PQ_MRM methocM25051 \RRF 0008_135858\RRF 0008_135858.ird	C:\Пользователи\Публичный\Прибор\Проект_LSD\Текущие_серии\ Baroness PQ_MRM метод_M25051 \RRF 0008_135858\RRF 0008_135858.ird
Printing	Печать
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

AS	AC
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

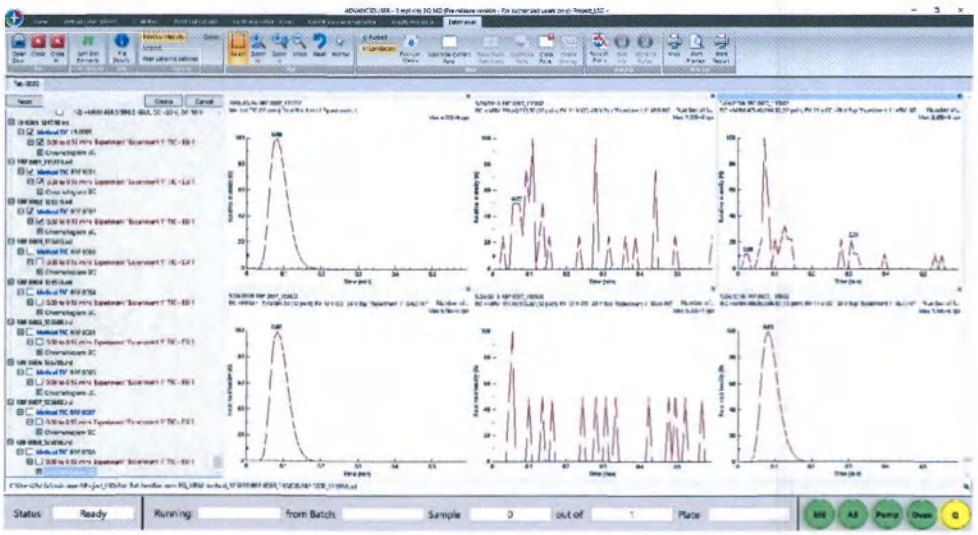
7. Распечатайте отображаемые графики, нажав кнопку **Print**(Печать) на ленте.
8. Чтобы сохранить отображаемые графики в виде изображения, щелкните правой кнопкой мыши на графике и выберите **Save Plot as Image** (Сохранить график как изображение). Поддерживаются различные форматы изображений, в том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

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):



Simplicity 3Q MD -	Simplicity 3Q MD
Home	Главная
Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
Open Data	Открыть данные
Close	Закрыть
Sort Sub Elements	Сортировка вложенных элементов
File Explorer	Проводник
File Details	Сведения о файле
Info	Информация
Relative intensity	Относительная интенсивность
Legend	Условные обозначения
Peak Labeling Settings	Настройки маркировки пиков
Colors	Цвета
Options	Опции
Select	Выбрать
Zoom in	Увеличить

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Просмотр, рецензирование и построение графиков данных

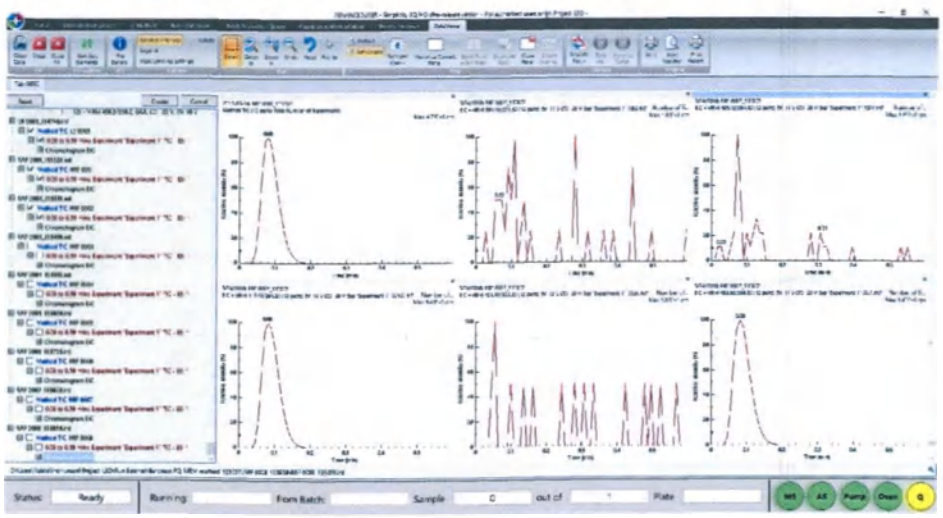
Undo	Отменить
Reset	Сбросить
Pointer	Указатель
Plot	График
Portrait	Портретная ориентация
Landscape	Альбомная ориентация
Plots per View	Графиков на экране
Maximize current pane	Развернуть текущую панель
Reset from Maximized	Сбросить развернутую панель
Duplicate Pate	Дублировать панель
Close Pane	Закрыть панель
Create Overlay	Создать наложение
View	Просмотр
Smooth Plot	Сгладить график
EMS Info	Информация EMS
Signal to Noise	Сигнал/ шум
Analysis	Анализ
Print	Печать
Print Preview	Предварительный просмотр печати
Print Report	Печать отчета
Tab-0000	Таб-0000
L9 0005.134740.ird	L9 0005.134740.ird
Method TIC 19 0005	Метод TIC 19 0005
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ESI1	0,00 - 0,59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 000l.135223.ird	RRF 000l.135223.ird
0 Method TIC RRF 0001	0 Метод TIC RRF 0001
0 0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ESI1	0 0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0002_135319.ird	RRF 0002_135319.ird
Method TIC RRF 0002	Метод TIC RRF 0002
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1' TIC - ESI1	0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0003.135416.ird	RRF 0003.135416.ird
Method TIC RRF 0003	Метод TIC RRF 0003
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ESI1	0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0004_1355l3.ird	RRF 0004_1355l3.ird
Method TIC RRF 0004	Метод TIC RRF 0004
0.00 to 0.59 mins Expenment "Experiment 1" TIC - ESI1	0,00 - 0,59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0005.135609.ird	RRF 0005.135609.ird
Method TIC RRF 0005	Метод TIC RRF 0005
0.00 to 0.59 mins Expenment "Experiment 1" TIC - ESI1	0.00 до 0.59 мин Экспенмент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
0Chromatogram EIC	0Хроматограмма EIC
RRF 0006.135705.ird	RRF 0006.135705.ird
Method TIC RRF 0006	Метод TIC RRF 0006
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ESI1	0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0007.135802.ird	RRF 0007.135802.ird
Method TIC RRF 0007	Метод TIC RRF 0007

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

0.00 to 0.59 mins Expenment "Expenment 1' TIC - ESI1	0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0008.135858.ird	RRF 0008.135858.ird
Method TIC RRF 0008	Метод TIC RRF 0008
CI 0.00 to 0.59 mins Expenment "Experiment 1" TIC - ESI1	0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
5/24/2013 RRF 0007.135802	5/24/2013 RRF 0007.135802
EIC *MRM 405.3/264.30 (12 pairs) EV: 11 V CC: -28 V Exp "Experiment 1" ASM INT	EIC *MRM 405.3/264.30 (12 пар) EV: 11 V CC: -28 V Exp "Эксперимент 1" ASM INT
Number of Scans: 67	Количество сканирований: 67
Max: 2.25E+2 cps	Максимум: 2.25E+2 имп/с
Relative Intensity (%)	Относительная интенсивность (%)
Time (min)	Время (мин)
C:\Users\Public\Instrument\Project_LSD \Run Batches\Baroness PQ_MRM methocM25051 \RRF 0008_135858\RRF 0008_135858.ird	C:\Пользователи\Публичный\Прибор\Проект_LSD\Текущие_серии\ Baroness PQ_MRM метод_M25051 \RRF 0008_135858\RRF 0008_135858.ird
Printing	Печать
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

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:



Simplicity 3Q MD	Simplicity 3Q MD
Home	Главная

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Просмотр, рецензирование и построение графиков данных

Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
Open Data	Открыть данные
Close	Закрыть
Sort Sub Elements	Сортировка вложенных элементов
File Explorer	Проводник
File Details	Сведения о файле
Info	Информация
Relative intensity	Относительная интенсивность
Legend	Условные обозначения
Peak Labeling Settings	Настройки маркировки пиков
Colors	Цвета
Options	Опции
Select	Выбрать
Zoom in	Увеличить
Undo	Отменить
Reset	Сбросить
Pointer	Указатель
Plot	График
Portrait	Портретная ориентация
Landscape	Альбомная ориентация
Plots per View	Графиков на экране
Maximize current pane	Развернуть текущую панель
Reset from Maximized	Сбросить развернутую панель
Duplicate Pate	Дублировать панель
Close Pane	Закрыть панель
Create Overlay	Создать наложение
View	Просмотр
Smooth Plot	Сгладить график
EMS Info	Информация EMS
Signal to Noise	Сигнал/ шум
Analysis	Анализ
Print	Печать
Print Preview	Предварительный просмотр печати
Print Report	Печать отчета
Tab-0000	Таб-0000
L9 0005.134740.ird	L9 0005.134740.ird
Method TIC 19 0005	Метод TIC 19 0005
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ESI1	0,00 - 0,59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 000l.135223.ird	RRF 000l.135223.ird
0 Method TIC RRF 0001	0 Метод TIC RRF 0001
0 0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ESI1	0 0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0002_135319.ird	RRF 0002_135319.ird
Method TIC RRF 0002	Метод TIC RRF 0002
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1' TIC - ESI1	0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0003.135416.ird	RRF 0003.135416.ird

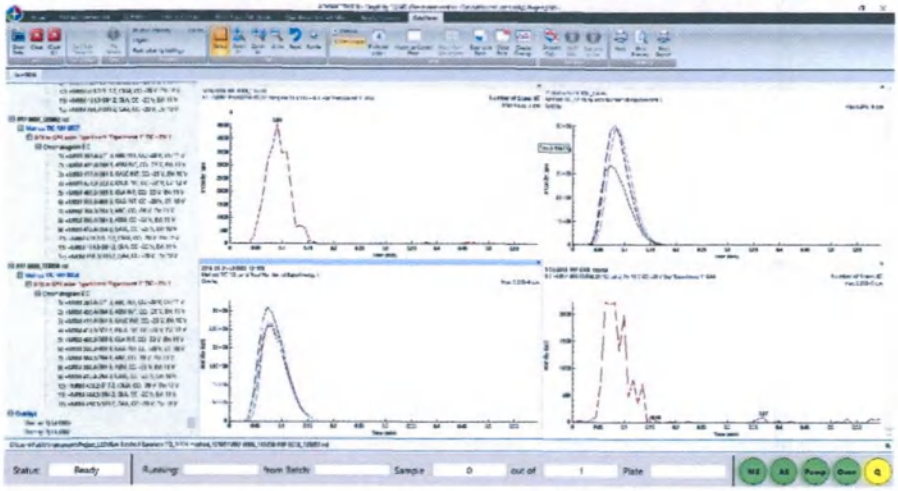
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Method TIC RRF 0003	Метод TIC RRF 0003
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ESI1	0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0004_135513.ird	RRF 0004_135513.ird
Method TIC RRF 0004	Метод TIC RRF 0004
0.00 to 0.59 mins Expenment "Experiment 1" TIC - ESI1	0,00 - 0,59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0005.135609.ird	RRF 0005.135609.ird
Method TIC RRF 0005	Метод TIC RRF 0005
0.00 to 0.59 mins Expenment "Experiment 1" TIC - ESI1	0.00 до 0.59 мин Экспенмент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
0Chromatogram EIC	0Хроматограмма EIC
RRF 0006.135705.ird	RRF 0006.135705.ird
Method TIC RRF 0006	Метод TIC RRF 0006
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ESI1	0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0007.135802.ird	RRF 0007.135802.ird
Method TIC RRF 0007	Метод TIC RRF 0007
0.00 to 0.59 mins Expenment "Expenment 1' TIC - ESI1	0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0008.135858.ird	RRF 0008.135858.ird
Method TIC RRF 0008	Метод TIC RRF 0008
CI 0.00 to 0.59 mins Expenment "Experiment 1" TIC - ESI1	0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
5/24/2013 RRF 0007.135802	5/24/2013 RRF 0007.135802
EIC *MRM 405.3/264.30 (12 pairs) EV: 11 V CC: -28 V Exp "Experiment 1" ASM INT	EIC *MRM 405.3/264.30 (12 пар) EV: 11 V CC: -28 V Exp "Эксперимент 1" ASM INT
Number of Scans: 67	Количество сканирований: 67
Max: 2.25E+2 cps	Максимум: 2.25E+2 имп/с
Relative Intensity (%)	Относительная интенсивность (%)
Time (min)	Время (мин)
C:\Users\Public\Instrument\Project_LSD \Run Batches\Baroness PQ_MRM methocM25051 \RRF 0008_135858\RRF 0008_135858.ird	C:\Пользователи\Публичный\Прибор\Проект_LSD\Текущие_серии\ Baroness PQ_MRM метод_M25051 \RRF 0008_135858\RRF 0008_135858.ird
Printing	Печать
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Просмотр, рецензирование и построение графиков данных



Simplicity 3Q MD	Simplicity 3Q MD
Home	Главная
Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
Open Data	Открыть данные
Close	Закрыть
Sort Sub Elements	Сортировка вложенных элементов
File Explorer	Проводник
File Details	Сведения о файле
Info	Информация
Relative intensity	Относительная интенсивность
Legend	Условные обозначения
Peak Labeling Settings	Настройки маркировки пиков
Colors	Цвета
Options	Опции
Select	Выбрать
Zoom in	Увеличить
Undo	Отменить
Reset	Сбросить
Pointer	Указатель
Plot	График
Portrait	Портретная ориентация
Landscape	Альбомная ориентация
Plots per View	Графиков на экране
Maximize current pane	Развернуть текущую панель
Reset from Maximized	Сбросить развернутую панель
Duplicate Pate	Дублировать панель
Close Pane	Закрыть панель
Create Overlay	Создать наложение
View	Просмотр
Smooth Plot	Сгладить график
EMS Info	Информация EMS
Signal to Noise	Сигнал/ шум
Analysis	Анализ
Print	Печать
Print Preview	Предварительный просмотр печати

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Print Report	Печать отчета
Tab-0000	Таб-0000
L9 0005.134740.ird	L9 0005.134740.ird
Method TIC 19 0005	Метод TIC 19 0005
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ESI1	0,00 - 0,59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 000l.135223.ird	RRF 000l.135223.ird
0 Method TIC RRF 0001	0 Метод TIC RRF 0001
0 0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ESI1	0 0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0002_135319.ird	RRF 0002_135319.ird
Method TIC RRF 0002	Метод TIC RRF 0002
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1' TIC - ESI1	0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0003.135416.ird	RRF 0003.135416.ird
Method TIC RRF 0003	Метод TIC RRF 0003
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ESI1	0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0004_1355l3.ird	RRF 0004_1355l3.ird
Method TIC RRF 0004	Метод TIC RRF 0004
0.00 to 0.59 mins Expenment "Experiment 1" TIC - ESI1	0,00 - 0,59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0005.135609.ird	RRF 0005.135609.ird
Method TIC RRF 0005	Метод TIC RRF 0005
0.00 to 0.59 mins Expenment "Experiment 1" TIC - ESI1	0.00 до 0.59 мин Экспенмент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
0Chromatogram EIC	0Хроматограмма EIC
RRF 0006.135705.ird	RRF 0006.135705.ird
Method TIC RRF 0006	Метод TIC RRF 0006
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ESI1	0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0007.135802.ird	RRF 0007.135802.ird
Method TIC RRF 0007	Метод TIC RRF 0007
0.00 to 0.59 mins Expenment "Expenment 1' TIC - ESI1	0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
RRF 0008.135858.ird	RRF 0008.135858.ird
Method TIC RRF 0008	Метод TIC RRF 0008
CI 0.00 to 0.59 mins Expenment "Experiment 1" TIC - ESI1	0.00 - 0.59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI1
5/24/2013 RRF 0007.135802	5/24/2013 RRF 0007.135802
EIC *MRM 405.3/264.30 (12 pairs) EV: 11 V CC: -28 V Exp "Experiment 1" ASM INT	EIC *MRM 405.3/264.30 (12 пар) EV: 11 V CC: -28 V Exp "Эксперимент 1" ASM INT
Number of Scans: 67	Количество сканирований: 67
Max: 2.25E+2 cps	Максимум: 2.25E+2 имп/с
Relative Intensity (%)	Относительная интенсивность (%)
Time (min)	Время (мин)
C:\Users\Public\Instrument\Project_LSD\Run Batches\Baroness PQ_MRM methocM25051 \RRF 0008_135858\RRF 0008_135858.ird	C:\Пользователи\Публичный\Прибор\Проект_LSD\Текущие_серии \Baroness PQ_MRM метод_M25051 \RRF 0008_135858\RRF 0008_135858.ird

Printing	Печать
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

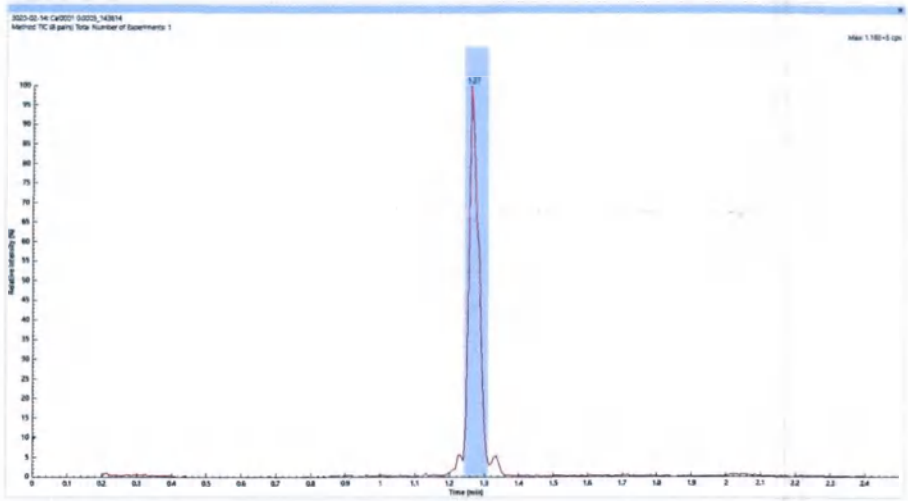
Примечание: Также можно сравнить XIC различных проб.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.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 щелкните и проведите мышкой, чтобы выбрать пик, для которого следует применить расчет сигнала к шуму, в том числе начало и конец каждого пика:



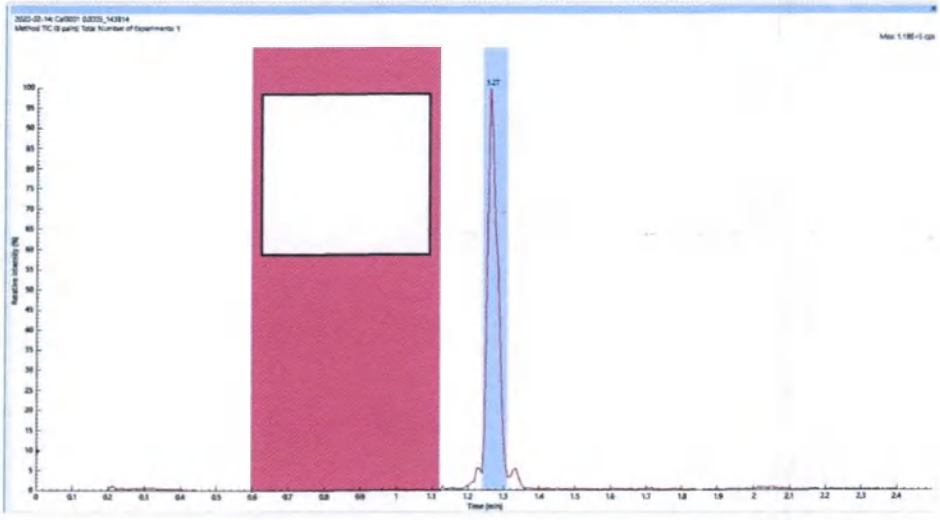
2020-02-14: Cal0001 0.0005_143814	2020-02-14: Cal0001 0.0005_143814
Method TIC (8 pars) Total Number of Experiments: 1	Метод TIC (8 пар) Всего экспериментов: 1
Max: 1.18E+5 cps	Макс.: 1.18E+5 имп/с
Relative intensity (%)	Относительная интенсивность (%)
Time (min)	Время (мин)

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, щелкните 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.

   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:

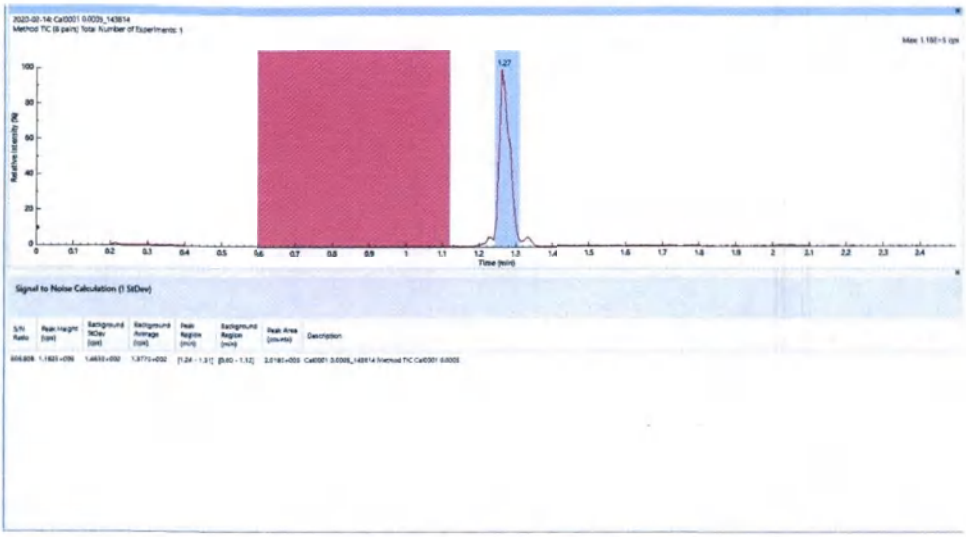


2020-02-14: Cal0001 0.0005_143814	2020-02-14: Cal0001 0.0005_143814

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Method TIC (8 pars) Total Number of Experiments: 1	Метод TIC (8 пар) Всего экспериментов: 1
Max: 1.18E+5 cps	Макс.: 1.18E+5 имп/с
Relative intensity (%)	Относительная интенсивность (%)
Time (min)	Время (мин)

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



2020-02-14: Cal0001 0.0005_143814	2020-02-14: Cal0001 0.0005_143814
Method TIC (8 pars) Total Number of Experiments: 1	Метод TIC (8 пар) Всего экспериментов: 1
Max: 1.18E+5 cps	Макс.: 1.18E+5 имп/с
Relative intensity (%)	Относительная интенсивность (%)
Time (min)	Время (мин)
Signal to Noise Calculation (1 StDev)	Расчет соотношения сигнал/шум (1σ)
S/N Ratio	Соотношение С/Ш
Peak Height (cps)	Высота пика (имп/с)
Background StDev (Cps)	Фоновое σ (имп/с)
Background Average (cps)	Фоновое среднее (имп/с)
Peak Region (min)	Область пика (мин)
Background Region (min)	Область фона (мин)
Peak Area (counts)	Область пика (имп)
Description	Описание
Cal0001 0.0005_143814 Method TIC Cal0001 0.0005	Cal0001 0.0005_143814 Метод TIC Cal0001 0.0005

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 щелкните 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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.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 QSight. 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.

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
- 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"
Базовая плита источника PKI Torrent (опция)
Зонд PKI и держатель шприца (опция)
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 УВЭЖХ-скрининга QSight 225MD.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Запуск системы

1. Найдите кнопку питания на передней панели управления, рядом с ЖК-дисплеем (см. раздел «Передняя панель прибора»). Нажмите кнопку и дождитесь завершения процесса запуска прибора.

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).

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.

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:

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



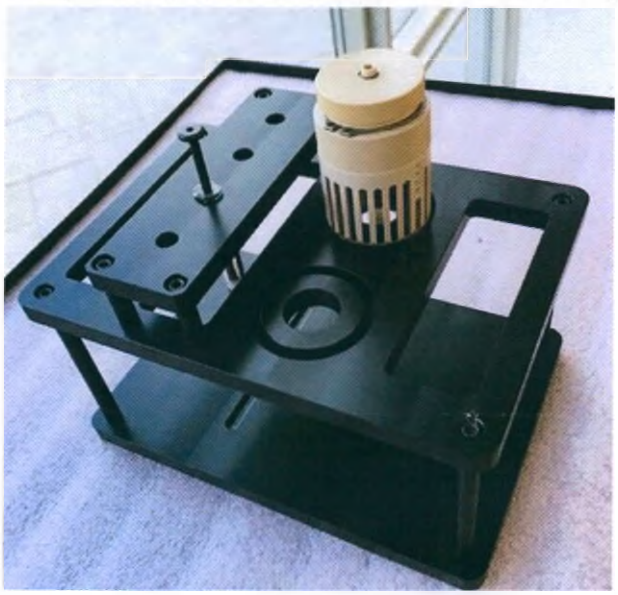
2. Возьмитесь за зонд и поверните его влево против часовой стрелки 10-15 раз, пока внешний корпус не будет свободно вращаться. Затем осторожно оттяните зонд от источника, отодвигая его от зонда по прямой линии.

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.



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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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.

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.

Основные действия по замене иглы

Вам предстоит выполнить следующие основные действия:

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

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

поверхностями.

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

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

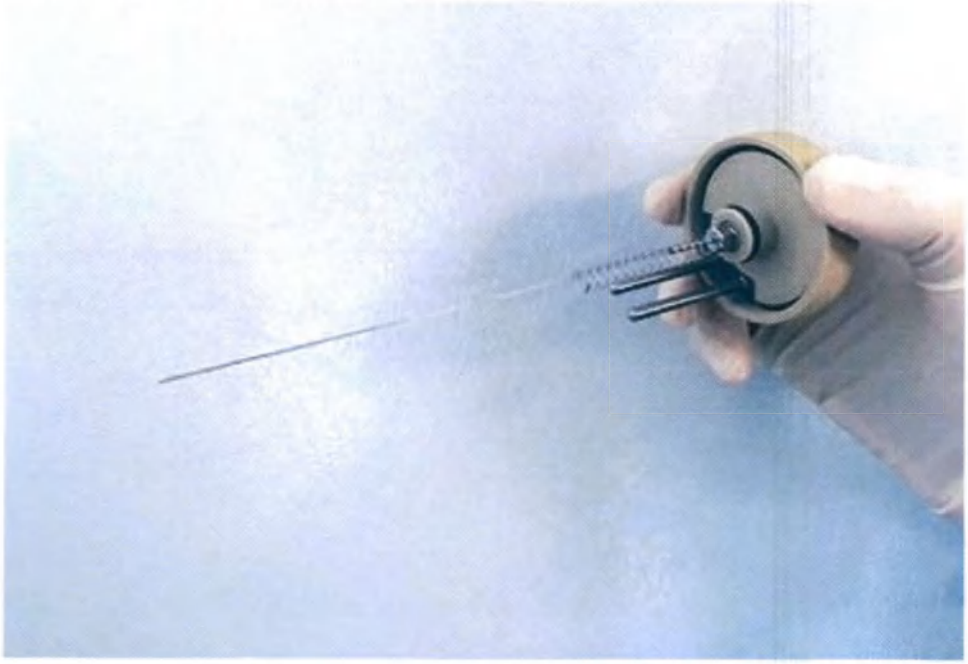
1. Извлеките зонд из источника (см. раздел Извлечение зонда из источника). Держите зонд в левой руке, при этом указательный палец левой руки должен быть вставлен в воротник, чтобы удерживать стержень и предотвращать его свободное вращение. Правой рукой поверните узел иглы зонда к себе, пока она не освободится:



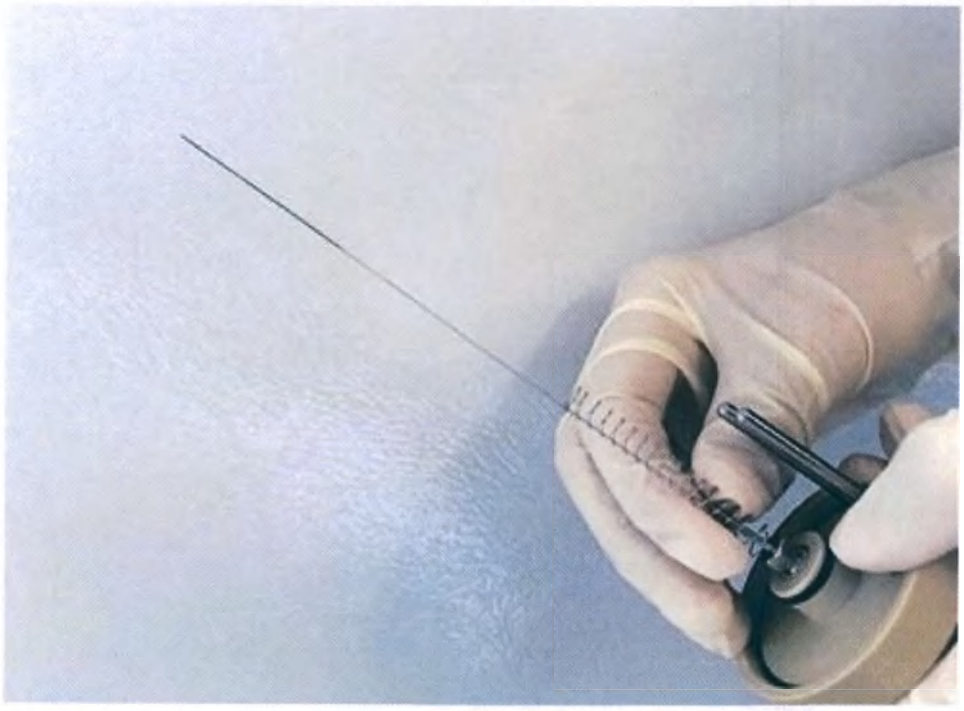


ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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).
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.



ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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:



ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Удаление имеющейся иглы (новая конструкция – фитинг из полиэфирэфиркетона)

1. Извлеките зонд из источника (см. раздел Извлечение зонда из источника).

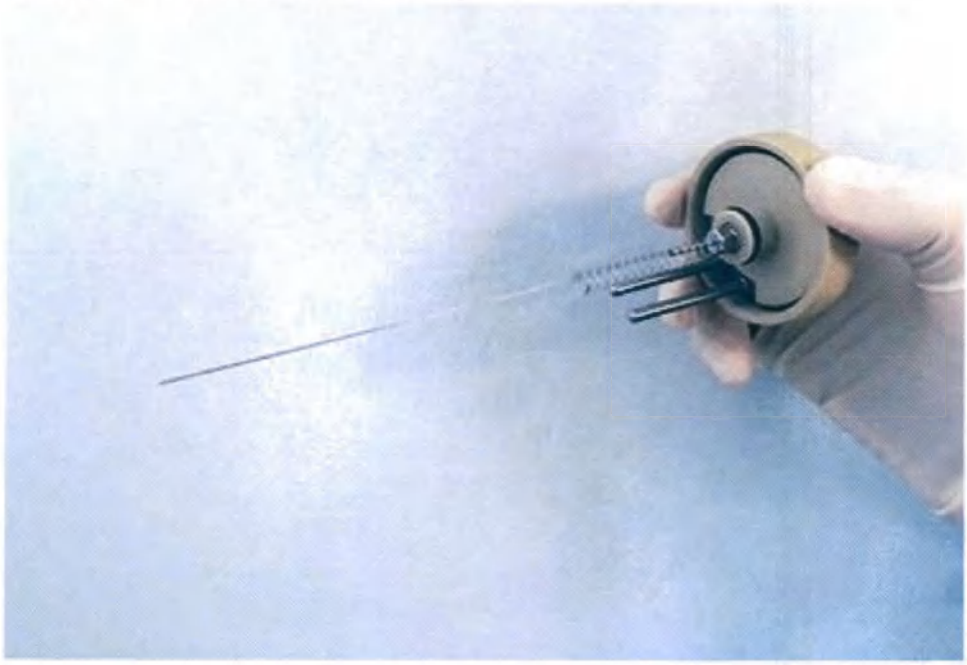
   Держите зонд в левой руке, при этом указательный палец левой руки должен быть вставлен в воротник, чтобы удерживать стержень и предотвращать его свободное вращение. Правой рукой поверните узел иглы зонда к себе, пока она не освободится:





ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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).
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.

Установка новой иглы

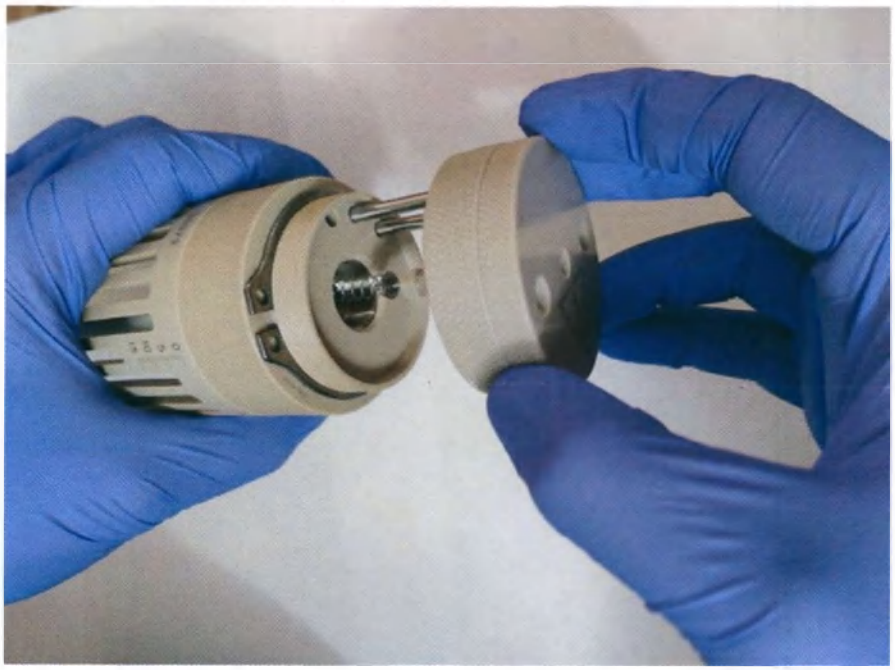
Ниже описана процедура замены иглы зонда с фитингом из полиэфирэфиркетона.



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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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:





7. Снова установите зонд в источник (см. раздел Установка зонда в источник).

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. Следуя инструкциям, прилагаемым к комплекту для приготовления настроечных растворов MC/MC, приготовьте положительный (POS) PPG (2E-7 M) и загрузите в чистый стеклянный шприц.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

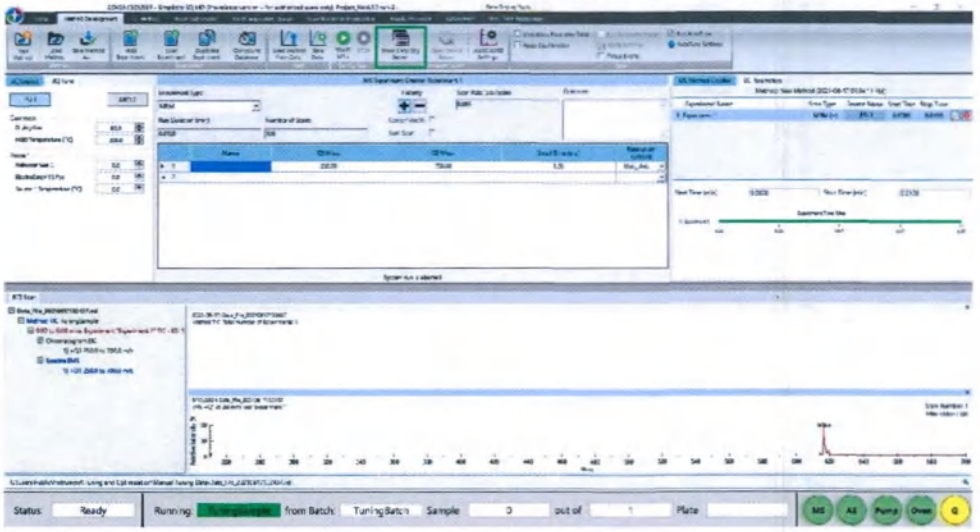
2. Установите поток шприцевого насоса на **30 мкл/мин**.

   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 **Тип эксперимента** на **MRM** , затем нажмите **Start MS** (Запустить МС).

5. Оставьте программу работать в течение 1-2 минут, затем нажмите **Show Simplicity Server** (Показать сервер Simplicity) в меню ленты (внизу, зеленый квадрат):

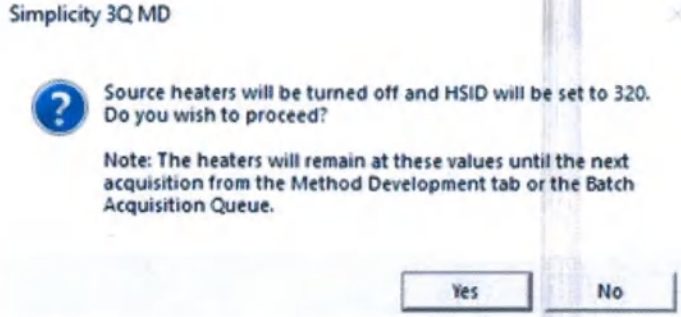


Simplicity 3Q MD (Pre-release version - For authorized users only): Project.LSD -	Simplicity 3Q MD (Предварительная версия - Только для авторизованных пользователей): Project.LSD -
Home	Главная
Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
New Method	Новый метод
Load Method	Загрузить метод
Save Method As…	Сохранить метод как...
Method	Метод
Add Experiment	Добавить эксперимент
Load Experiment	Загрузить эксперимент
Duplicate Experiment	Дублировать эксперимент
Compound Database	База данных соединений
Load Method from Data	Загрузить метод из данных
Save Data	Сохранить данные
AutoCALRES Settings	Настройки автоматической калибровки и разрешения
View Resolution Table	Просмотр таблицы разрешений
View Mass Parameter Table	Просмотр таблицы параметров масс
Apply Equilibration	Применить уравновешивание
Run Parameter Ramp	с настройками линейного измерения
Ramp Settings	Настройки линейного изменения
Timed Events	События по времени
Run AutoTune	Выполнить автонастройку

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

AutoTune Settings	Параметры автонастройки
3Q Source	3Q Источник
3Q Tune	3Q Настройка
Common	Общие
Drying Gas	Газ-осушитель
HSID Temperature (°C)	Температура HSID (°C)
Probe 1	Зонд 1
Nebulizer Gas 1	Газ распылителя 1
ElectroSpray V1 Pos	Электроспрей V1 положительный
Source 1 Temperature (°C)	Температура источника 1 (°C)
Experiment Type	Тип эксперимента
RTS Scan	Сканирование RTS
Polarity	Полярность
Start	Запуск
Stop mass	Стоп-масса
Step size	Размер шага
Dwell Time	Время задержки
Data.File.20210617132437.ird	Файл_данных_20210617132437.ird
Method TIC TuningSample	Метод TIC Образец настройки
000 to 0.00 mins Experiment 'Experiment 1" TIC • ESI1	000 - 0.00 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC • ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
*Q1 250.0 to 700.0 m/z	*Q1 250.0 - 700.0 масса-заряд
Spectra EMS	Spectra EMS
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

Откроется окно с сообщением о том, что нагреватели источника будут отключены, и вопросом, хотите ли вы продолжить. Нажмите **Да**.

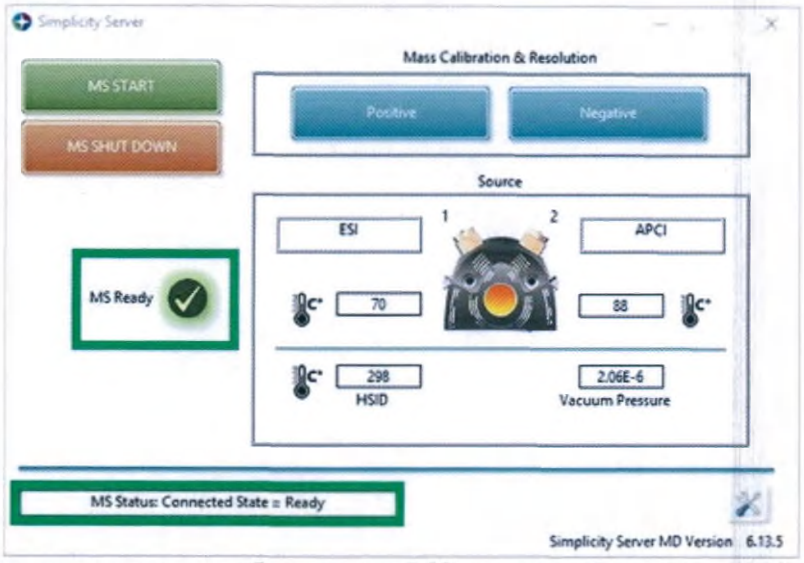


Simplicity 3Q MD	Simplicity 3Q MD
Source heaters will be turned off and HSID will be set to 320. Do you wish to proceed?	Нагреватели источника будут отключены, а функция HSID будет установлена на 320. Вы хотите продолжить?
Note: The heaters will remain at these values until the next acquisition from the Method Development tab or the Batch Acquisition Queue.	Примечание: нагреватели останутся в этом режиме до следующего получения данных из вкладки «Разработка метода» или очереди сбора данных

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

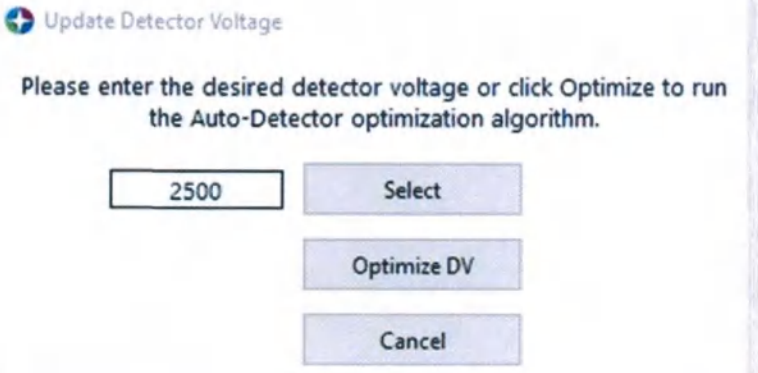
	серии.
Yes	Да
No	Нет

6. Откроется диалоговое окно Simplicity Server, в котором отображается состояние прибора МС.



Должно появиться сообщение, что МС готов к работе, статус МС подключен, и Готово к подключению (внизу, зеленые квадраты):

Simplicity Server	Сервер Simplicity Server
MS START	ЗАПУСК МС
MS SHUT DOWN	ВЫКЛЮЧЕНИЕ МС
Mass Calibration & Resolution	Массовая калибровка и разрешение
Positive	Положительная
Negative	Отрицательная
Source	Источник
ESI	ESI
APCI	APCI
MS Ready	Масс-спектрометр
HSID	HSID
Vacuum pressure	Давление разрежения
MS Status: Connected State = Ready	Статус масс-спектрометра: подключен = готов
Simplicity Server MD Version 6.3.15	Simplicity Server MD, версия 6.3.15



7. В поле Калибровка массы и Разрешение нажмите **Positive** (Положительно). Появится диалоговое окно «Обновить напряжение детектора»:

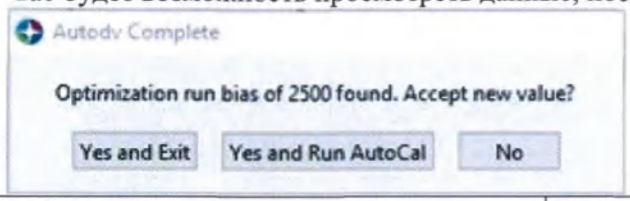
Update Detector Voltage	Обновление напряжения детектора
Please enter the desired detector voltage or click	Введите желаемое напряжение детектора или

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Optimize to run the Auto-Detector optimization algorithm.	нажмите «Оптимизировать напряжение детектора», чтобы запустить алгоритм автоматической оптимизации детектора.
Select	Выбрать
Optimize DV	Оптимизировать напряжение детектора
Cancel	Отменить

8. Нажмите **Optimize DV** (Оптимизировать DV), чтобы запустить оптимизацию AutoDV. Откроется окно «Выполняется автокалибровка».
9. Программа оптимизации AutoDV автоматически остановится по завершении.

   У вас будет возможность просмотреть данные, после чего откроется следующее окно:



Autodv Complete	Автоматическая оптимизация напряжения завершена
Optimization run bias of 2500 found. Accept new value?	Найдено значение смещения при оптимизации 2500. Принять новое значение?
Yes and Exit	Да и выйти
Yes and Run AutoCal	Да и запустить автокалибровку
No	Нет

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 автокалибровку), чтобы продолжить процесс автокалибровки (описанный ниже). Нажмите **No** (Нет), чтобы выйти, не принимая новое значение.

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.

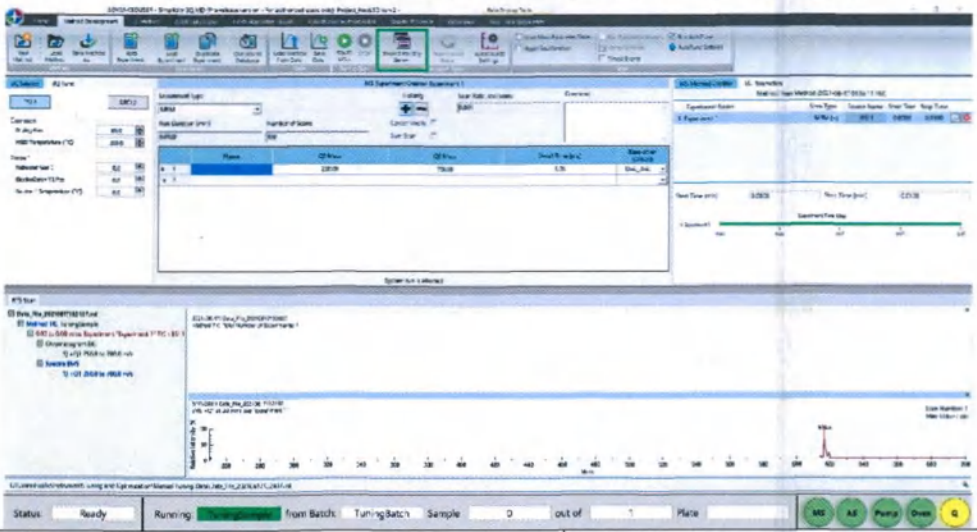
Массы, используемые в этой процедуре, должны соответствовать массам, указанным во время установки. Если вы редактируете метод автокалибровки, массы в новом методе должны совпадать с массами, указанными в настройках AutoCAL/RES. При неточном совпадении массы процедура автокалибровки может привести к неправильной установке Напряжения детектора, что может повлечь за собой плохую работу прибора.

Запуск процедуры автокалибровки

1. Следуя инструкциям, прилагаемым к комплекту для приготовления настроечных растворов MC/MC, подготовьте положительный PPG (2E-7 M) или NEG PPG (1E-5 M) и загрузите в чистый стеклянный шприц (более подробно см. раздел Maintenance Solutions (Растворы для технического обслуживания) на стр. 149).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

2. Откройте программное обеспечение Simplicity 3Q MD и перейдите на вкладку **MS Method** (Метод МС).
3. На панели MS Experiment Creator (Создание эксперимента МС) измените **Тип эксперимента** на **MRM** , затем нажмите **Start MS** (Запустить МС).
4. Оставьте программу работать в течение 1-2 минут, затем нажмите **Show Simplicity Server** (Показать сервер Simplicity) в меню ленты (внизу, зеленый квадрат):

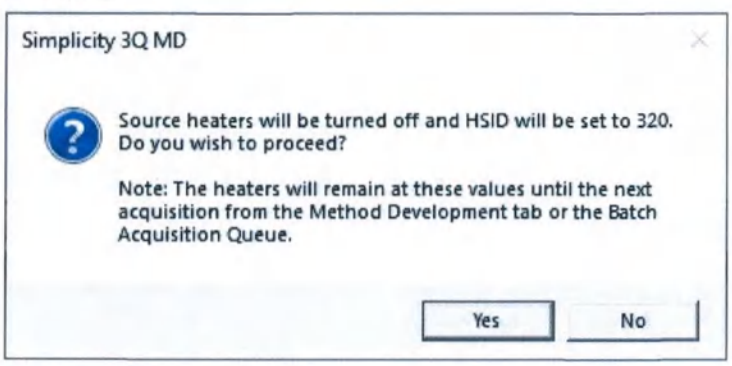


Simplicity 3Q MD	Simplicity 3Q MD
Home	Главная
Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
New Method	Новый метод
Load Method	Загрузить метод
Save Method As…	Сохранить метод как...
Method	Метод
Add Experiment	Добавить эксперимент
Load Experiment	Загрузить эксперимент
Duplicate Experiment	Дублировать эксперимент
Compound Database	База данных соединений
Load Method from Data	Загрузить метод из данных
Save Data	Сохранить данные
AutoCALRES Settings	Настройки автоматической калибровки и разрешения
View Resolution Table	Просмотр таблицы разрешений
View Mass Parameter Table	Просмотр таблицы параметров масс
Apply Equilibration	Применить уравновешивание
Run Parameter Ramp	с настройками линейного измерения
Ramp Settings	Настройки линейного изменения
Timed Events	События по времени
Run AutoTune	Выполнить автонастройку
AutoTune Settings	Параметры автонастройки
3Q Source	3Q Источник
3Q Tune	3Q Настройка
Common	Общие
Drying Gas	Газ-осушитель
HSID Temperature (°C)	Температура HSID (°C)
Probe 1	Зонд 1

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Nebulizer Gas 1	Газ распылителя 1
ElectroSpray V1 Pos	Электроспрей V1 положительный
Source 1 Temperature (°C)	Температура источника 1 (°C)
Experiment Type	Тип эксперимента
RTS Scan	Сканирование RTS
Polarity	Полярность
Start	Запуск
Stop mass	Стоп-масса
Step size	Размер шага
Dwell Time	Время задержки
Data.File.20210617132437.ird	Файл_данных_20210617132437.ird
Method TIC TuningSample	Метод TIC Образец настройки
000 to 0.00 mins Experiment 'Experiment 1" TIC • ESI1	000 - 0.00 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC • ESI1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
*Q1 250.0 to 700.0 m/z	*Q1 250.0 - 700.0 масса-заряд
Spectra EMS	Spectra EMS
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

Откроется окно с сообщением о том, что нагреватели источника будут отключены, и вопросом, хотите ли вы продолжить. Нажмите
Yes (Да).

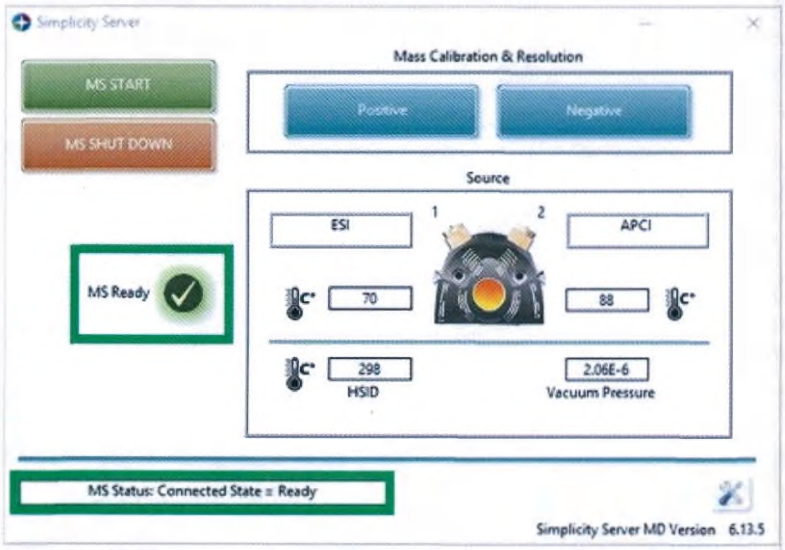


Simplicity 3Q MD	Simplicity 3Q MD
Source heaters will be turned off and HSID will be set to 320. Do you wish to proceed?	Нагреватели источника будут отключены, а функция HSID будет установлена на 320. Вы хотите продолжить?
Note: The heaters will remain at these values until the next acquisition from the Method Development tab or the Batch Acquisition Queue.	Примечание: нагреватели останутся в этом режиме до следующего получения данных из вкладки «Разработка метода» или очереди сбора данных серии.
Yes	Да
No	Нет

5. Откроется диалоговое окно Simplicity Server, в котором отображается состояние прибора

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

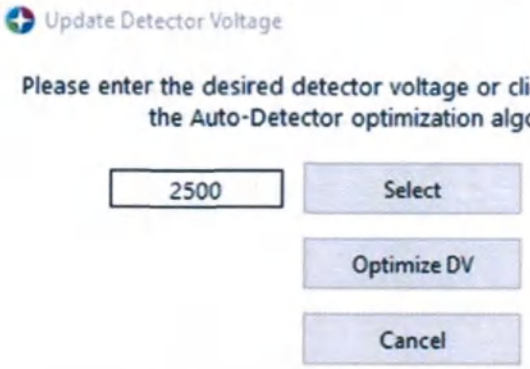
МС. Должно появиться сообщение, что МС готов к работе, статус МС подключен, и Готово к подключению (внизу, зеленые квадраты):



Simplicity Server	Сервер Simplicity Server
MS START	ЗАПУСК МС
MS SHUT DOWN	ВЫКЛЮЧЕНИЕ МС
Mass Calibration & Resolution	Массовая калибровка и разрешение
Positive	Положительная
Negative	Отрицательная
Source	Источник
ESI	ESI
APCI	APCI
MS Ready	Масс-спектрометр
HSID	HSID
Vacuum pressure	Давление разрежения
MS Status: Connected State = Ready	Статус масс-спектрометра: подключен = готов
Simplicity Server MD Version 6.3.15	Simplicity Server MD, версия 6.3.15

6. В поле Калибровка массы и Разрешение нажмите Положительно или Отрицательно, в зависимости от настроечного раствора, который вы приготовили в соответствии с разделом 1 на стр. 125.

Появится диалоговое окно Обновить напряжение детектора:

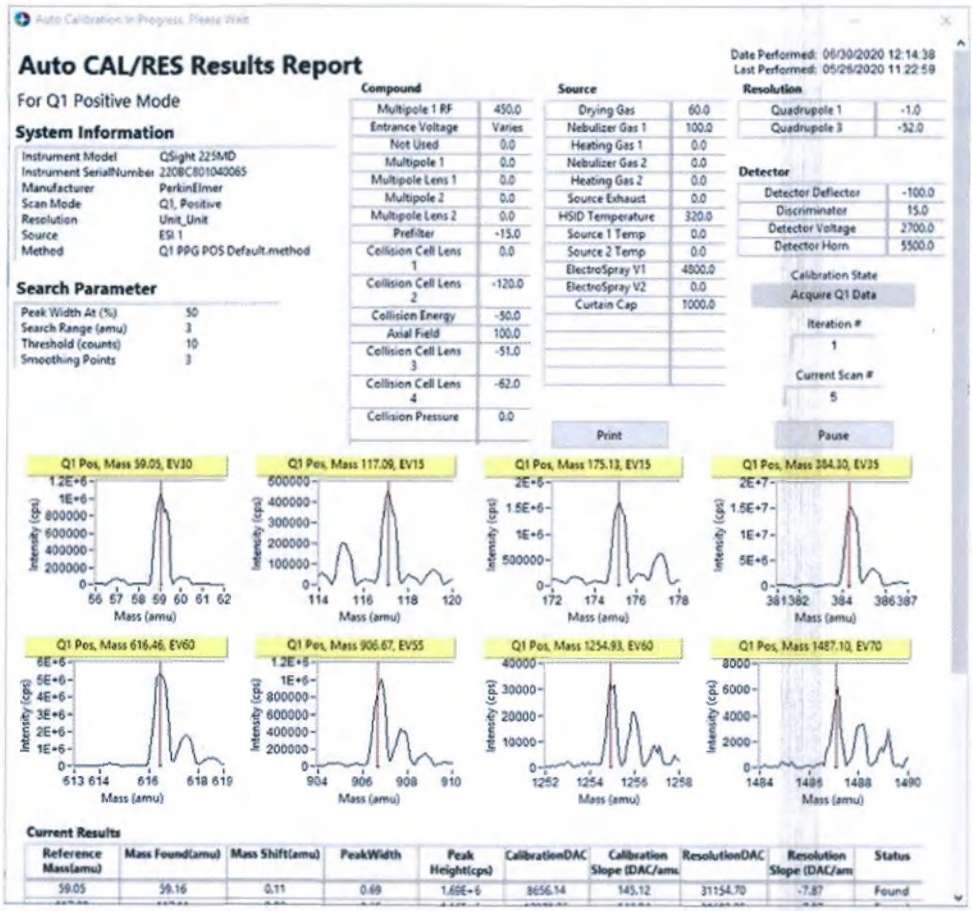


Update Detector Voltage	Обновление напряжения детектора
Please enter the desired detector voltage or click Optimize to run the Auto-Detector optimization algorithm.	Введите желаемое напряжение детектора или нажмите «Оптимизировать напряжение детектора», чтобы запустить алгоритм автоматической оптимизации детектора.
Select	Выбрать
Optimize DV	Оптимизировать напряжение детектора

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Cancel	Отменить

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:



Auto Calibration in Progress, Please Wait	Идет автоматическая калибровка, пожалуйста, подождите
Auto CAL/RES Results Report	Отчет о результатах автокалибровки
Date Performed: 06/30/2020 12:14:38	Дата выполнения: 30.06.2020 12:14.38
Last Performed: 05/26/2020 11:22:59	Последнее выполнение: 26.05.2020 11:22:59
For Q1 Positive Mode	Режим Q1 Положительный
System Information	Информация о системе
Instrument Model QSight 22SMD	Модель прибора QSight 22SMD
Instrument Serial Number 220BC801040065	Серийный номер прибора 220BC801040065
Manufacturer PerkinElmer	Производитель PerkinElmer
Scan Mode Q1, Positive	Режим сканирования Q1, положительный
Resolution Unit_Unit	Разрешение ед_ед
Source ESI 1	Источник ESI 1
Method Q1 PPG POS Default_method	Метод Q1 PPG POS метод_по_умолчанию
Search Parameter	Параметр поиска
Peak Width At (%)	Ширина пика (%)
Search Range (amu)	Диапазон поиска (а.е.м.)
Threshold (counts)	Порог (отсчеты)
Smoothing Points	Точки сглаживания
Compound	Состав
Multipole 1 RF	Мультиполь 1 РЧ
Entrance Voltage	Входное напряжение
Not Used	Не используется

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Multipole 1	Мультиполь 1
Multipole Lens 1	Мультипольная линза 1
Multipole 2	Мультиполь 2
Multipole 2	Мультиполь 2
Prefilter	Предфильтр
Collision Cell lens 1	Линза ячейки столкновения 1
Collision Cell lens 2	Линза ячейки столкновения 2
Collision Energy	Энергия столкновения
Axial Field	Осевое поле
Collision Cell lens 3	Линза ячейки столкновения 3
Collision Cell Lens 4	Линза ячейки столкновения 4
Collision Pressure	Давление при столкновении
Source	Источник
Drying Gas	Осушающий газ
Nebulizer Gas 1	Распыляющий газ 1
Heating Gas 1	Нагревательный газ 1
Nebulizer Gas 2	Распыляющий газ 2
Heating Gas 2	Нагревательный газ 2
Source Exhaust	Выброс источника
HSID Temperature	Температура HSID
Source 1 Temp	Температура источника 1
Source 2 Temp	Температура источника 2
ElectroSpray V1	Электроспрей V1
ElectroSpray V2	Электроспрей V2
Curtain Cap	Крышка шторки
Resolution	Разрешение
Quadrupole 1	Квадруполь 1
Quadrupole 3	Квадруполь 3
Detector	Детектор
Detector Deflector	Дефлектор детектора
Discriminator	Дискриминатор
Detector Voltage	Напряжение детектора
Detector Horn	Сигнализатор детектора
Calibration State	Состояние калибровки
Acquire QI Data	Получение данных QI
Iteration *	Итерация *
Current Scan *	Текущее сканирование *
Pause	Пауза
Intensity (cps)	Интенсивность (имп/с)
Mass (amu)	Масса (а.е.м.)
Q1 Pos, Mass 59.05. EV30	Q1 положительный, масса 59,05, EV30
Q1 Pos. Mass 117.09, EVI5	Q1 положительный, масса 117,09, EV15
Q1 Pos. Mass 175.13, EV15	Q1 положительный, масса 175,13, EV15
Q1 Pos. Mass 384.30, EV35	Q1 положительный, масса 384,30, EV35
Q1 Pos, Mass 616.46, EV60	Q1 положительный, масса 616,46, EV60
Q1 Pos, Mass 906.67, EV55	Q1 положительный, масса 906,67, EV55
Q1 Pos. Mass 1254,93. EV60	Q1 положительный, масса 1254,93, EV60
Q1 Pos. Mass 1487.10, EV70	Q1 положительный, масса 1487,10, EV70
Current Results	Текущие результаты
Reference	Эталонное значение
Mass Found(amu)	Найденная масса (а.е.м.)
Mass Shift (amu)	Сдвиг массы (а.е.м.)
PeakWidth	Ширина пика
Peak Height (cps)	Высота пика (имп/с)
Calibration DAC	Калибровочный ЦАП
Calibration Slope (DAC/amu)	Калибровочный уклон (ЦАП/а.е.м.)
Resolution DAC	Разрешение ЦАП

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Resolution Slope (DAC/amu)	Уклон разрешения (ЦАП/а.е.м.)
Status	Статус
Found	Найдено

Просмотрите отчеты о калибровке Q1 и Q3, выбрав нужный вариант из раскрывающегося 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** (Печать всех отчетов) и выберите папку, в которую отчеты будут сохранены. Повторите процедуру, используя противоположный настроечный раствор (например, если вы выполнили процедуру, используя положительный PGG, то используйте отрицательный PPG. Если вы завершили процедуру с использованием отрицательного PPG, то вы будете использовать положительный PPG до тех пор, пока вы не завершите процедуру автокалибровки с использованием как положительного PPG, так и отрицательного PPG.

График технического обслуживания

В данном разделе описывается рекомендуемый график 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 техническому обслуживанию должны проводиться персоналом, прошедшим обучение у специалиста компании уполномоченного представителя. Любые необходимые запчасти можно приобрести через службу поддержки клиентов компании уполномоченного представителя.

Каждые 20 000 введений

- Общая (косметическая) чистка
- Замена детектора (требуется, если DV превышает 3 000 В)
- Выполнение тестирования рабочих характеристик после технического обслуживания.

120 000 введений 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 Автосемплера УВЭЖХ QSightMD

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Предупреждение: ВЫСОКОЕ НАПРЯЖЕНИЕ!



Любое техническое обслуживание должно проводиться при выключенном Автосемплере 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

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 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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Необходимые инструменты и материалы

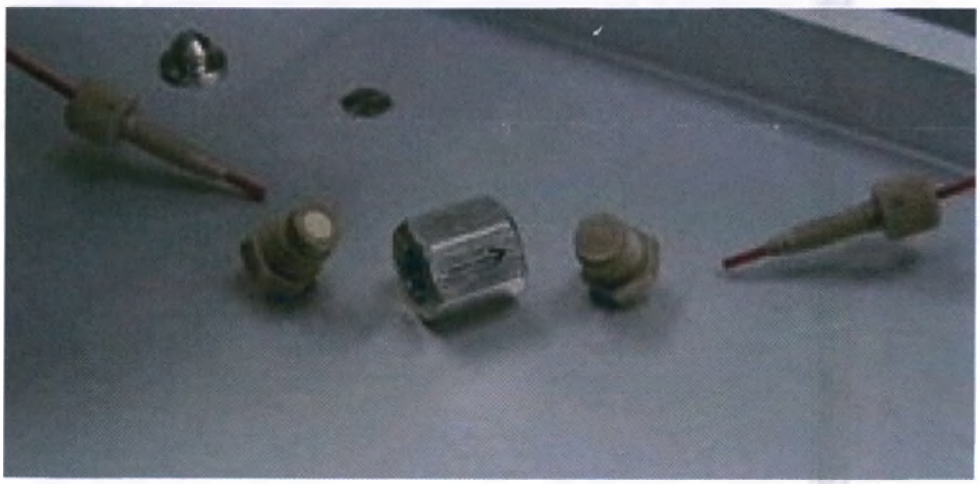
Прежде чем приступить к работе, убедитесь, что у вас под рукой есть следующее:

- Шланги и фитинги из полиэфирэфиркетона
- 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 Автосемплера, и, при необходимости, замените концевой фитинг из полиэфирэфиркетона, соединяющий трубку с фриттой.



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 Автосемплера применять пользовательский уровень доступа и предоставлять расширенный доступ только для выполнения процедур технического обслуживания.

Изменение уровня доступа на Расширенный доступ пользователя

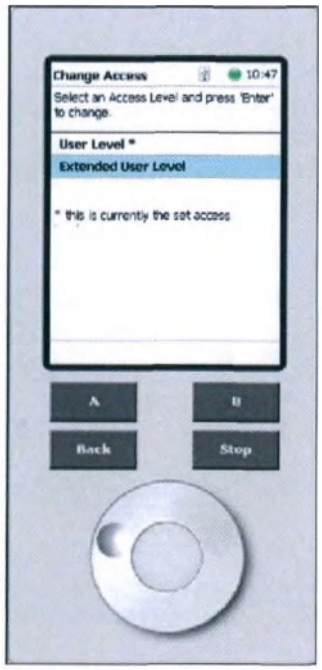
Для изменения уровня доступа на Расширенный, выполните следующие действия:

1. Используя ручной терминал PAL, нажмите одновременно кнопки меню **A** и **B** . Отобразится экран **Change Access** (Изменение доступа).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Примечание: Рядом с текущим уровнем доступа будет отображаться звездочка (*).

2. С помощью колеса прокрутки выберите **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.

Change Access	Изменение доступа
Select an Access Level and press 'Enter* to change.	Выберите уровень доступа и нажмите «Ввод», чтобы изменить его.
User Level *	Обычный уровень пользователя*
Extended user Level	Расширенный уровень пользователя
* this is currently the set access	* В настоящий момент установлен этот уровень
A	A
B	B
Back	Назад
Stop	Стоп

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).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

2. Нажмите **Options** (параметры) > **Service (Сервис)**> **Installation (Установка)**.



PAL RSI	PAL RSI
LCP1 100 pt; NL: S3 mm	LCP1 100 pt; NL: S3 мм
G: 22, PS: 3; Sc: 60 mm; Head	G: 22, PS: 3; Sc: 60 мм; головка
Peltier Stack 1	Стойка Пельтье 1
Act. Temp.: 21.1°C	Факт. темп.: 21,1°C
Setup	Установка
Mantenance	Обслуживание
Service	Сервис
Help	Помощь
About	О приборе
Shutdown	Выключение
Select	Выбрать
A	A
B	B
Back	Назад
Stop	Стоп

3. Покрутите и нажмите диск выбора, чтобы выбрать **Change Tool** (Изменить инструмент):

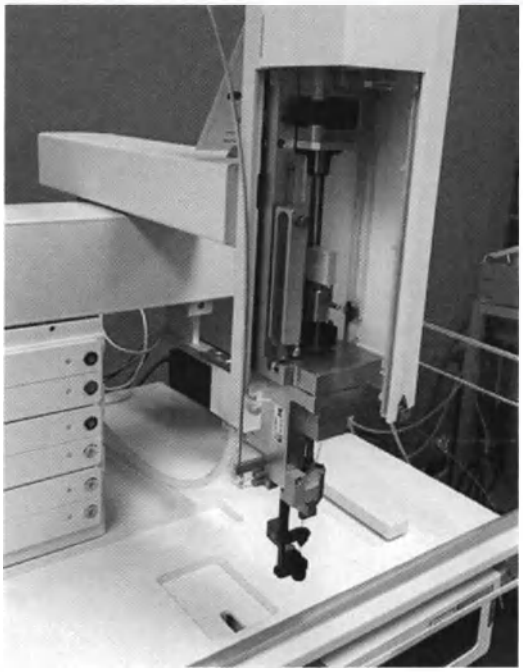
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Change Tool %	Смена инструмента %
Step 1 of 2: Change Tool	Шаг 1 из 2: Смена инструмента
Please press 'Move' to position the PALhead at the release position.	Пожалуйста, нажмите «переместить», чтобы установить головку PAL в положение разблокировки.
Move	Переместить
A	A
B	B
Back	Назад
Stop	Стоп

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

4. Нажмите кнопку Move (Переместить) (кнопка B). В результате этого действия головка физически перемещается и узел опускается вниз, чтобы обеспечить доступ к игле:

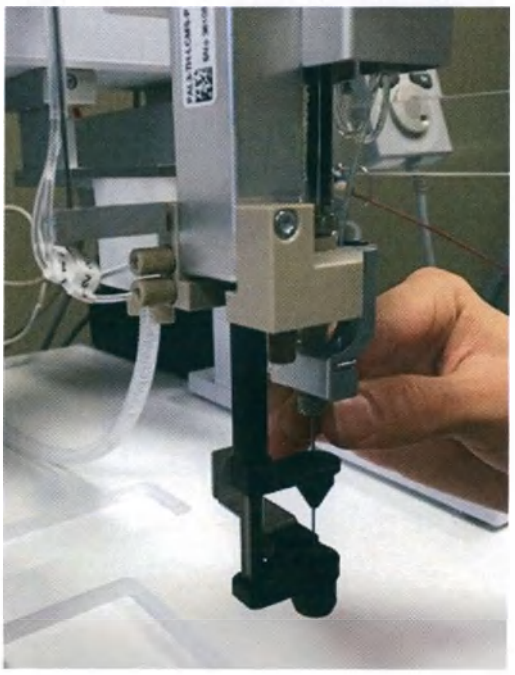


Внимание: ОПАСНОСТЬ ПРОКОЛА!



Будьте очень осторожны при работе с узлом иглы.

5. Удерживая иглу левой рукой, открутите ее правой рукой:



ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

6. Поднимите иглу вверх и выньте из узла:



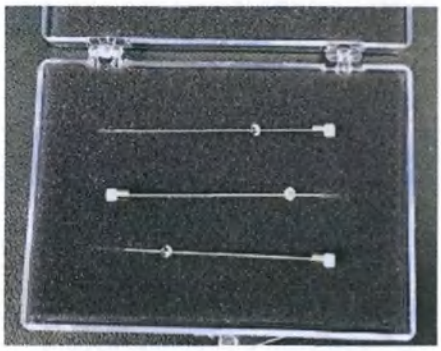
7. Вытяните иглу из затяжной гайки, стараясь не потерять шайбу:

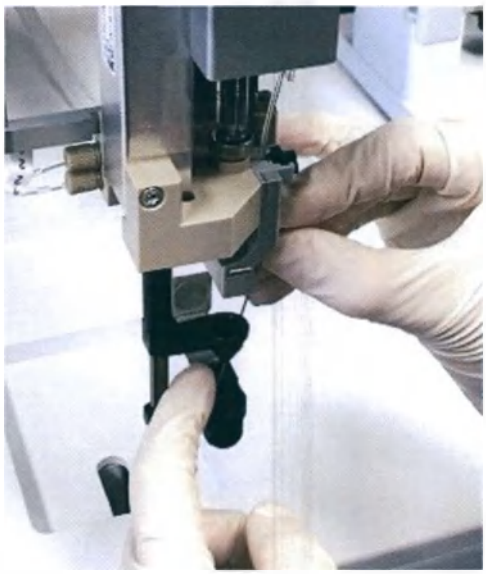


ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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):





9. Затяните гайку пальцами, чтобы зафиксировать иглу на месте.
10. На ручном контроллере нажмите **Next** (Далее) (кнопка B). Головка возвращается в исходное положение. Нажмите кнопку **OK**.

Замена шприца

Следующую процедуру следует выполнять через указанные ниже промежутки времени или по рекомендации представителя службы поддержки клиентов уполномоченного представителя:

- Каждые 25 000 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 **Расширенный уровень доступа**(см. раздел Включение расширенного доступа пользователя).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

2. Нажмите **Options** (параметры) > **Service (Сервис)**> **Installation (Установка)**.



PAL RSI	PAL RSI
LCP1 100 pt; NL: S3 mm	LCP1 100 pt; NL: S3 мм
G: 22, PS: 3; Sc: 60 mm; Head	G: 22, PS: 3; Sc: 60 мм; головка
Peltier Stack 1	Стойка Пельтье 1
Act. Temp.: 21.1°C	Факт. темп.: 21,1°C
Setup	Установка
Mantenance	Обслуживание
Service	Сервис
Help	Помощь
About	О приборе
Shutdown	Выключение
Select	Выбрать
A	A
B	B
Back	Назад
Stop	Стоп

3. Покрутите и нажмите диск выбора, чтобы выбрать **Change Tool** (Изменить инструмент).

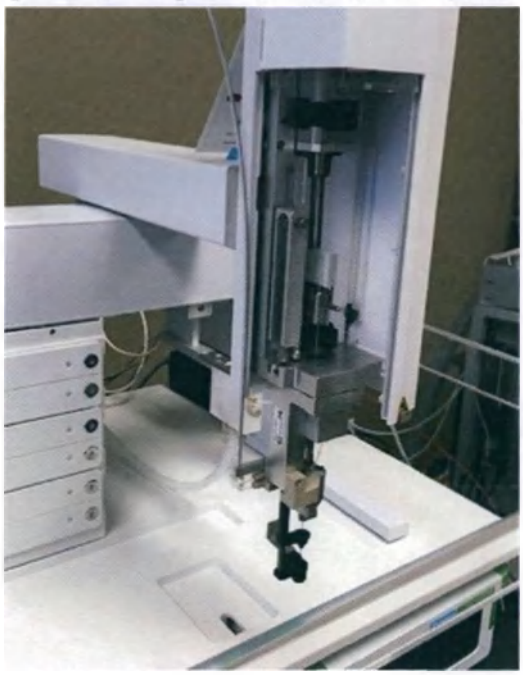
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Change Tool %	Смена инструмента %
Step 1 of 2: Change Tool	Шаг 1 из 2: Смена инструмента
Please press 'Move' to position the PALhead at the release position.	Пожалуйста, нажмите «переместить», чтобы установить головку PAL в положение разблокировки.
Move	Переместить
A	A
B	B
Back	Назад
Stop	Стоп

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

4. Нажмите кнопку **Move** (Переместить) (кнопка B). В результате этого действия головка физически перемещается и узел опускается вниз, чтобы обеспечить доступ к шприцу:



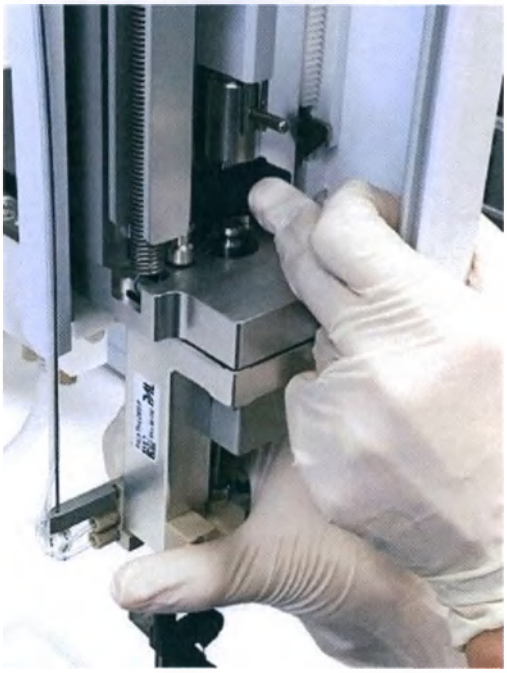
5. Удерживая плунжер в левой руке, сдвиньте серебристый рычаг вверх, пока он не освободит плунжер:



Предупреждение: Опасность ущемления. Будьте очень осторожны при работе с деталями зажима и плунжера.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

6. Удерживая весь инструмент LCP, другой рукой нажмите на черный зажим справа, чтобы освободить узел инструмента LCP; весь инструмент отсоединится.



Предупреждение: Опасность ущемления. Будьте очень осторожны при работе с деталями зажима и плунжера.

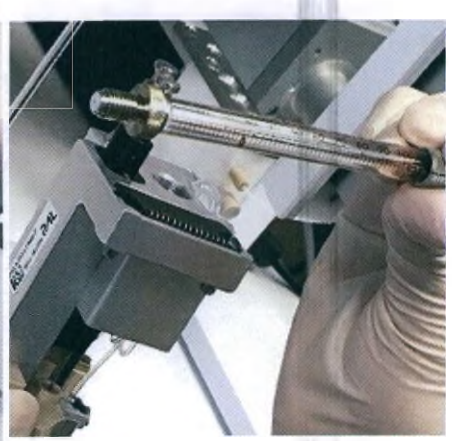
7. Снимите головку плунжера с узла инструмента LCP. Отложите ее в сторону на чистую ровную устойчивую поверхность.
8. Откручивайте черный колпачок до тех пор, пока не сможете извлечь плунжер. Отложите.
9. Пальцами открутите верхнюю гайку шприца:



ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

10. Вытащите шприц. Отложите.





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 кнопку **OK**.
15. Заправьте инструмент ЖХ (см. Промывка шприца и заправка инструмента ЖХ).

График технического обслуживания

В данном разделе описывается рекомендуемый график технического обслуживания (ТО) для

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Проведение планового технического обслуживания

Автосемплера УВЭЖХ 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 техническому обслуживанию должны проводиться персоналом, прошедшим обучение у специалиста уполномоченного представителя. Любые необходимые запчасти можно приобрести через службу поддержки клиентов уполномоченного представителя.

Каждые 20 000 введений

- Общая (косметическая) чистка
- Замените уплотнение иглы и ротора
- Выполните смазку

120 000 введений или годовое ТО

- Общая (косметическая) чистка
- Замените ЖХ инжектор PAL с уплотнением
- Выполните смазку

Процедуры технического обслуживания насоса для УВЭЖХ QSightMD

Предупреждение: При выполнении планового технического обслуживания соблюдайте особую осторожность, если насос находится под напряжением. Насос для УВЭЖХ является устройством высокого давления; всегда следите за тем, чтобы давление в устройстве нарастало медленно, и постоянно 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.

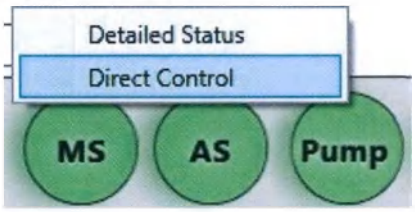
   Убедитесь, что насос подключен к программному обеспечению (зеленый сигнал индикатора — см. раздел Управление устройством по световому индикатору правой кнопкой мыши).



ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

MS	MC
AS	AC
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

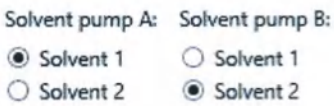
3. Щелкните правой кнопкой мыши на световом индикаторе насоса и выберите **Direct Control** (Прямое управление).



Detailed Status	Подробный статус
Direct Control	Прямое управление
MS	MC
AS	AC
Pump	Насос

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:



Solvent pump A	Растворитель для насоса A
Solvent pump B	Растворитель для насоса B
Solvent 1	Растворитель 1
Solvent 2	Растворитель 2

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.

   Примечание: Этот процесс произойдет только для линий подачи растворителя, выбранных в Direct Control (Прямое управление).

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.

   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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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

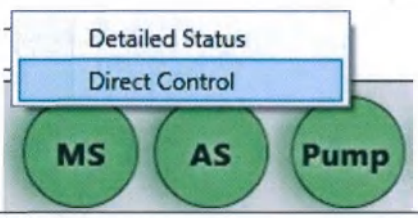
Если вам необходимо отключить насос на ночь или на выходные, рекомендуется выполнить следующую процедуру:

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)



MS	MC
AS	AC
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q



Detailed Status	Подробный статус
Direct Control	Прямое управление
MS	MC
AS	AC
Pump	Насос

Откроется окно **Direct Control** (Прямое управление), в котором можно управлять насосом независимо.

4. В разделе "Промывка" выберите **Prime mobile phase** (Заправка подвижной фазой). Она автоматически остановится через 90 секунд.
5. 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).
6. Выйдите из программы и выключите насос.

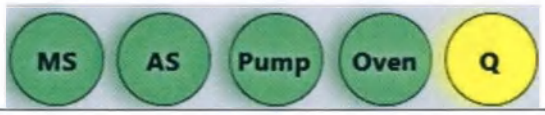
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Долгосрочное отключение

Если вам необходимо отключить насос на длительный период времени, рекомендуется выполнить следующую процедуру:

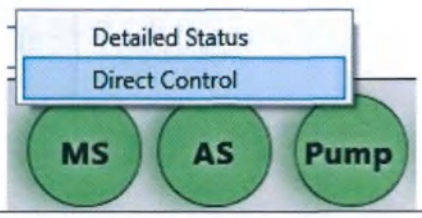
1. Приготовьте свежий 100% изопропанол. Используйте только растворители класса ВЭЖХ, отфильтрованные через фильтры 0,2 мкм. Подсоедините все шланги к изопропанолу.
2. Убедитесь, что насос включен, и запустите программное обеспечение Simplicity.

   Убедитесь, что насос подключен к программному обеспечению (зеленый сигнал индикатора — см. раздел Управление устройством по световому индикатору правой кнопкой мыши).



MS	MC
AS	AC
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

3. Щелкните правой кнопкой мыши на световом индикаторе насоса и выберите **Direct Control** (Прямое управление).

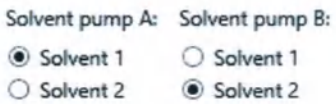


Detailed Status	Подробный статус
Direct Control	Прямое управление
MS	MC
AS	AC
Pump	Насос

Откроется окно **Direct Control** (Прямое управление), в котором можно управлять насосом независимо.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

4. В разделе **Direct Control** (Прямое управление) выберите насосы для растворителя, как показано на рисунке:



Solvent pump A	Растворитель для насоса A
Solvent pump B	Растворитель для насоса B
Solvent 1	Растворитель 1
Solvent 2	Растворитель 2

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.

График технического обслуживания

В данном разделе описывается рекомендуемый график технического обслуживания (ТО) насоса для УВЭЖХ 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 техническому обслуживанию должны проводиться персоналом, прошедшим обучение у специалиста уполномоченного представителя. Любые необходимые запчасти можно приобрести через службу поддержки клиентов уполномоченного представителя.

120 000 введений или годовое ТО

- Общая (косметическая) чистка
- Замените уплотнения высокого давления
- Замените фильтр насоса
- Замените выходной фильтр
- Замените поршневой картридж
- Замените обратный клапан
- Выполните смазку

Процедуры технического обслуживания колоночного термостата QSight MD

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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.

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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Конфигурации шлангов

В следующем разделе описаны возможные конфигурации шлангов и материалы для системы УВЭЖХ-скрининга QSight 225MD. Описанные здесь конфигурации представляют собой рекомендации, и вы должны выбрать конфигурацию, в которой наилучшим образом сочетаются потребности вашего приложения с конкретной настройкой 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 Автосемплеру
- От Автосемплера 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 УВЭЖХ-скрининга QSight 225MD проходит от насоса к колоночному термостату через Автосемплер. Из колоночного термостата пробы поступают через разделяющий клапан в масс-спектрометр.

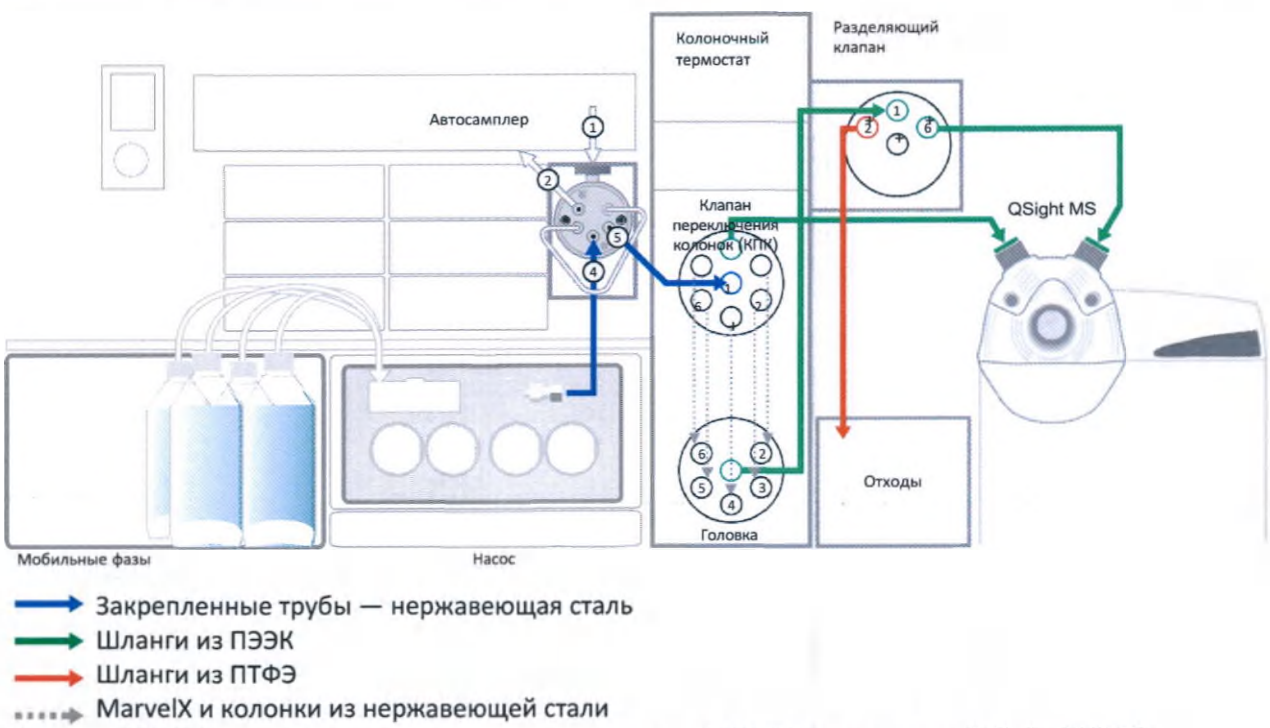


Рисунок 22: Общая конфигурация шлангов системы УВЭЖХ-скрининга QSight 225MD .

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.

От насоса к Автосемплеру

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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.



Рисунок 23: Конфигурация шлангов от насоса к Автосемплеру.

Клапан Автосемплера будет иметь 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 24: Конфигурация шлангов от Автосемплера к колоночному термостату).

От Автосемплера к колоночному термостату

Подключение Автосемплера к колоночному термостату осуществляется через клапан КПК.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

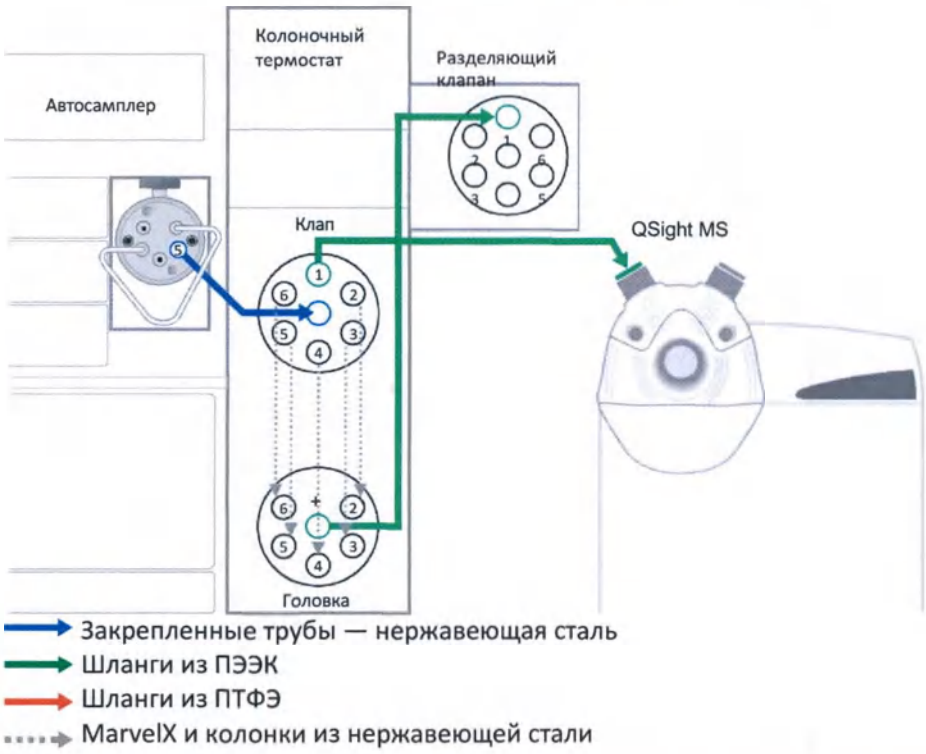


Рисунок 24: Конфигурация шлангов от Автосемплера к колоночному термостату

Клапан переключателя колонок

- Центральный порт на КПК имеет соединения для шлангов от Автосемплера
- 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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

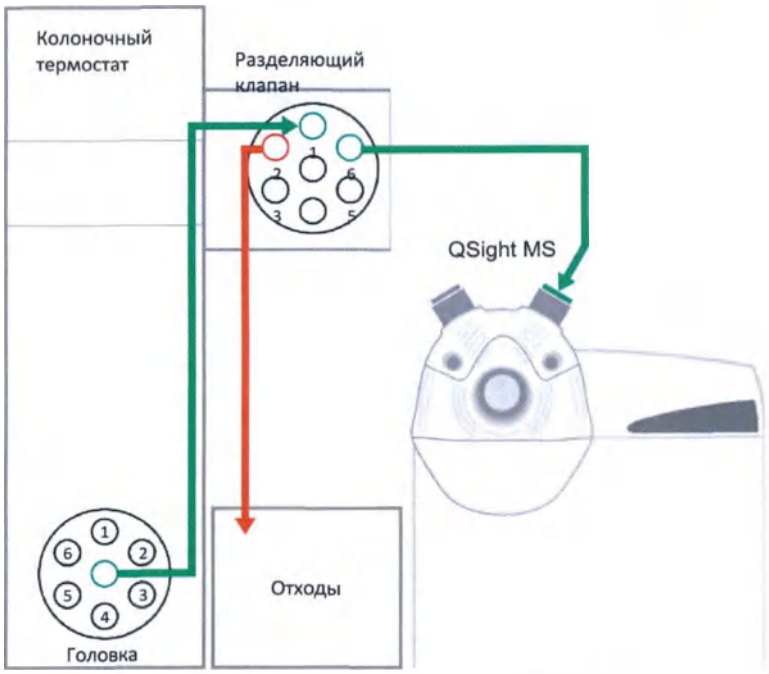


Рисунок 25: Конфигурация шлангов разделяющего клапана.

- 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 МС завершает настройку.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

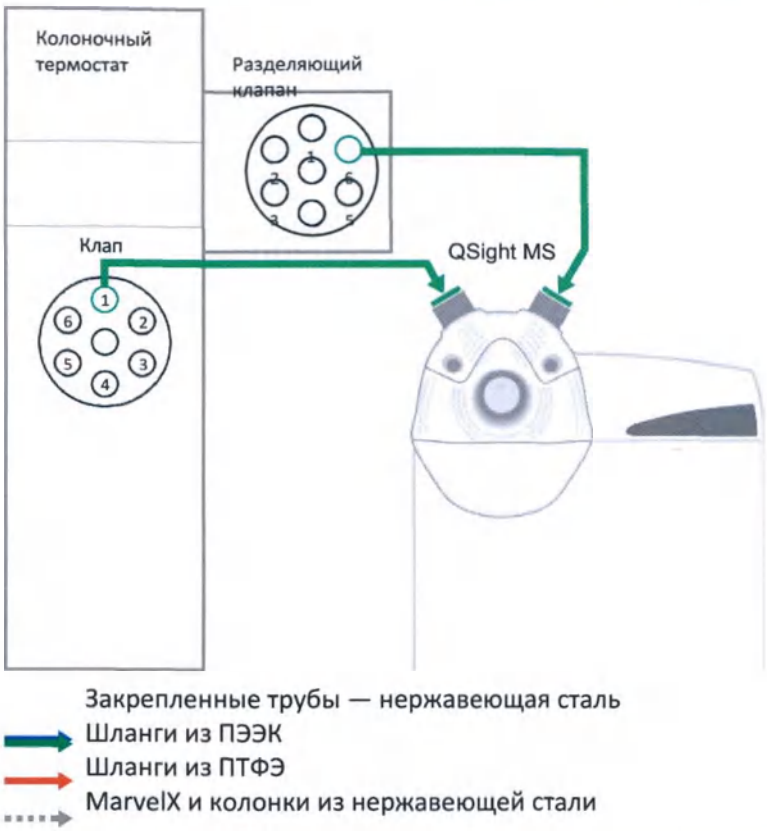
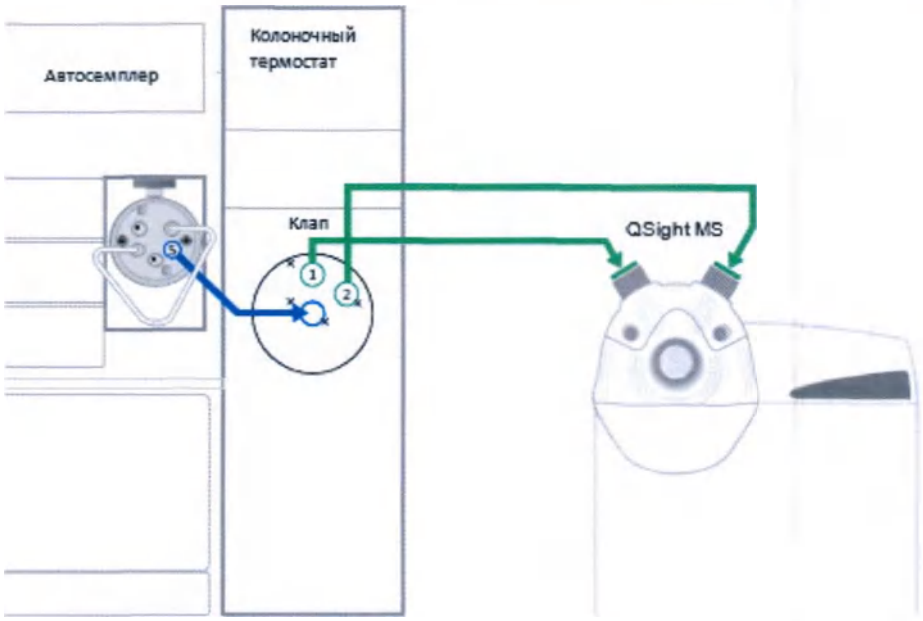


Рисунок 26: Конфигурации шлангов для введения потока и колонки в масс-спектрометр QSight 225MD.

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).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Закрепленные трубы — нержавеющая сталь
Шланги из ПЭЭК
Шланги из ПТФЭ
MarvelX и колонки из нержавеющей стали

Рисунок 27: Конфигурация шлангов для проведения двух проточно-инжекционных анализов.

Ввод ЖХ через две колонки

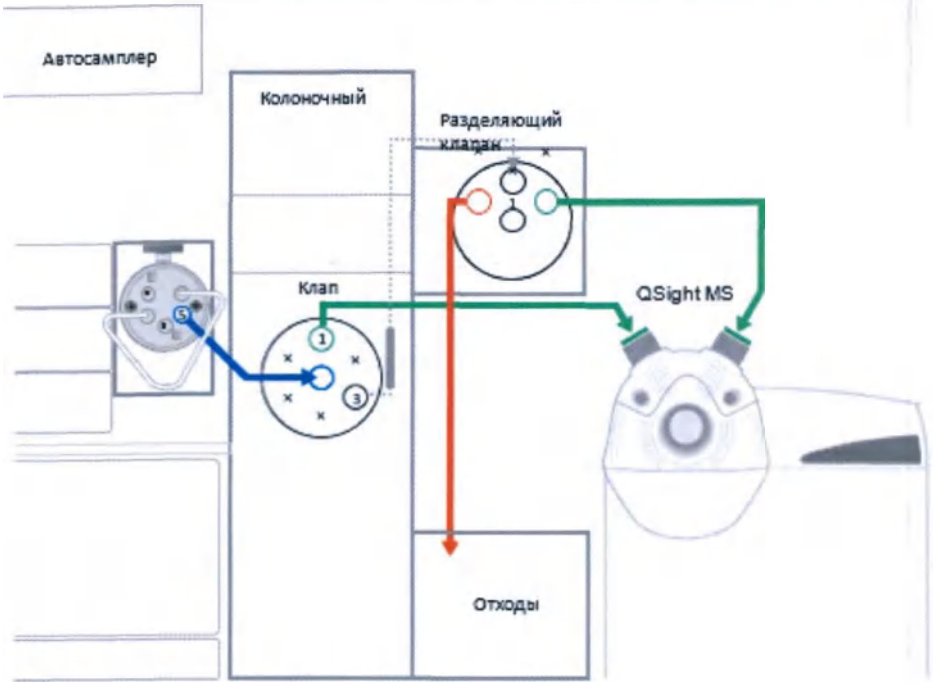
В этой конфигурации будет получена вся проба, выделенный с помощью ЖХ-сепарации (ничего не будет направлено в отходы). Головку и разделяющий клапан можно обойти при подключении, как показано на рисунке 27: Конфигурация шлангов для проточно-инжекционных анализов. Колонки ЖХ должны быть подключены к клапану 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 »).

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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Закрепленные трубы — нержавеющая сталь
Шланги из ПЭЭК
Шланги из ПТФЭ
MarvelX и колонки из нержавеющей стали

Рисунок 28: 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». Любая позиция на КПК может быть использована для ввода ЖХ (см. раздел От Автосемплера к колоночному термостату).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Рисунок 29: Конфигурация шлангов для ввода ЖХ через несколько колонок

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.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,

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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.

ЖК-дисплей прибора	Полное сообщение об ошибке	Действие
Source Not Ready Check Drying Gas (Источник не готов Проверьте осушающий газ)	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	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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

вытяжка из источника)		

Папки и алгоритмы

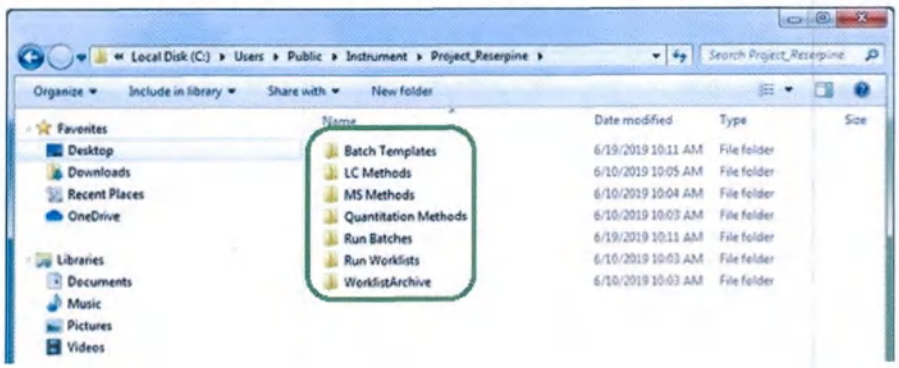
В этом разделе описывается структура папок и алгоритмы, используемые программным обеспечением Simplicity 3Q MD. Если у вас возникли вопросы по структуре папок или описанным здесь алгоритмам, обратитесь к представителю службы поддержки клиентов уполномоченного представителя.

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:



Local Disk (C:) > Users > Public > Instrument > Project_Reserpine	Локальный диск (C:) > Пользователи > Публичный > Прибор > Проект_Резерпин
Organize	Упорядочить
Include in library	Добавить в библиотеку
Share with	Поделиться
New folder	Новая папка
Favorites	Быстрый доступ
Box Sync	Синхронизация
Desktop	Рабочий стол
Downloads	Загрузки
Recent Places	Недавние места
Libraries	Библиотеки
Documents	Документы
Music	Музыка
Pictures	Изображения
Videos	Видео
Name	Имя
Date modified	Дата изменения
Type	Тип
Size	Размер
Batch Templates	Шаблоны серий
LC Methods	Методы ЖХ
MS Methods	Методы МС

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Quantitation Methods	Методы количественного анализа
Run Batches	Текущие серии
Run Worklists	Текущие рабочие списки
WorklistArchive	Архив рабочих списков

Рисунок 30: 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.

Алгоритмы сбора

Сглаживание по Савицкому-Голаю

Фильтр Савицкого-Голая — это цифровой фильтр, который можно применить к набору точек данных для сглаживания линии, увеличивая
соотношение сигнал/шум без значительного искажения сигнала. Используемый процесс известен как свертка: последовательные поднаборы соседних точек данных подгоняются под полином низкой степени методом наименьших линейных квадратов.

Если точки данных расположены на одинаковом расстоянии друг от друга, можно найти аналитическое решение уравнений наименьших квадратов в виде одного набора коэффициентов свертки, которые можно применить ко всем поднаборам данных, чтобы получить оценки сглаженного сигнала в центральной точке каждого поднабора.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Ввод:

- **Intensities** (Интенсивность) — набор точек данных для целей сглаживания
- **SmoothFactor** (Фактор сглаживания) — количество точек, используемых по обе стороны от контрольной точки.
- **Polynomial** (Полином) — Порядок сглаживающего полинома
- **Order**(Порядок) — Порядок производной (0 используется только для сглаживания).

Гауссово сглаживание

Гауссово сглаживание уменьшает шум в пиках для получения более симметричного пика. Пользователь выбирает точки, между которыми будет происходить сглаживание, количество итераций и значения сигмы (по умолчанию они равны 5, 1,
и 1, соответственно). 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). Значения интенсивности сглаживаются с помощью функции Гаусса, показанной ниже:

$$G(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{-\frac{x^2+y^2}{2\sigma^2}}$$

Где:

- Сглаженные значения интенсивности Y находятся в зависимости от времени удерживания по оси X.
- Сигма представляет собой дисперсию значений интенсивности в пределах данного значения
- Число точек представляет собой окно перемещения

Ввод:

- (X, Y) ряд данных
- количество точек (T), где T∈Z, T нечетное, T >= 3
- сигма (S), где S∈R, S > 0,5

Описание алгоритма:

```
GaussianSmooth((X,Y), T, S) → (X,SmoothedY) begin
Coefficients = GetGaussianCoefficients(T, S); loop (i from T/2 to Y.Length- T/2)
sum = 0;
loop(j from -T/2 to T/2)
sum ← sum + Coefficients[j+T/2] * Y[i + j]; end if(sum > 0)
then
(X[i], SmoothedY[i]) ← (X[i], sum/T) else
(X[i], SmoothedY[i]) ← (X[i], 0) end end

/* копирование значений y из "краев" массива в "края" SmoothedY */ loop (i from 0 to T/2
- 1)
(X[i], SmoothedY[i]) ← (X[i], Y[i]) end
loop (i from Y.Length-T/2+1 to Y.Length - 1) (X[i],
SmoothedY[i]) ← (X[i], Y[i]) end
end
```

```
GetGaussianCoefficients(T,S) → Coefficients begin sum ← 0;
loop (i from 0 to T.Length) Coefficients[i] ← Gauss(i-T/2, S) sum ← sum + Coefficients[i]
end
if (sum ≠ 0) then
loop (i from 0 to T.Length) Coefficients[i] =
Coefficients[i] / sum end else
Coefficients ← NULL end end
Gauss(x, S) → result begin
result ← exp(-x2/2S)/Sqrt(2πS) end
```

Вывод:

- Серия данных (X, SmoothedY)

Сглаживание скользящего среднего

Сглаживание скользящего среднего уменьшает случайные колебания в хроматографических данных, в результате чего пики становятся более гладкими. Пользователь выбирает точки, между которыми будет происходить сглаживание, называемые окном сглаживания, и количество итераций (по умолчанию 3). Значения интенсивности сглаживаются с помощью формулы скользящего среднего, как показано ниже:

$$(y_k)_s = \sum_{i=-n}^{i=n} y_{k+i}/(2n+1)$$

Ввод:

- (X, Y) ряд данных
- количество точек (T), где T∈Z, T нечетное, T >= 3

Описание алгоритма:

```
loop (i from T/2 to Y.Length-T/2) sum = 0; loop(j from
-T/2 to T/2) sum ← sum + Y[i+j] end
if(sum > 0) then
(X[i], SmoothedY[i]) ← (X[i], sum/T) else
(X[i], SmoothedY[i]) ← (X[i], 0) end end
/* копирование значений y из "краев" массива в "края" SmoothedY */ loop (i from 0 to T/2
- 1)
(X[i], SmoothedY[i]) ← (X[i], Y[i]) end
loop (i from Y.Length-T/2+1 to Y.Length - 1) (X[i], SmoothedY[i]) ← (X[i], Y[i])
end
```

Вывод:

- Серия данных (X, SmoothedY)

Поиск пика

Алгоритм поиска пиков находит пики для данных XY.

Описание функций:

- Используя алгоритм Савицкого-Голая, найти производную от входных значений Y (которая также производит значения Y и которую мы называем первой производной) и сохранить ее в виде списка
- Из значений первой производной Y перечислить индексы пересечения нулей (когда данные пересекают ось X от отрицательных значений к положительным и наоборот).
- Вернуть результат с нулевыми пиками, если список нулевых пересечений пуст.
- Снова с использованием алгоритм Савицкого-Голая найти вторую производную от входных значений, что делается путем нахождения производной от первой производной, и сохранить ее в виде списка.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

- 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».

Вывод:

- Возвращение списка пиков.

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 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

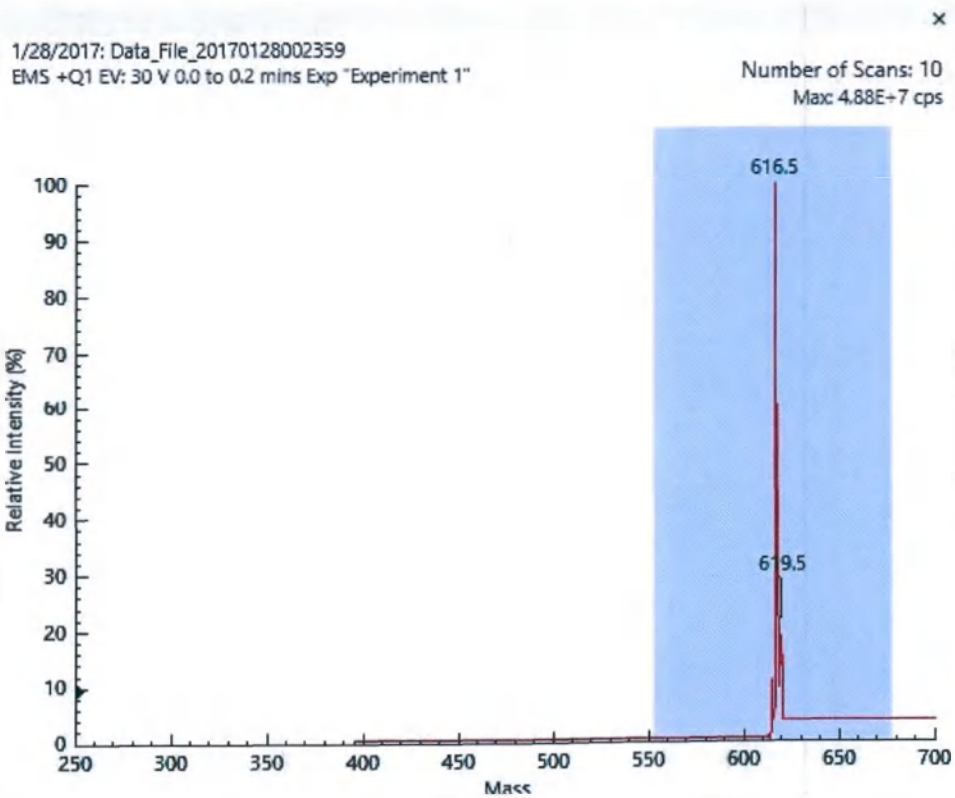
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

- **Описание** — комбинация имени файла данных и названия EMS (состоящего из типа сканирования и диапазона масс). Ниже приведен пример диаграммы пиков и соответствующие значения EMS:



EMS Information	Информация EMS
Mass (m/z)	Масса (масса/заряд)
Width (m/z)	Ширина пика (масса/заряд)
Resolution	Разрешение
Intensity (cps)	Интенсивность (имп/с)
Description	Описание
616.50 0.66	616.50 0.66
4.88E+007 Data_File_20170128002359 +Q1 250.0 to 700.0 m/z	4.88E+007 Файл_данных_20170128002359 +Q1 250.0 - 700.0 m/z

Рисунок 31: Экран информации EMS



1/28/2017: Data_File_20170128002359	28.01.2017: Файл_данных_20170128002359
EMS +Q1 EV: 30 V 0.0 to 0.2 mins Exp 'Experiment 1"	EMS +Q1 EV: 30 В 0,0 – 0,2 мин Exp 'Эксперимент 1"
Number of Scans: 10	Количество сканов: 10
Max: 4.88E-7 cps	Макс.: 4.88E-7 имп/с
Relative intensity (%)	Относительная интенсивность (%)
Mass	Масса

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Рисунок 32: 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.

$$S/N = P_{signal}/P_{noise} = (Height_{peak} - Height_{background})/(\sigma_{background})$$

Алгоритмы количественной оценки

Сглаживание количественных показателей

Проведение количественной оценки предусматривает несколько вариантов сглаживания: без сглаживания, сглаживание Савицкого-Голая,

Гауссово сглаживание и фильтрация по скользящему среднему. (См. раздел Алгоритмы количественной оценки).

Измеренная стоимость

$$MeasuredValue = \frac{(Area_{peak})}{(Area_{peakIS})} \times Concentration_{IS} \times RRF$$

Где RRF — коэффициент относительного отклика, указанный для каждого аналита в методе количественного определения; и IS — внутренний стандарт, указанный в методе количественного определения.

Алгоритмы выбора пиков

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.

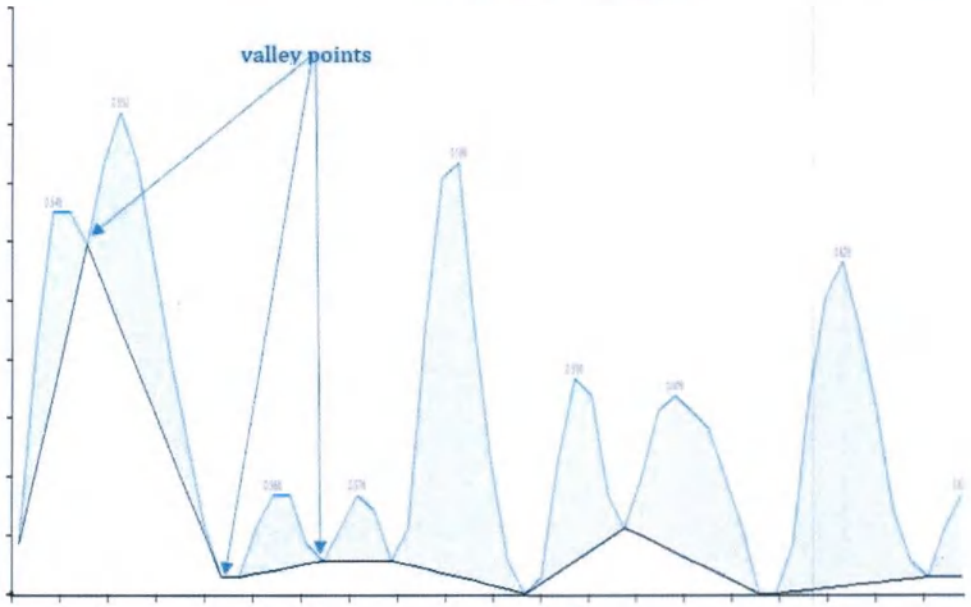
Ввод:

- (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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Valley points	Точки долин

Рисунок 33: 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) */
```


ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

```
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*/
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)

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).

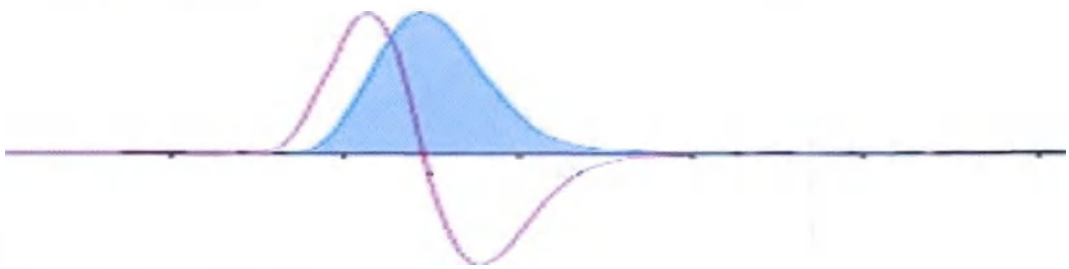


Рисунок 34: Пример выбора пика методом наклона

Ввод:

- (X, Y) данные или (X, SmoothedY) данные (именуемые как данные)

Описание алгоритма:

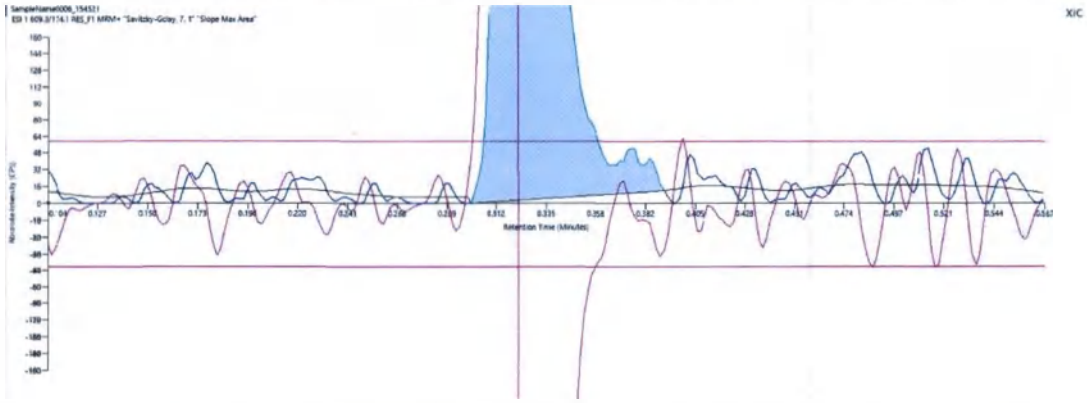
- Найти максимальную интенсивность данных
- Найти первую производную линии
- Привести линию первой производной к максимальной интенсивности (что позволяет наложить линию первой производной на хроматограмму для построения графика).
- Определить межквартильный размах коэффициента масштабирования

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

(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)



SampleName0006_154521	НазваниеПробы0006_154521
ESI 1 609.3/174.1 RES.F1 MRM+ 'Savitzky-Golay, 7, 1" "Slope Max Area"	ESI 1 609.3/174.1 RES.F1 MRM+ 'Савицкого-Голая, 7, 1' "Максимальная площадь уклона"
Absolute Intensity (CPS)	Абсолютная интенсивность (имп/с)
Retention Time (Minutes)	Время удерживания (минут)

Рисунок 35: 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)

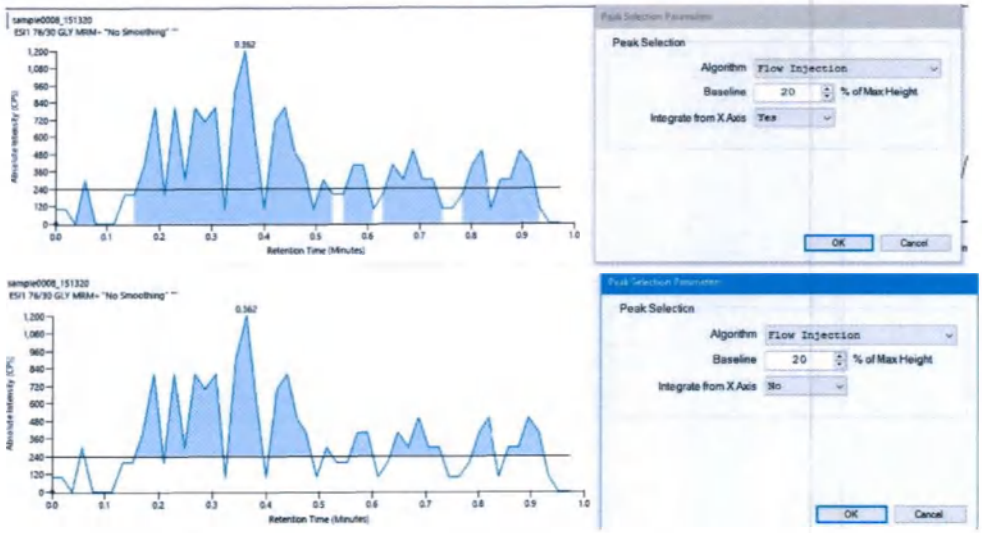
Алгоритм ввода потока и базовой линии

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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



SampleName0008_151320	НазваниеПробы0008_151320
ESI 1 76/30 GLY MRM- 'No Smoothing' ~	ESI 1 76/30 GLY MRM- 'Без сглаживания'
Absolute Intensity (CPS)	Абсолютная интенсивность (имп/с)
Retention Time (Minutes)	Время удерживания (минут)
Peak Selection Parameters	Параметры выбора пика
Peak Selection	Выбор пика
Algorithm	Алгоритм
Flow Injection	Проточно-инжекционный
Baseline	Базовая линия
% of Max Height	%
Integrate from X Axis	Интегрирование по оси X
Yes	Да
No	Нет

Рисунок 36: 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 ←
```


ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

```
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
```

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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Глоссарий

В этом разделе описаны некоторые сокращения и термины, используемые в программном обеспечении Simplicity 3Q MD, а также системах, интерфейсах и документации QSight .

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 Автосемплер выполнит цикл промывки.

а.е.м. атомная единица массы. Одна двенадцатая (1/12) массы атома углерода-12.

Анализируемый компонент	Изучаемый аналит, обычно указываемый в виде пары чисел – соотношения характерного для аналита массы к заряду (m/z, например, 321.1/211.1)

AS Автосемплер.

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 Список проб и соответствующих методов для сбора данных в режиме МС или ЖХ/МС.

Создание списка серий 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 серии.

Центр/ширина Центральная точка окна массы.

cpsчисло 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.

ECЕвропейское 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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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.

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.

EVВходное напряжение. Входное напряжение уменьшает фоновые ионы, поступающие в масс-спектрометр.

FCC Федеральная комиссия по связи.

Главный экран Когда вы открываете программу, автоматически выбирается и отображается вкладка Главная. Опции, доступные на вкладке Главная, зависят от типа пользователя.

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 ЖХ Метод получения компонента (например, Автосемплером 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, Автосемплер 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.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

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 MC 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.

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.

м/zГоризонтальная 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.

NLB 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.

PNНомер детали. Обычно обозначает заказываемую деталь или расходный материал уполномоченного представителя.

PRВ 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.

PTВ программе Simplicity это означает режим сканирования продукта.

КК Контроль качества.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Процессор 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.

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

СОПы Стандартные операционные процедуры.

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 Автосемплера. 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), Автосемплер (AS), термостат, насос и очередь сбора данных (Q).

Лоток Применительно к Автосемплеру 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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

от конкретного просматриваемого графика данных или метода МС, использованного при сборе данных.

Производитель:
Wallac Oy (Валлак Ою)
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

PerkinElmer

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Приложение к Руководству Пользователя

«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии»

Разработчик:
Wallac Oy (Валлак Ою)
Mustionkatu 6, FI-20750, Turku, Finland
(Мустионкату 6, FI-20750, Турку, Финляндия)
Тел: 358-(0)2-267 8111
Факс: 358-(0)2-267 8357

Наименование и адрес места производства:
Wallac Oy (Валлак Ою),
Mustionkatu 6, FI-20750, Turku, Finland
(Мустионкату 6, FI-20750, Турку, Финляндия)

Официальный производитель:
Wallac Oy (Валлак Ою)
Mustionkatu 6, FI-20750, Turku, Finland
(Мустионкату 6, FI-20750, Турку, Финляндия)
Тел: 358-(0)2-267 8111
Факс: 358-(0)2-267 8357

Уполномоченный представитель в Российской Федерации
Акционерное общество «ПРИБОРЫ»
109028, г. Москва, Певческий пер., д. 4, стр. 1, помещ. I, комната 10
Телефон/факс: (495) 937-45-94 / (495) 937-45-92
Адрес электронной почты: info@pribori.com

Утверждено:
Полное имя: Леонид Николаевич Ефимов
Должность: Генеральный директор
Компания: Акционерное общество «ПРИБОРЫ»
Подпись:
Дата:
Печать:

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Наименование, общее описание и назначение медицинского изделия

Наименование: «Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии».
Далее по тексту: Система скрининговая, Система, Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System», «QSight 225MD UHPLC Screening System», медицинское изделие, оборудование.

Назначение: «Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии» предназначена для качественной идентификации и количественного определения соединений в клинических образцах путем разделения образца на простые аналиты с помощью УВЭЖХ, с последующей ионизацией соединений в электроспрее и разделения полученных ионов с помощью электрического поля в соответствии с их массой. Система пригодна для применения в клинических условиях и должна эксплуатироваться квалифицированным лабораторным персоналом. Устройство работает от сети (на переменном токе), при минимальном участии техника, некоторые этапы анализа автоматизированы.

Описание назначения:
Описание целевого аналита:
При работе с набором реагентов «Набор для недериватизированной тандемной масс-спектрометрии NeoBase 2 (NeoBase 2 Non-derivatized MSMS kit)» определяются следующие аналиты:

Количественный анализ этих аналитов и соотношений между ними проводится с целью определения профилей концентрации этих веществ, что может быть полезным при скрининге новорожденных на предмет выявления нарушений обмена веществ.

Аналиты, определяемые с помощью набора для недериватизированной тандемной масс-спектрометрии NeoBase 2.

НАЗВАНИЕ ОПРЕДЕЛЯЕМОГО ВЕЩЕСТВА	СОКРАЩЕННОЕ НАЗВАНИЕ
Аминокислоты	
Аланин	Ala
Аргинин	Arg
Аргинин-янтарная кислота[1, 3]	Asa
Цитруллин	Cit
Глутамин/лизин[2, 3]	Gln\Lys
Глутаминовая кислота[3]	Glu
Глицин	Gly
Лейцин/изолейцин/гидроксипролин[2]	Leu\Ile\Pro-OH
Метионин	Met
Орнитин	Orn
Фенилаланин	Phe
Пролин	Pro
Тирозин	Tyr
Валин	Val
Карнитины	
Свободный карнитин	C0
Ацетилкарнитин	C2
Пропионилкарнитин	C3

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Малонилкарнитин/3-гидрокси-бутирилкарнитин[2]	C3DC\C4OH
Бутирилкарнитин	C4
Метилмалонил/3-гидрокси-изовалерилкарнитин[2]	C4DC/C5OH
Изовалерилкарнитин	C5
Тиглилкарнитин	C5:1
Глутарилкарнитин/3-гидрокси-гексаноилкарнитин[2]	C5DC\C6OH
Гексаноилкарнитин	C6
Адипилкарнитин	C6DC
Октаноилкарнитин	C8
Октеноилкарнитин	C8:1
Деканоилкарнитин	C10
Декеноилкарнитин	C10:1
Декадиеноилкарнитин	C10:2
Додеканоилкарнитин	C12
Додекеноилкарнитин	C12:1
Тетрадеканоилкарнитин (миристиолкарнитин)	C14
Тетрадекеноилкарнитин	C14:1
Тетрадекадиеноилкарнитин	C14:2
3-гидрокси-тетрадеканоилкарнитин	C14OH
Гексадеканоилкарнитин (пальмитоилкарнитин)	C16
Гексадекеноилкарнитин	C16:1
3-гидрокси-гексадеканоилкарнитин	C16OH
3-гидрокси-гексадекеноилкарнитин\ гептадеканоилкарнитин[2, 3]	C16:1OH\C17
Октадеканоилкарнитин (стероилкарнитин)	C18
Октадекеноилкарнитин (олеилкарнитин)	C18:1
Октадекадиеноилкарнитин(линолеилкарнитин)	C18:2
3-гидрокси-октадеканоилкарнитин	C18OH
3-гидрокси-октадекеноилкарнитин	C18:1OH
3-гидрокси-октадекадиеноилкарнитин[3]	C18:2OH
Эйкозаноилкарнитин (арахидоилкарнитин)[3]	C20
Докозаноилкарнитин (бегеноилкарнитин)[3]	C22
Тетракозаноилкарнитин (лигноцероилкарнитин)[3]	C24
Гексакозаноилкарнитин (церотоилкарнитин)[3]	C26
Кетоны	
Сукцинилацетон[1]	SA
Нуклеозиды	
Аденозин[3]	ADO
2'-деоксиаденозин[3]	D-ADO
Лизофосфолипиды	
C20:0 лизофосфатидилхолин[3]	C20:0-LPC
C22:0 лизофосфатидилхолин[3]	C22:0-LPC
C24:0 лизофосфатидилхолин[3]	C24:0-LPC
C26:0 лизофосфатидилхолин[3]	C26:0-LPC

[1] Для измерения аргинин-янтарной кислоты и сукцинилацетона необходимо использовать «Раствор для определения наличия сукцинилацетона NeoBase 2 (NeoBase 2 Succinylacetone Assay Solution)» (3046-0010).

[2] Аналиты, указанные в этих строках, являются либо изомерами, либо изобарами, и различить их в рамках тандемного масс-спектрометрического эксперимента невозможно.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

[3] Для аналитов, указанных в этих строках, была проведена оценка случайной погрешности на образцах пациентов. Аналитическая эффективность в клинических испытаниях не оценивалась.

Сведения о научной обоснованности аналита:
Краткое описание заболевания

Отклонение от нормы уровней содержания в крови какого-либо из аналитов, измеряемых с помощью набора для недериватизированной тандемной масс-спектрометрии NeoBase 2, может свидетельствовать о наличии врожденного нарушения обмена веществ (генетически обусловленного дефекта метаболизма) [1-27]. Например, свободный карнитин (C0) и ацилкарнитины являются лабораторными индикаторами (маркерами) нарушений окисления жирных кислот (ОЖК) или органических ацидурий (ОА); аминокислоты являются маркерами аминоацидопатий или гипераммониемии; сукцинилацетон (SA) является первичным маркером аминоацидопатии, известной под названием «тирозинемия 1-го типа»; нуклеозиды аденозин (ADO) и 2'-деоксиаденозин (D-ADO) являются маркерами нарушения метаболизма пуринов, тяжелого комбинированного иммунодефицита аденозиндезаминазы; а C26:0 лизофосфатидилхолин (C26:0-LPC) является маркером Х-сцепленной адренолейкодистрофии.

Набор для недериватизированной тандемной масс-спектрометрии NeoBase 2 позволяет измерять 57 различных аналитов (т. е. 14 аминокислот, 36 карнитинов, 2 нуклеозида, сукцинилацетон и 4 лизофосфатидилхолина) за один анализ (табл. 2). При этом данный набор поставляется с репрезентативным комплектом реагентов, включающим только 30 контрольных аналитов и 30 внутренних стандартов. Это возможно, поскольку некоторые аналиты с одинаковой длиной цепи или другими схожими характеристиками химической структуры также имеют преимущественно схожие характеристики при масс-спектрометрическом измерении. Поэтому аналогичные карнитину аналиты могут быть количественно определены с использованием их ближайшего общего суррогатного внутреннего стандарта и контроля, поставляемых в комплекте. Например, внутренний стандарт C18 может использоваться для определения концентрации ацилкарнитина типов C18, C18:1, C18:2, C18:OH, C18:1OH и C18:2OH. При таком подходе допускается, что результат анализа может быть недостаточно точным, однако его прецизионность не страдает. Кроме этого, в силу вышеуказанного сходства немеченый C18 может использоваться в качестве суррогатного внешнего контроля при анализе всего ряда ацилкарнитинов типа C18. Пока внутренний стандарт и суррогатный внешний контроль, выбранные для количественного анализа определенного вещества, остаются неизменными при анализе взятых у того или иного пациента образцов, имеется возможность различать образцы с предположительно нормальным содержанием и с предположительно повышенным содержанием вещества.

Для измерения C20-C26-ацилкарнитинов с наибольшей длиной цепи и лизофосфатидилхолинов (LPC) аналогичным образом используются молекулы с наибольшей длиной цепи (C26-ацилкарнитин и C26:0-LPC) и их соответствующие меченые изотопом аналоги в качестве суррогатных контролей и внутренних стандартов. Это связано с тем, что различия в длине цепи в этих группах аналитов с наибольшей длиной цепи относительно малы, поэтому их характеристики при масс- спектрометрическом измерении очень схожи. Из-за структурных сходств и схожего масс-спектра фрагментации в масс-спектрометре внутренний стандарт аргинина (2H4,13C-Arg) также используется в качестве общего суррогатного внутреннего стандарта для измерения аргинина (Arg) и аргинин-янтарной кислоты (Asa), даже если предусмотрены специальные контроли для анализа обоих аналитов.

Установленное соответствие между измеряемыми аналитами из набора и соотносящимися с ними контролями и внутренними стандартами приведено в таблице ниже.

Аналиты, измеряемые с помощью набора для недериватизированной тандемной масс-спектрометрии NeoBase 2, и соответствующие им внутренние стандарты и контроли.

АМИНОКИСЛОТЫ		
Аналит	Внутренний стандарт	Контроль
Ala	2H3-Ala	Ala
Arg	2H4,13C-Arg	Arg

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Asa 1	2H4,13C-Arg	Asa
Cit	2H2-Cit	Cit
Gln\Lys	13C5-Gln	Gln
Glu	13C5-Gln	Gln
Gly	15N,2-13C-Gly	Gly
Leu\Ile\Pro-OH	2H3-Leu	Leu
Met	2H3-Met	Met
Orn	2H6-Orn	Orn
Phe	13C6-Phe	Phe
Pro	13C5-Pro	Pro
Tyr	13C6-Tyr	Tyr
Val	15N-13C5-Val	Val
КЕТОНЫ		
Аналит	Внутренний стандарт	Контроль
SA	13C5-MPP 2	SA
НУКЛЕОЗИДЫ		
Аналит	Внутренний стандарт	Контроль
ADO	13C5-ADO	ADO
D-ADO	13C5-dADO	ADO
ЛИЗОФОСФОЛИПИДЫ		
Аналит	Внутренний стандарт	Контроль
C20:0-LPC	2H4-C26:0-LPC	C26:0-LPC
C22:0-LPC	2H4-C26:0-LPC	C26:0-LPC
C24:0-LPC	2H4-C26:0-LPC	C26:0-LPC
C26:0-LPC	2H4-C26:0-LPC	C26:0-LPC
КАРНИТИНЫ		
Аналит	Внутренний стандарт	Контроль
C0	2H9-C0	C0
C2	2H3-C2	C2
C3	2H3-C3	C3
C3DC\C4OH	2H3-C4	C4
C4	2H3-C4	C4
C4DC\C5OH	2H9-C5	C5
C5	2H9-C5	C5
C5:1	2H9-C5	C5
C5DC\C6OH	2H6-C5DC	C5DC
C6	2H3-C6	C6
C6DC	2H6-C5DC	C5DC
C8	2H3-C8	C8
C8:1	2H3-C8	C8
C10	2H3-C10	C10
C10:1	2H3-C10	C10
C10:2	2H3-C10	C10

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

C12	2Hз-C12	C12
C12:1	2Hз-C12	C12
C14	2Hз-C14	C14
C14:1	2Hз-C14	C14
C14:2	2Hз-C14	C14
C14OH	2Hз-C14	C14
C16	2Hз-C16	C16
C16:1	2Hз-C16	C16
C16OH	2Hз-C16	C16
C16:1OH\C17	2Hз-C16	C16
C18	2Hз-C18	C18
C18:1	2Hз-C18	C18
C18:2	2Hз-C18	C18
C18OH	2Hз-C18	C18
C18:1OH	2Hз-C18	C18
C18:2OH	2Hз-C18	C18
C20	2Hз-C26	C26
C22	2Hз-C26	C26
C24	2H3-C26	C26
C26	2Hз-C26	C26

1 Аргинин-янтарная кислота (Asa) определяется как общая концентрация аргинин-янтарной кислоты и ее ангидридов.

2 Меченое стабильными изотопами производное соединение сукцинилацетона (SA) 3-(5-метил-1 Н-пиразол-3-ил) пропановая кислота (MPP).

Нарушения метаболизма аминокислот (АК)

При аминоацидопатиях имеет место отсутствие или сниженная активность ферментов, необходимых для метаболизма определенных аминокислот. В результате чего в организме новорожденного ребенка повышается концентрация аминокислот и альтернативных метаболитов (например, сукцинилацетона) [11,12]. Повышение содержания этих веществ оказывает серьезное негативное воздействие на здоровье младенца и может стать даже причиной его смерти. Ниже приведены некоторые примеры наиболее распространенных аминоацидопатий.

Фенилкетонурия (ФКУ) является нарушением обмена ароматических аминокислот, при котором не происходит превращения фенилаланина (Phe) в тирозин (Tyr). При отсутствии лечения ФКУ обусловливает развитие умственной отсталости различной степени. Гиперфенилаланинемия является причиной развития умственной отсталости и ригидности мышц. Гомоцистинурия приводит к развитию окклюзии сосудов, остеопороза, накоплению гомоцистеина и метионина (Met), а также различных видов отставания в развитии. Болезнь кленового сиропа (валинолейцинурия) вызывается нарушением обмена аминокислот с разветвленными цепями, которое приводит к повышению содержания в крови лейцина (Leu), изолейцина (Ile) и валина (Val). При отсутствии лечения развиваются летаргия (при прогрессировании переходящая в кому), отставание в развитии и конвульсии. Тирозинемия 1-го типа (наследственная тирозинемия) ведет к развитию острой печеночной недостаточности или хронического цирроза и гепатоцеллюлярного рака. Цитруллинемия приводит к развитию конвульсий, анорексии, рвоты и летаргии, вслед за которыми быстро наступает кома с опасностью летального исхода [1-10].

Гипераммонемии, или нарушения цикла мочевины, обусловлены дефицитом одного из ферментов в цикле мочевины. Тяжелые формы гипераммонемии приводят к накоплению аммиака и метаболитов его предшественников в организме и могут потенциально привести к коме, судорогам и возможной смерти. Дефицит орнитинтранскарбамилазы (ДОТК) приводит к снижению уровня цитруллина (Cit) и повышенному уровню глутамина (Gln) и оротовой кислоты в крови. Дефицит аргининосукцинат-лиазы (ДАСЛ), фермента, ответственного за расщепление аргинино-янтарной кислоты (Asa) до аргинина (Arg) и фумаровой кислоты, приводит к повышенному уровню аргинино-янтарной кислоты (Asa) в крови [13-18].

Нарушения окисления жирных кислот (ОЖК)

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Свободный карнитин (C0) и ацилкарнитины являются маркерами нарушений окисления жирных кислот (ОЖК) или органических ацидурий (ОА). При нарушениях ОЖК (например, дефект поглощения карнитина (ДПК) и дефицит среднецепочечной ацил-КоА-дегидрогеназы (ДАДС)) имеет место отсутствие или сниженная активность ферментов, необходимых для расщепления жирных кислот. Расщепление (или окисление) жирных кислот необходимо для выработки энергии в условиях сниженного содержания глюкозы. При отсутствии этого источника энергии у некоторых людей могут отмечаться повторяющиеся эпизоды снижения содержания сахара крови. В случае ограничения приема пищи, часто обусловленного такими болезнями, как инфекции уха или грипп, может развиваться метаболический криз. У лиц, страдающих этим нарушением, может отмечаться рвота, диарея, летаргия, судорожные припадки и кома. Если у ребенка не диагностировано имеющееся нарушение ОЖК, то оно может стать причиной избыточного накопления жиров в печени, сердце и почках. Такое накопление может обусловливать развитие ряда симптомов, таких как печеночная недостаточность, энцефалопатия, осложнения со стороны сердца и глаз, вплоть до нарушения развития мышц общего характера. Многие из этих клинических симптомов могут приводить к летальному исходу [1-10].

Нарушения, сопровождающиеся органическими ацидуриями (ОА)

При органических ацидуриях (ОА) (например, глутаровая ацидемия 1-го типа (ГА1) и изовалериановая ацидемия (ИВА)) нарушаются пути метаболизма органических кислот, и возникающее вследствие этого накопление кислот в крови и моче изменяет кислотно-щелочной баланс в организме. Развивающиеся в итоге этого изменения или приспособительные механизмы в промежуточных путях метаболизма могут обусловливать множество клинических симптомов, в том числе метаболический ацидоз, кетоз, гипераммониемию, плохое прибавление в весе, сепсис и кому [1-10].

Нарушение метаболизма пуринов

Тяжелый комбинированный иммунодефицит аденозиндезаминазы (ТКИД-АДА) является наследственным расстройством метаболизма пуринов. Из-за дефицита фермента аденозиндезаминазы в крови накапливаются аденозин (ADO) и 2'-деоксиаденозин (D-ADO). ТКИД-АДА повреждает иммунную систему, приводит к медленно ухудшающейся иммунной функции и, в крайних случаях, при отсутствии лечения — к летальному исходу [19-21].

Пероксисомальные нарушения

Х-сцепленная адренолейкодистрофия (Х-АЛД) — это прогрессирующее метаболическое заболевание, которое поражает надпочечники и нервную систему. У пациентов с Х-АЛД нарушено в-окисление длинноцепочечных жирных кислот (ОДЦ), что приводит к их накоплению в плазме и тканях. Известно, что накопление длинноцепочечных жирных кислот у пациентов с Х-АЛД приводит к накоплению C26:0-LPC В зависимости от степени накопления Х-АЛД может приводить к различным последствиям: от легкой формы склероза до тяжелого поражения головного мозга [22-27].

Перечень литературы

1. Wilcken, B. et al. (2009): Expanded Newborn Screening: Outcome in Screened and Unscreened Patients at Age 6 Years. Pediatrics 124, e241-e248.
2. McHugh, D.M.S. et al. (2011): Clinical validation of cutoff target ranges in newborn screening of metabolic disorders by tandem mass spectrometry: A worldwide collaborative project. Genet. Med. 13, 230-254.
3. Lund, A.M. et al. (2012): Biochemical screening of 504,049 newborns in Denmark, the Faroe Islands and Greenland - Experience and development of a routine program for expanded newborn screening. Mol. Genet. Metab. 107, 281-293.
4. Nyhan, W.L. et al. (2012): Atlas of Inherited Metabolic Diseases, Third edition, CRC Press.
5. Sun, A. et al. (2012): Expanded Newborn Screening for Inborn Errors of Metabolism. Overview and Outcomes. Adv. Pediatr. 59, 209-245.
6. Wilcken, B. et al. (2012): Chapter 3. Newborn Screening for Inborn Errors of Metabolism. In J.-M. Saudubray et. al (Eds.), Inborn Metabolic Diseases. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. Pp. 75-86.
7. la Marca, G. (2014): Mass spectrometry in clinical chemistry: the case of newborn screening. J. Pharm. Biomed. Anal. 101, 174-182.
8. Therrell, B.L. et al. (2015): Current status of newborn screening worldwide: 2015. Semin.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Perinatol. 39, 171-187.
9. Al-Jasmi, F.A. et al. (2016): Inborn Errors of Metabolism in the United Arab Emirates: Disorders Detected by Newborn Screening (2011-2014). JIMD Reports 28, 127-135.
10. Ombrone, D. et al. (2016). Expanded newborn screening by mass spectrometry: new tests, future perspectives. Mass Spectrom. Rev. 35, 71-84.
11. Giguere, Y. and Berthier, M-T. (2017): Chapter 13. Newborn Screening for Hereditary Tyrosinemia Type I in Quebec: Update. In R.M. Tanguay (ed.), Hereditary Tyrosinemia, Advances in Experimental Medicine and Biology 959, Pp. 139-146.
12. Stinton, C. et al. (2017): Newborn screening for Tyrosinemia type 1 using succinylacetone - a systematic review of test accuracy. Orphanet J. Rare Dis. 12, 4855.
13. Therrell, B.L. et al. (2017): Newborn screening for hyperargininemia due to arginase 1 deficiency. Mol. Genet. Metab. 121, 308-313.
14. Trinh, M.-U. et al. (2003): Quantification of Glutamine in Dried Blood Spots and Plasma by Tandem Mass Spectrometry for the Biochemical Diagnosis and Monitoring of Ornithine Transcarbamylase Deficiency. Clin. Chem. 49 (4), 681-684.
15. Cavicchi, C. et al. (2009): Hypocitrullinemia in expanded newborn screening by LC- MS/MS is not a reliable marker for ornithine transcarbamylase deficiency. J. Pharm. Biomed. Anal. 49, 1292-1295.
16. Batshaw, M.L. et al. (2014): A longitudinal study of urea cycle disorders. Mol. Genet. Metab. 113, 127-130.
17. Rufenacht, V. and Haberle, J. (2015): Mini-Review: Challenges in Newborn Screening for Urea Cycle Disorders. Int. J. Neonatal Screen. 1, 27-35.
18. De Biase, I. et al. (2015): Quantitative amino acid analysis by liquid chromatographytandem mass spectrometry: Implications for the diagnosis of argininosuccinic aciduria. Clin. Chim. Acta 442, 73-74.
19. Azzari, C. et al. (2011): Neonatal screening for severe combined immunodeficiency caused by an adenosine deaminase defect: A reliable and inexpensive method using tandem mass spectrometry. J. Allergy Clin. Immunol. 127 (6), 1394-1399.
20. la Marca, G. et al. (2013): Tandem mass spectrometry, but not T-cell receptor excision circle analysis, identifies newborns with late-onset adenosine deaminase deficiency. J. Allergy Clin. Immunol. 131 (6), 1604-1610.
21. la Marca, G. et al. (2014): The inclusion of ADA-SCID in expanded newborn screening by tandem mass spectrometry. J. Pharm. Biomed. Anal. 88, 201-206.
22. Theda, C. et al. (2014): Newborn screening for X-linked adrenoleukodystrophy: Further evidence high throughput screening is feasible. Mol. Genet. Metab. 111, 55-57.
23. Turgeon, C.T. et al. (2015): Streamlined determination of lysophosphatidylcholines in dried blood spots for newborn screening of X-linked adrenoleukodystrophy. Mol. Genet. Metab. 114, 46-50.
24. Vogel, B.H. et al. (2015): Newborn screening for X-linked adrenoleukodystrophy in New York State: Diagnostic protocol, surveillance protocol and treatment guidelines. Mol. Genet. Metab. 114, 599-603
25. Haynes, C.A. and De Jesus, V.R. (2015): Simultaneous quantitation of hexacosanoyl lysophosphatidylcholine, amino acids, acylcarnitines, and succinylacetone during FIA- ESI-MS/MS analysis of dried blood spot extracts for newborn screening. Clin Biochem. 49, 161-165.
26. Moser, A.B. et al. (2016): Newborn Screening for X-Linked Adrenoleukodystrophy. Int. J. Neonatal Screen. 2:15.
27. Kemper, A.R. et al. (2017): Newborn screening for X-linked adrenoleukodystrophy: evidence summary and advisory committee recommendation. Genet. Med. 19 (1), 121126.
28. CLSI, 2013. Blood Collection on Filter Paper for Newborn Screening Programs; Approved Standard - Sixth Edition; CLSI Document NBS01-A6. Wayne, PA: Clinical and Laboratory Standards Institute.
29. Strnadova, K.A. et al. (2007): Long-Term Stability of Amino Acids and Acylcarnitines in Dried Blood Spots. Clin. Chem. 53, 717-722.
30. Adam, B.W. et al. (2011): The stability of markers in dried-blood spots for recommended newborn screening disorders in the United States. Clin. Biochem. 44, 1445-1450.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

31. CLSI (2017): Newborn Screening by Tandem Mass Spectrometry; Approved Guideline, 2nd edition; CLSI Document NBS04. Wayne, PA: Clinical and Laboratory Standards Institute.
32. Winter, T. et al. (2017): Contamination of dried blood spots - an underestimated risk in newborn screening. Clin. Chem. Lab. Med. 56, 278-284.
33. Hall, E.M. et al. (2015): Influence of Hematocrit and Total-Spot Volume on Performance Characteristics of Dried Blood Spots for Newborn Screening. Int. J. Neonatal Screen. 1, 69-78.
34. Cavedon, C.T. et al. (2005): Age-Related Variations in Acylcarnitine and Free Carnitine Concentrations Measured by Tandem Mass Spectrometry. Clin. Chem. 51, 745-752.
35. Clark, R.H. et al. (2014): Gestational Age and Age at Sampling Influence Metabolic Profiles in Premature Infants. Pediatrics 134, e37-e46.
36. Gucciardi, A. et al. (2015): Analysis and interpretation of acylcarnitine profiles in dried blood spot and plasma of preterm and full-term newborns. Pediatr. Res. 77 (1), 36-47.
37. CLSI (2014): User Verification of Precision and Estimation of Bias; Approved Guideline - Third Edition; CLSI Document EP15-A3. Wayne, PA: Clinical and Laboratory Standards Institute.
38. CLSI (2014): Evaluation of Precision of Quantitative Measurement Procedures; Approved Guideline - Third Edition; CLSI Document EP05-A3. Wayne, PA: Clinical and Laboratory Standards Institute.
39. CLSI (2003): Evaluation of the Linearity of Quantitative Measurement Procedures: A Statistical Approach; Approved Guideline. CLSI Document EP06-A. Wayne, PA: Clinical and Laboratory Standards Institute.
40. CLSI (2005): Interference Testing in Clinical Chemistry; Approved Guideline - Second Edition. CLSI Document EP07-A2. Wayne, PA: Clinical and Laboratory Standards Institute.
41. Soldin, S. J. et al. (2011). Pediatric Reference Intervals, 7th edition, AACC Press, Washington DC, USA.
42. Lee, S-Y. et al. (2006): A Report of Two Families with Sarcosinaemia in Hong Kong and Revisiting the Pathogenetic Potential of Hypersarcosinaemia. Ann. Acad. Med. Singapore 35, 582-584.
43. Carducci, C. et al. (2006): Quantitative determination of guanidinoacetate and creatine in dried blood spot by flow injection analysis-electrospray tandem mass spectrometry. Clin. Chim. Acta 364, 180-187.
44. Pauli-Magnus, C. et al. (2000): Characterization of the Major Metabolites of Verapamil as Substrates and Inhibitors of P-glycoprotein. J. Pharmacol. Exp. Ther. 293, 376-382.
45. Houten, S.M. et al. (2013): Genetic basis of hyperlysinemia. Orphanet J. Rare Dis. 8:57.
46. Williams, J.P. et al. (2015): Waters application note. Gas-Phase Separation of Benzocaine Protonation Site Isomers and Phenylalanine Using Travelling-Wave Ion Mobility MS.
47. Abdenur, J.E. et al. (1998): Diagnosis of isovaleric acidaemia by tandem mass spectrometry: False positive result due to pivaloylcarnitine in a newborn screening programme. J. Inher. Metab. Dis. 21, 624-630.
48. Yamada, K. et al. (2015): Elevation of pivaloylcarnitine by sivelestat sodium in two children. Mol. Genet. Metab. 116, 192-194.
49. Boemer, F. et al. (2014): Surprising causes of C5-carnitine false positive results in newborn screening. Mol. Genet. Metab. 111, 52-54.
50. Minkler, P.E. et al. (2017): Correcting false positive medium-chain acyl-CoA dehydrogenase deficiency results from newborn screening; synthesis, purification, and standardization of branched-chain C8 acylcarnitines for use in their selective and accurate absolute quantitation by UHPLC-MS/MS. Mol. Genet. Metab. 120, 363-369.
51. Malvagia, S. et al. (2015): Heptadecanoylcarnitine (C17) a novel candidate biomarker for newborn screening of propionic and methylmalonic acidemias. Clin. Chim. Acta 450, 342-348.
52. Armangue, T. et al. (2017): Neonatal detection of Aicardi Goutieres Syndrome by increased C26:0 lysophosphatidylcholine and interferon signature on newborn screening blood spots. Mol. Genet. Metab 122, 134-139.
53. Kratz, L.E. and Albert, J.S. (2016): 2-Ethylhexanoic acid, found in common plasticizers, leads to an artificial increase in C8 acylcarnitine levels in two neonates treated with extracorporeal membrane oxygenation (ECMO). Clin. Chim. Acta 461, 59-60.
54. CLSI (2013): Measurement Procedure Comparison and Bias Estimation Using Patient Samples;

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Approved Guideline - Third Edition; CLSI Document EP09-A3. Wayne, PA: Clinical and Laboratory Standards Institute.
55. Sweetman, L. et al. (2006): Naming and counting disorders (conditions) included in newborn screening panels. Pediatrics 117, S308-S314.
56. ACMG ACT Sheets and Confirmatory Algorithms [Internet]. Bethesda (MD): American College of Medical Genetics; 2001-. Newborn Screening ACT Sheets and Confirmatory Algorithms. Available from: https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK55827/

Вид аналита: Определение соединений в клинических образцах – количественное.

Функциональное назначение: Скрининг новорожденных на предмет выявления нарушений обмена веществ.

Специфическая патология, состояние или фактор риска, для обнаружения, определения или дифференцирования которого предназначено медицинское изделие:
Отклонение от нормы уровней содержания в крови какого-либо из аналитов, измеряемых с помощью набора для недериватизированной тандемной масс-спектрометрии NeoBase 2, может свидетельствовать о наличии врожденного нарушения обмена веществ (генетически обусловленного дефекта метаболизма) [1-27]. Например, свободный карнитин (C0) и ацилкарнитины являются лабораторными индикаторами (маркерами) нарушений окисления жирных кислот (ОЖК) или органических ацидурий (ОА); аминокислоты являются маркерами аминоацидопатий или гипераммониемии; сукцинилацетон (SA) является первичным маркером аминоацидопатии, известной под названием «тирозинемия 1-го типа»; нуклеозиды аденозин (ADO) и 2'-деоксиаденозин (D-ADO) являются маркерами нарушения метаболизма пуринов, тяжелого комбинированного иммунодефицита аденозиндезаминазы; а C26:0 лизофосфатидилхолин (C26:0-LPC) является маркером Х-сцепленной адренолейкодистрофии.
Набор для недериватизированной тандемной масс-спектрометрии NeoBase 2 позволяет измерять 57 различных аналитов (т. е. 14 аминокислот, 36 карнитинов, 2 нуклеозида, сукцинилацетон и 4 лизофосфатидилхолина) за один анализ (табл. 2). При этом данный набор поставляется с репрезентативным комплектом реагентов, включающим только 30 контрольных аналитов и 30 внутренних стандартов. Это возможно, поскольку некоторые аналиты с одинаковой длиной цепи или другими схожими характеристиками химической структуры также имеют преимущественно схожие характеристики при масс-спектрометрическом измерении. Поэтому аналогичные карнитину аналиты могут быть количественно определены с использованием их ближайшего общего суррогатного внутреннего стандарта и контроля, поставляемых в комплекте. Например, внутренний стандарт C18 может использоваться для определения концентрации ацилкарнитина типов C18, C18:1, C18:2, C18:OH, C18:1OH и C18:2OH. При таком подходе допускается, что результат анализа может быть недостаточно точным, однако его прецизионность не страдает. Кроме этого, в силу вышеуказанного сходства немеченый C18 может использоваться в качестве суррогатного внешнего контроля при анализе всего ряда ацилкарнитинов типа C18. Пока внутренний стандарт и суррогатный внешний контроль, выбранные для количественного анализа определенного вещества, остаются неизменными при анализе взятых у того или иного пациента образцов, имеется возможность различать образцы с предположительно нормальным содержанием и с предположительно повышенным содержанием вещества.
Для измерения C20-C26-ацилкарнитинов с наибольшей длиной цепи и лизофосфатидилхолинов (LPC) аналогичным образом используются молекулы с наибольшей длиной цепи (C26-ацилкарнитин и C26:0-LPC) и их соответствующие меченые изотопом аналоги в качестве суррогатных контролей и внутренних стандартов. Это связано с тем, что различия в длине цепи в этих группах аналитов с наибольшей длиной цепи относительно малы, поэтому их характеристики при масс- спектрометрическом измерении очень схожи. Из-за структурных сходств и схожего масс-спектра фрагментации в масс-спектрометре внутренний стандарт аргинина (2H4,13C-Arg) также используется в качестве общего суррогатного внутреннего стандарта для измерения аргинина (Arg) и аргинин-янтарной кислоты (Asa), даже если предусмотрены специальные контроли для анализа обоих аналитов.
Установленное соответствие между измеряемыми аналитами из набора и соотносящимися с ними контролями и внутренними стандартами приведено в таблице ниже.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Аналиты, измеряемые с помощью набора для недериватизированной тандемной масс-спектрометрии NeoBase 2, и соответствующие им внутренние стандарты и контроли.

АМИНОКИСЛОТЫ		
Аналит	Внутренний стандарт	Контроль
Ala	2H3-Ala	Ala
Arg	2H4,13C-Arg	Arg
Asa 1	2H4,13C-Arg	Asa
Cit	2H2-Cit	Cit
Gln\Lys	13C5-Gln	Gln
Glu	13C5-Gln	Gln
Gly	15N,2-13C-Gly	Gly
Leu\Ile\Pro-OH	2H3-Leu	Leu
Met	2H3-Met	Met
Orn	2H6-Orn	Orn
Phe	13C6-Phe	Phe
Pro	13C5-Pro	Pro
Tyr	13C6-Tyr	Tyr
Val	15N-13C5-Val	Val
КЕТОНЫ		
Аналит	Внутренний стандарт	Контроль
SA	13C5-MPP 2	SA
НУКЛЕОЗИДЫ		
Аналит	Внутренний стандарт	Контроль
ADO	13C5-ADO	ADO
D-ADO	13C5-dADO	ADO
ЛИЗОФОСФОЛИПИДЫ		
Аналит	Внутренний стандарт	Контроль
C20:0-LPC	2H4-C26:0-LPC	C26:0-LPC
C22:0-LPC	2H4-C26:0-LPC	C26:0-LPC
C24:0-LPC	2H4-C26:0-LPC	C26:0-LPC
C26:0-LPC	2H4-C26:0-LPC	C26:0-LPC
КАРНИТИНЫ		
Аналит	Внутренний стандарт	Контроль
C0	2H9-C0	C0
C2	2H3-C2	C2
C3	2Hз-C3	C3
C3DC\C4OH	2Hз-C4	C4
C4	2Hз-C4	C4
C4DC\C5OH	2H9-C5	C5
C5	2H9-C5	C5
C5:1	2H9-C5	C5

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

C5DC\C6OH	2H6-C5DC	C5DC
C6	2H3-C6	C6
C6DC	2H6-C5DC	C5DC
C8	2H3-C8	C8
C8:1	2H3-C8	C8
C10	2H3-C10	C10
C10:1	2H3-C10	C10
C10:2	2H3-C10	C10
C12	2H3-C12	C12
C12:1	2H3-C12	C12
C14	2H3-C14	C14
C14:1	2H3-C14	C14
C14:2	2H3-C14	C14
C14OH	2H3-C14	C14
C16	2H3-C16	C16
C16:1	2H3-C16	C16
C16OH	2H3-C16	C16
C16:1OH\C17	2H3-C16	C16
C18	2H3-C18	C18
C18:1	2H3-C18	C18
C18:2	2H3-C18	C18
C18OH	2H3-C18	C18
C18:1OH	2H3-C18	C18
C18:2OH	2H3-C18	C18
C20	2H3-C26	C26
C22	2H3-C26	C26
C24	2H3-C26	C26
C26	2H3-C26	C26

1 Аргинин-янтарная кислота (Asa) определяется как общая концентрация аргинин-янтарной кислоты и ее ангидридов.

2 Меченое стабильными изотопами производное соединение сукцинилацетона (SA) 3-(5-метил-1 Н-пиразол-3-ил) пропановая кислота (MPP).

Нарушения метаболизма аминокислот (АК)

При аминоацидопатиях имеет место отсутствие или сниженная активность ферментов, необходимых для метаболизма определенных аминокислот. В результате чего в организме новорожденного ребенка повышается концентрация аминокислот и альтернативных метаболитов (например, сукцинилацетона) [11,12]. Повышение содержания этих веществ оказывает серьезное негативное воздействие на здоровье младенца и может стать даже причиной его смерти. Ниже приведены некоторые примеры наиболее распространенных аминоацидопатий.

Фенилкетонурия (ФКУ) является нарушением обмена ароматических аминокислот, при котором не происходит превращения фенилаланина (Phe) в тирозин (Tyr). При отсутствии лечения ФКУ обусловливает развитие умственной отсталости различной степени. Гиперфенилаланинемия является причиной развития умственной отсталости и ригидности мышц. Гомоцистинурия приводит к развитию окклюзии сосудов, остеопороза, накоплению гомоцистеина и метионина (Met), а также различных видов отставания в развитии. Болезнь кленового сиропа (валинолейцинурия) вызывается нарушением обмена аминокислот с разветвленными цепями, которое приводит к повышению содержания в крови лейцина (Leu), изолейцина (Ile) и валина (Val). При отсутствии лечения развиваются летаргия (при прогрессировании переходящая в кому), отставание в развитии и конвульсии. Тирозинемия 1-го типа (наследственная тирозинемия) ведет к развитию острой печеночной недостаточности или хронического цирроза и гепатоцеллюлярного рака. Цитруллинемия приводит к развитию конвульсий, анорексии, рвоты и летаргии, вслед за которыми быстро наступает кома с опасностью летального исхода [1-10].

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Гипераммонемии, или нарушения цикла мочевины, обусловлены дефицитом одного из ферментов в цикле мочевины. Тяжелые формы гипераммонемии приводят к накоплению аммиака и метаболитов его предшественников в организме и могут потенциально привести к коме, судорогам и возможной смерти. Дефицит орнитинтранскарбамилазы (ДОТК) приводит к снижению уровня цитруллина (Cit) и повышенному уровню глутамина (Gln) и оротовой кислоты в крови. Дефицит аргининосукцинат-лиазы (ДАСЛ), фермента, ответственного за расщепление аргинино-янтарной кислоты (Asa) до аргинина (Arg) и фумаровой кислоты, приводит к повышенному уровню аргинино-янтарной кислоты (Asa) в крови [13-18].

Нарушения окисления жирных кислот (ОЖК)

Свободный карнитин (C0) и ацилкарнитины являются маркерами нарушений окисления жирных кислот (ОЖК) или органических ацидурий (ОА). При нарушениях ОЖК (например, дефект поглощения карнитина (ДПК) и дефицит среднецепочечной ацил-КоА-дегидрогеназы (ДАДС)) имеет место отсутствие или сниженная активность ферментов, необходимых для расщепления жирных кислот. Расщепление (или окисление) жирных кислот необходимо для выработки энергии в условиях сниженного содержания глюкозы. При отсутствии этого источника энергии у некоторых людей могут отмечаться повторяющиеся эпизоды снижения содержания сахара крови. В случае ограничения приема пищи, часто обусловленного такими болезнями, как инфекции уха или грипп, может развиваться метаболический криз. У лиц, страдающих этим нарушением, может отмечаться рвота, диарея, летаргия, судорожные припадки и кома. Если у ребенка не диагностировано имеющееся нарушение ОЖК, то оно может стать причиной избыточного накопления жиров в печени, сердце и почках. Такое накопление может обусловливать развитие ряда симптомов, таких как печеночная недостаточность, энцефалопатия, осложнения со стороны сердца и глаз, вплоть до нарушения развития мышц общего характера. Многие из этих клинических симптомов могут приводить к летальному исходу [1-10].

Нарушения, сопровождающиеся органическими ацидуриями (ОА)

При органических ацидуриях (ОА) (например, глутаровая ацидемия 1-го типа (ГА1) и изовалериановая ацидемия (ИВА)) нарушаются пути метаболизма органических кислот, и возникающее вследствие этого накопление кислот в крови и моче изменяет кислотно-щелочной баланс в организме. Развивающиеся в итоге этого изменения или приспособительные механизмы в промежуточных путях метаболизма могут обусловливать множество клинических симптомов, в том числе метаболический ацидоз, кетоз, гипераммониемию, плохое прибавление в весе, сепсис и кому [1-10].

Нарушение метаболизма пуринов

Тяжелый комбинированный иммунодефицит аденозиндезаминазы (ТКИД-АДА) является наследственным расстройством метаболизма пуринов. Из-за дефицита фермента аденозиндезаминазы в крови накапливаются аденозин (ADO) и 2'-деоксиаденозин (D-ADO). ТКИД-АДА повреждает иммунную систему, приводит к медленно ухудшающейся иммунной функции и, в крайних случаях, при отсутствии лечения — к летальному исходу [19-21].

Пероксисомальные нарушения

Х-сцепленная адренолейкодистрофия (Х-АЛД) — это прогрессирующее метаболическое заболевание, которое поражает надпочечники и нервную систему. У пациентов с Х-АЛД нарушено в-окисление длинноцепочечных жирных кислот (ОДЦ), что приводит к их накоплению в плазме и тканях. Известно, что накопление длинноцепочечных жирных кислот у пациентов с Х-АЛД приводит к накоплению C26:0-LPC В зависимости от степени накопления Х-АЛД может приводить к различным последствиям: от легкой формы склероза до тяжелого поражения головного мозга [22-27].

Тип анализируемого образца:

Образцы цельной капиллярной крови, взятые у новорожденных путем пункции пяточной области и высушенные на фильтрованной бумаге (DBS-dried blood spots).

Популяционные, демографические аспекты применения медицинского изделия:

Данное медицинское изделие используется для диагностики in vitro, для диагностики новорожденных на предмет выявления нарушений обмена веществ.

Проводят анализ лица старше 18 лет, со средним профессиональным и высшим медицинским и биологическим образованием.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

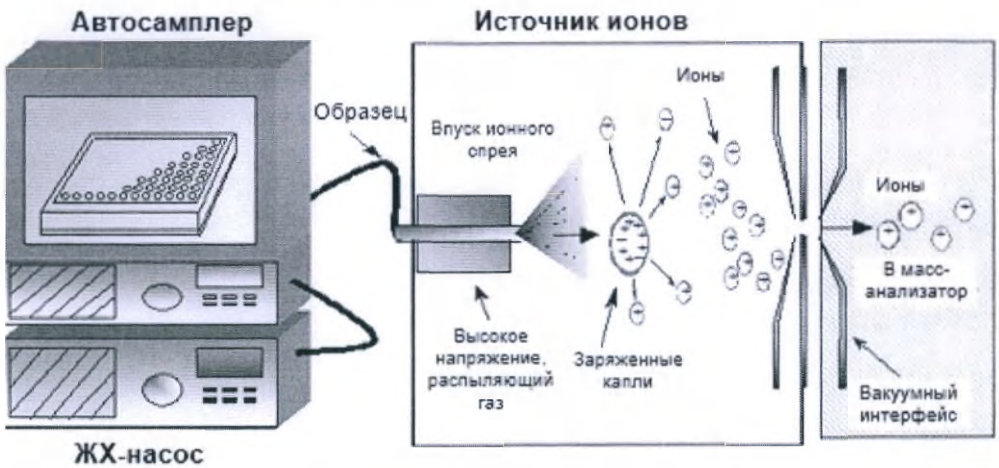
Описание принципа работы изделия

Измерение содержания соединений в образцах человеческого происхождения, в том числе матриц сыворотки, крови и сухой капли крови, включает в себя методы экстрагирования, разработанные и проверенные лабораторным персоналом. При использовании внутренних стандартов помеченных устойчивых изотопов и системы тандемной масс-спектрометрии (ТМС), ответная реакция каждого исследуемого вещества в образце связана с их соответствующим внутренним стандартом помеченных устойчивых изотопов и, таким образом, пропорциональна концентрации исследуемого вещества.

Извлеченный образец прогоняется на масс-спектрометре QSight 225 MD (QSight 225 MD Mass spectrometer), трехквадрупольном спектрометре, для осуществления необходимых измерений (как с использованием ЖХ, так и без). В этой конфигурации, данные получают в режиме мониторинга множественных реакций (ММР). Во время получения этих данных, продукт столкновения каждого анализируемого вещества измеряется за установленный отрезок времени. Получение и обработка данных осуществляется при помощи пакета Программного обеспечения QSight Simplicity 3Q MD, версия 2.0, который включает полное получение данных, количественный подсчет, обработку, а также возможности составления отчетов.

Масс-спектрометр QSight 225 MD (QSight 225 MD Mass spectrometer) - это управляемое компьютером устройство, осуществляющее разделение и количественный подсчет ионов на основании их отношения массы с заряду (*масса/заряд*). Каждый квадруполь состоит из 4 горизонтальных металлических стержней. Первый и третий стержни - это масс фильтры, а второй - ячейка соударения, где родительский ион разделяется на дочерние ионы. Электромагнитное поле вокруг стержней вырабатывается и управляется путем изменения применяемого потенциала радиочастоты (РЧ), позволяя отфильтровывать ионы на основании их отношения массы к заряду. Извлеченный образец доставляется в источник ионов масс-спектрометра при помощи системы жидкостной хроматографии (ЖХ), состоящей из автосамплера, бинарного насоса и вакуумного дегазатора со средой для растворения. Источник ионов создает мелкораспыленную струю заряженных капель, из которой по мере испарения растворителя выпускаются ионы. Эти ионы отправляются в масс-анализатор для определения. Масс-спектрометр разработан для прочности и высокого соотношения сигнала к шуму.

Доставка образца



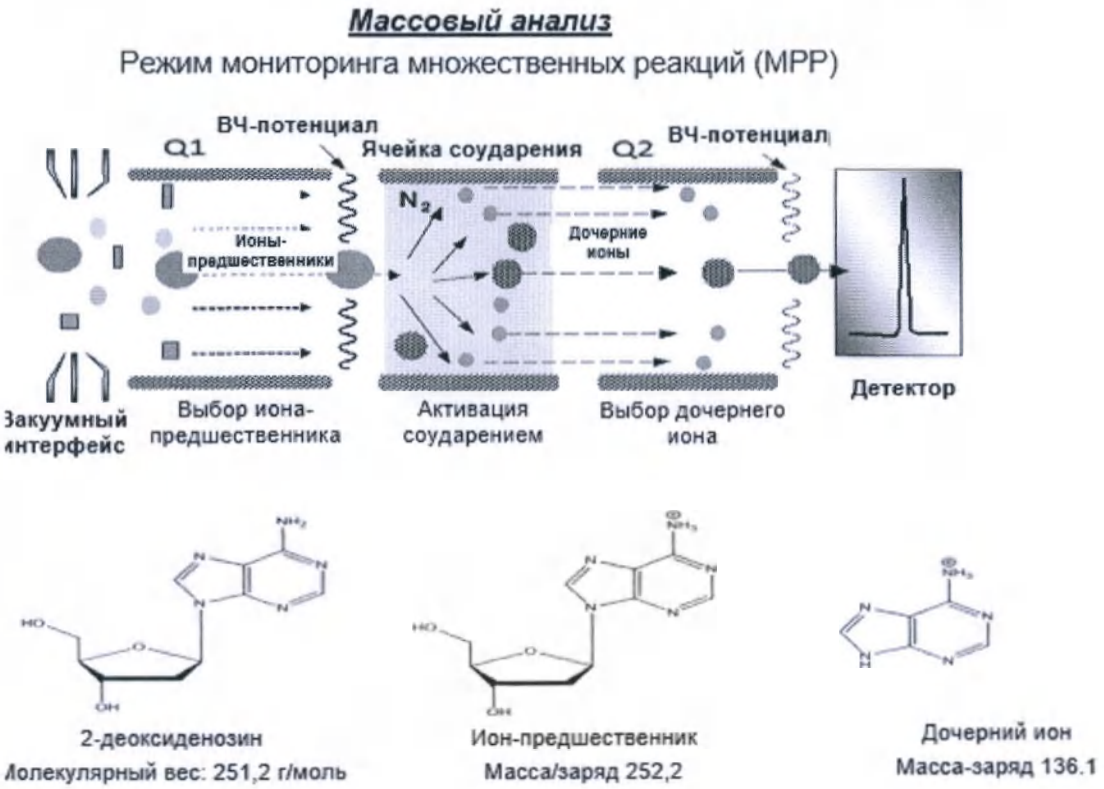
В системе QSight 225 MD ионы проходят через вакуумный интерфейс. Данный интерфейс исключает незаряженные материалы и помогает при удалении молекул растворителя из ионов. Ионы переносятся через интерфейс в часть контрольно-измерительного прибора для массовой фильтрации и анализа. Незаряженные молекулы откачиваются вакуумной системой, а затем сфокусированный ионный пучок вводится в первый квадруполь массовой фильтрации, Q1. В области Q1 ионы распределяются по своим значениям *массы/заряда* и перемещаются в ячейку соударений (немассовое фильтрующее устройство). В ячейке соударений применяется небольшое давление газа; ионы, проходящие через ячейку соударений, сталкиваются с молекулами газа и разделяются на более мелкие ионы. Данный процесс называется диссоциацией, активированной

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

столкновениями (ДАС) Затем дочерние ионы вводятся в масс-анализатор второй ступени (Q2), где они разделяются по своим значениям *масса/заряд* и, наконец, отправляются в детектор для регистрации сигналов.

В режиме ММР Q1 настроен на выбор конкретного родительского иона. После выбора Q1 родительский ион отправляется в реакционную ячейку, где происходит ДАС. После фрагментации родительского иона только указанный дочерний ион сможет пройти через Q2 и попасть на детектор. Все неуказанные дочерние ионы отфильтровываются. В спектре ММР тандемной масс-спектрометрии указывается значение *масса/заряд* родительских ионов, составляющих требуемый продукт.

Химические структуры 2'-дезоксиаденозина, его родительских и дочерних ионов в режиме положительной ионизации показаны на рисунке в качестве примера диссоциации, активированной столкновениями и мониторинга множественных реакций.



Показания к применению

«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии» предназначена для качественной идентификации и количественного определения соединений в клинических образцах путем разделения образца на простые аналиты с помощью УВЭЖХ, с последующей ионизацией соединений в электроспрее и разделения полученных ионов с помощью электрического поля в соответствии с их массой. Система пригодна для применения в клинических условиях и должна эксплуатироваться квалифицированным лабораторным персоналом. Устройство работает от сети (на переменном токе), при минимальном участии техника, некоторые этапы анализа автоматизированы.

Противопоказания

Противопоказаний к применению медицинского изделия для диагностики in vitro не выявлено.

Возможные побочные эффекты при использовании медицинского изделия

Побочных эффектов при использовании медицинского изделия для диагностики in vitro не выявлено.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Требования к оператору (пользователю)

«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» создана исключительно для профессионального применения. Медицинское изделие должны использовать только квалифицированные, обученные (в области клинической лабораторной диагностики) сотрудники.

Описание или полный список различных конфигураций/исполнений медицинского изделия для диагностики in vitro

«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» существует в единственном варианте исполнения.

Состав медицинского изделия и комплектация

«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии» в составе:

Состав:

1. Масс-спектрометр QSight 225 MD (QSight 225 MD Mass spectrometer) - 1 шт.;
2. Автосемплер для УВЭЖХ QSight MD (QSight MD UHPLC Autosampler) - 1 шт.;
3. Насос для УВЭЖХ QSight 225 MD (QSight MD UHPLC Pump) - 1 шт.;
4. Колоночный термостат QSight MD (QSight Column Oven MD) - 1 шт.;
5. Программное обеспечение QSight Simplicity 3Q MD - 1 шт.;
6. Руководство пользователя – 1 шт.
7. Модуль для запуска Масс-спектрометра QSight 225 MD (QSight 225 MD Spares kit) - 1 шт. в составе:
   - 7.1. Набор желтых виал объемом 1,5 мл, скрепленных с крышкой, септированных (KIT-1.5 mL VIAL AMBER W/BONDED CAP/SEPTA) - 1 шт.;
   - 7.2. Хроматографическая обращеннофазная C18 колонка Brownlee, размер частиц 2,7 мкм, размер колонки 2,1x50 мм. (COL Brownlee SPP 2.7 UM C18 2.1 X 50MM) - 1 шт.;
   - 7.3. Предколонка обращеннофазная C18, размер частиц 2,7 мкм, размер колонки 2,1x5 мм (GUARD-SPP 2.7UM C18 2.1 X 5MM(PK3)) - 1 шт.;
   - 7.4. Держатель для предколонки Brownlee (HOLDER-SSP BROWNLEE GUARD) - 1 шт.;
8. Би-роторный лопастной насос SV 40 (SV40 BI Rotary Vane Pump) - 1 шт.;
9. Стандартный инфузионный шприцевой насос 11 ELITE (STD- INFUSION PUMP 11 ELITE SYRINGE) - 1 шт.;
10. Комплект для жидкостной хроматографии/инфузии (LC/Infusion Accessories Kit) - 1 шт., в составе:
    - 10.1. Шприц, объемом 1 мл с фиксированным наконечником, Hamilton (Syringe, 1 mL Fixed Tip, Hamilton) - 3 шт.;
    - 10.2. Капилляр, наружный диаметр 1/16 дюйма, внутренний диаметр 0,005 дюйма, ПЭЭК, красный (Tubing, 1/16 OD x 0.005 ID, PEEK Red), 300 см - 1 шт.;
    - 10.3. Капилляр, наружный диаметр 1/16 дюйма, внутренний диаметр 0,03 дюйма, ПТФЭ (Tubing, 1/16 IN OD x 0.030IN ID, PTFE), 10 см - 1 шт.;
    - 10.4. Соединение нулевого «остаточного» объема с двумя штуцерами F300, ПЭЭК, 0,02 дюйма (PEEK ZDV Union .020IN with 2 F300 fitting) - 3 шт.;
    - 10.5. Затягиваемое вручную фитинговое соединение (фитинги), для жидкостной хроматографии ПЭЭК (Fitting, PEEK Fingertight, LC) 10 шт.;
    - 10.6. Инструмент, резак для капилляров с 5 лезвиями (Tool, Tubing Cutterwith 5 blades) - 1 шт.;
    - 10.7. Сквозные тройниковые коннекторы для жидкостной хроматографии, ПЭЭК, 0,02 дюйма (LC Tee, PEEK 0.020 Thru-hole) - 2 шт.;

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

10.8. Металлические иглы (капилляры) для ионизации распылением в электрическом поле, в упаковке (Assy, ESI Needle- Metal Ferrule Set) - 2 шт.;

10.9. Игла источника электроспрей ионизации (ESI Source Needle) - 10 шт.;

11. PAL3-устройство для разрезания фольги (PAL3-Foil Cutter) - 1 шт.;
12. Крепежная подставка для УВЭЖХ QSight автосемплера (Tray Table for QSight UHPLC Autosampler) - 1 шт.;
13. Персональный компьютер Dell, модель D11S001 - 1 шт.;
14. Монитор Dell, модель U2419H - 1 шт.;
15. Набор в зависимости от региона - Европа (Region Dependent Kit-EU) - 1 шт., в составе:

15.1. SX Блоуер, 220 Вольт переменного напряжения (выхлопной насос) (SX Blower, 220VAC (Exhaust pump) - 1 шт.;

15.2. Сетевой кабель-3С 1.OMM сеч 2,5мм 250В 10А (Linecord-3C 1.OMM sQ 2,5M 250V 10A) - 1 шт.;

15.3. Силовой кабель, инструмент основной (Power cable Instrument main) - 1 шт.;

16. Лоток для бутылей с растворителем - 1 шт.

Описание принадлежностей, других изделий, в том числе медицинских, которые предполагается использовать в сочетании с медицинским изделием для диагностики in vitro

Для системы требуются нижеуказанные изделия, которые можно приобрести в Wallac Oy или PerkinElmer, Inc., а также у уполномоченного представителя:

1. «Набор для недериватизированной тандемной масс-спектрометрии NeoBase 2 (NeoBase 2 Non-derivatized MSMS kit)»;
2. «Аналитические растворы без дериватизации NeoBase 2 (NeoBase 2 Non-derivatized Assay Solutions)»;
3. «Раствор для определения наличия сукцинилацетона NeoBase 2 (NeoBase 2 Succinylacetone Assay Solution)»;
4. Панчер для выбивания из фильтровальной бумаги дисков диаметром 3.2 мм (1/8 дюйма) [например, Прибор для выбивания бумажных дисков с образцами крови (Wallac DBS Puncher) с головками диаметром 3,2 мм, 4,7 мм, 6 мм (кат. № 1296-071), РУ № ФСЗ 2010/06208 от 05.02.2010, Устройство для выбивания образцов крови «Panthera-Puncher 9» с принадлежностями (кат. № 2081-0010), РУ № РЗН 2014/1839 от 01.08.2014];
5. Инкубатор - шейкер "ТриНест" для лабораторной диагностики in vitro (TriNEST Incubator Shaker) (кат. № 1296-0050), РУ №ФСЗ 2010/07445 от 20.07.2010 или эквивалент, зарегистрированный в установленном порядке в Российской Федерации;
6. Растворитель FlowSolvent (ацетонитрил/вода (84/16 v/v %), процесс приготовления описан ниже)

Кроме того, необходимы:

- Дозатор (30-300 мкл;
- Наконечники для дозаторов;
- Пипетки или мерные цилиндры для измерения миллилитровых объемов жидкостей и реагентов;
- Смеситель для восстановления внутренних стандартов NeoBase 2 (например, лабораторная качалка или встряхиватель);
- Ультразвуковая баня с подогревом;
- Ёмкости для реагентов;
- Химический вытяжной шкаф;
- Тест-бланки из фильтровальной бумаги, соответствующие применимым местным нормам;
- Ацетонитрил для ЖХ-МС;
- Метанол для ЖХ-МС;
- Реагентная вода для клинических лабораторий (РВКЛ, согласно стандартам Института

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

клинических и лабораторных стандартов (CLSI)) или аналогичная деионизированная вода;

- Влагопоглощающие пакеты, содержащие приблизительно 2 г силикагеля.

Способ применения медицинского изделия: порядок эксплуатации.

Полная информация по порядку эксплуатации указана в Руководстве пользователя Системы.

Общая информация при обращении, установке и эксплуатации

Все работы по распаковке, установке, настройке и запуске оборудования в эксплуатацию проводит сервисный инженер уполномоченного представителя АО «Приборы».

ПОРЯДОК РАБОТЫ

Рабочий процесс

Перед началом работы

Примечание. Пользователь должен вести собственный журнал обслуживания системного уровня в соответствии с потребностями в обслуживании. Приведенные ниже процедуры являются рекомендуемыми нормами для лабораторий.

Насос	
Проверка на наличие утечек или воздушных пузырьков	1. Пока насос работает, откройте переднюю крышку корпуса насоса и проверьте соединения насоса и шланги на наличие признаков утечки. Проверьте утечки с помощью безворсовой легко смачиваемой салфетки. 2. Проверьте наличие воздушных пузырьков в линиях. Если визуально определяются воздушные пузырьки, промойте насос. • Нажмите правой кнопкой мыши по цветовому индикатору насоса и выберите **Direct Control** (Непосредственное управление). • В секции **Wash** (Промывка) нажмите **Purge** (Промывка).
Проверьте объем мобильной фазы и при необходимости увеличьте.	1. Убедитесь, что количества растворителя хватит на все планируемое время тестирования. 2. Если растворителя недостаточно, долейте его или замените бутыль с растворителем. 3. После замены или пополнения бутыли с растворителем подготовьте и промойте насос, как описано выше.
Автосемплер	
Проверка общего износа	1. Проверьте шланги и шприц на наличие трещин или утечек. 2. Проверьте соединения на наличие признаков утечек. 3. Убедитесь, что все сливные линии не заблокированы и не пережаты.
Проверка/пополнение объема промывочного растворителя	1. Убедитесь, что количество промывочного растворителя (линии А и В) является достаточным для всех запланированных анализов. 2. Убедитесь, что контейнер для отходов промывки имеет достаточный объем для всех запланированных анализов; в противном случае опорожните контейнер.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Подготовка инструмента ЖХ	1. Выберите **LCP1** на ручном блоке управления. 2. Нажмите **Options** (Параметры) (кнопка A). 3. Нажмите **Prime LC Tool** (Подготовка инструмента ЖХ). 4. Выберите Run (Запустить) (кнопка B). 5. Подождите. Выполните описанную процедуру для обоих источников промывки (растворителей 1 и 2). 6. Убедитесь в том, что в шприце не осталось пузырьков воздуха. Если пузырьки остались, повторите подготовку.
Масс-спектрометр	
Проверка шланга из ПЭЭК на наличие утечек, трещин, пузырьков	1. Осмотрите соединения и шланги на наличие признаков утечки. Проверьте утечки с помощью безворсовой легко смачиваемой салфетки. 2. При обнаружении утечки или трещины в шланге из ПЭЭК замените его новым и подсоедините его.
Запишите выходное давление генератора азота	• Проверьте показания давления для воздуха и азота на выходе генератора газов.
Колоночный термостат	
Проверка шланга на наличие утечек, трещин, пузырьков	1. Осмотрите соединения и шланги на наличие признаков утечки. Проверьте утечки с помощью безворсовой легко смачиваемой салфетки. 2. При обнаружении утечки или трещины в шланге из ПЭЭК замените его новым и подсоедините его.

Примечание. Пользователь также должен отслеживать и записывать в журнал изменение базового давления в системе с течением времени. Указанный параметр зависит от выполняемого анализа/приложения, расхода, мобильной фазы и конфигурации шлангов в системе (проточно-инжекционные анализы со шлангами из ПЭЭК или с колонкой ЖХ для рабочего процесса ввода ЖХ). Он может применяться для поиска и устранения любых неисправностей системы, связанных с внезапными прорывами давления. Для режима ввода ЖХ также следует учитывать засорение колонок ЖХ.

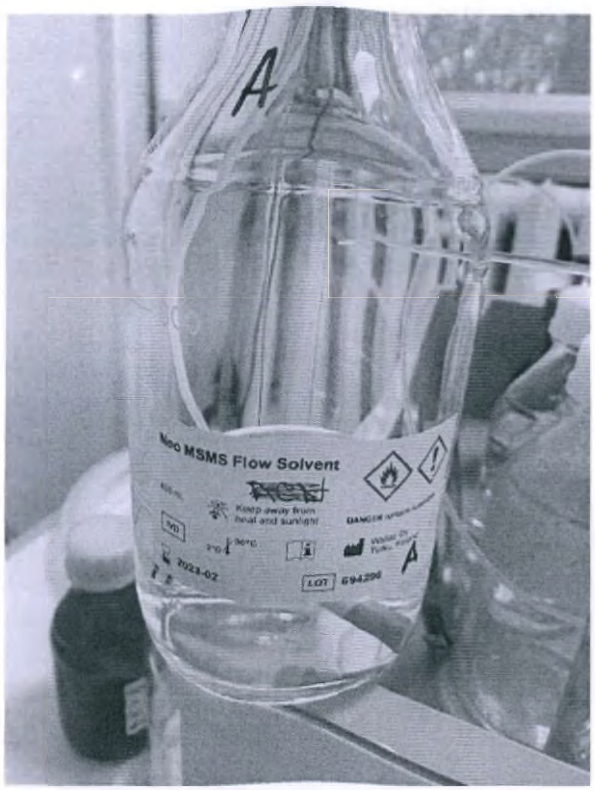
Описание рабочего процесса

Запуск системы

Найдите кнопку питания на передней панели управления, рядом с ЖК-дисплеем. Нажмите кнопку и дождитесь завершения процесса запуска прибора.

1. - Проверить количество мобильной фазы (Растворитель проточной системы HEO MC/MC (Neo MSMS Flow Solvent), входит в состав «Аналитические растворы без дериватизации NeoBase 2 (NeoBase 2 Non-derivatized Assay Solutions)») если количество меньше 1/3 от 1 л, вскрыть новую бутыль и поставить в канал A (каналы подписаны (A/B)

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



2 – Проверить количества промывочного раствора (Flow Solvent), если количество меньше 1/3 от 0,5 л, то приготовить новый раствор (в порядке, изложенном ниже) и поставить в канал (для промывки).

Порядок приготовления промывочного раствора Flow Solvent

Промывочный раствор Flow Solvent состоит из ацетонитрила и деионизированной воды в объемном соотношении 84/16 v/v %.

Для приготовления раствора необходимо:

1. Подготовить емкость из темного стекла необходимого объема (V, мл);
2. Отмерить мерным цилиндром объем ацетонитрила в расчете 0,84xV, где V – общий объем емкости, мл;
3. Перелить ацетонитрил в емкость;
4. Отмерить мерным цилиндром объем деионизированной воды в расчете 0,16xV, где V – общий объем емкости, мл;
5. Перелить деионизированную воду в емкость;
6. Емкость закрыть крышкой;
7. Компоненты раствора тщательно перемешать.

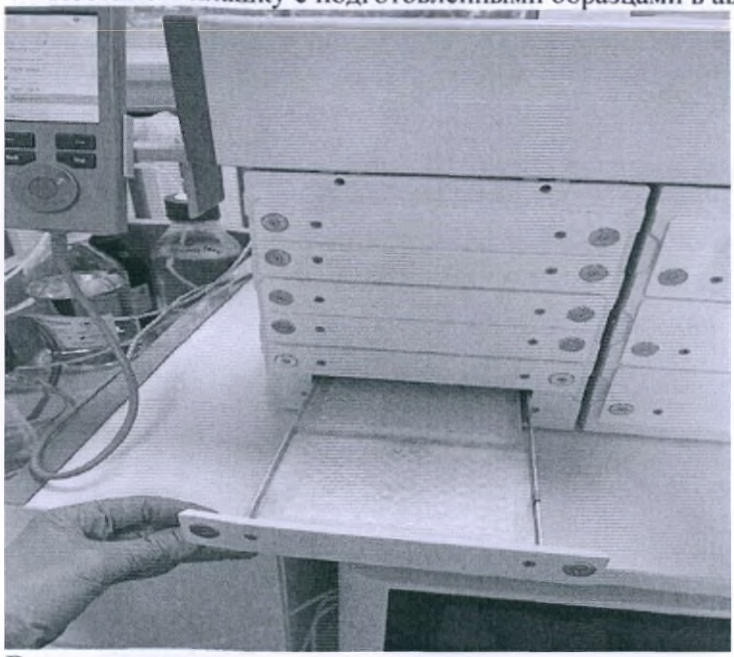
Срок годности раствора: 12 месяцев при температуре +2 - +8 С. Хранить в емкости из темного стекла.

3- Проверить количество дистилированной воды, если количество меньше 1/3 от 1 л, открутить синюю крышку с двумя выходящими каналами, налить до необходимого объема воду и закрутить крышку.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



4 – Поставить плашку с подготовленными образцами в автосемплер (позиции от 1 до 12)

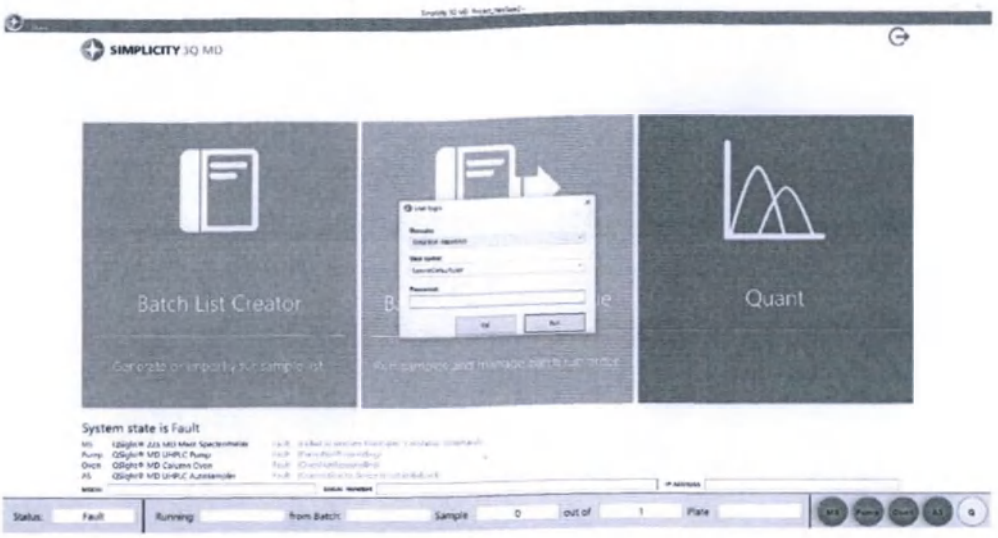


Вход в программу

Навести курсор мыши на ярлык  Simplicity 3Q MD, дважды нажать на левую кнопку мыши. Появится диалоговое окно входа.

Выберите расположение домена компьютера в раскрывающемся списке Domain (Домен), если это еще не сделано (если вы не знакомы с этими настройками, обратитесь к системному администратору).
Введите User Name (Имя пользователя) программного обеспечения Simplicity или, если вы уже входили в программу, выберите его из раскрывающегося списка (ServiceDefaultUser).
В поле Password (Пароль) введите уникальный пароль для Simplicity. Нажмите кнопку OK. Приложение откроется на вкладке Home (Главная).

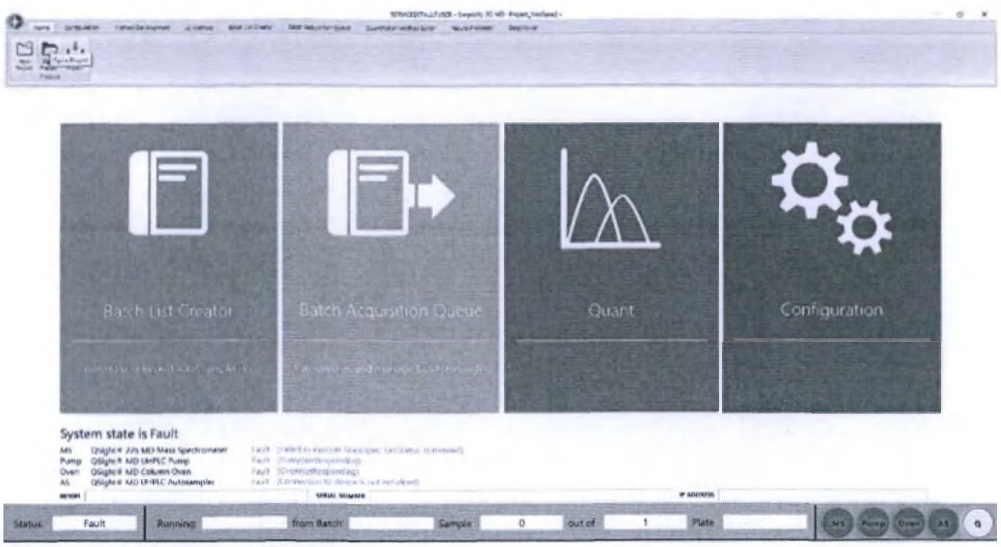
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Диалоговое окно входа

User login	Вход пользователя
Domain	Домен
BOLLL036	BOLLL036
User name:	Имя пользователя
Advanced User	
Password	Пароль
OK	ОК
Exit	Выход
Batch List Creator	Создание списка серий
Generate or import your sample list	Создать или импортировать свой список проб
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Run samples and manage batch run order	Запустить пробы в работу и задать порядок прогона серии
Quantification Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
System state is Ready	Состояние системы: Готова
MS QSight 225 MD Mass Spectrometer Ready	Масс-спектрометр QSight 225 MD Mass Spectrometer готов
AS QSight MD UHPLC Autosampler Ready	Автосамплер QSight MD UHPLC Autosampler готов
Pump QSight MD UHPLC Pump Ready	Насос QSight MD UHPLC Pump готов
Oven QSight MD Column Oven Ready	Колоночный термостат QSight MD Column Oven готов
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

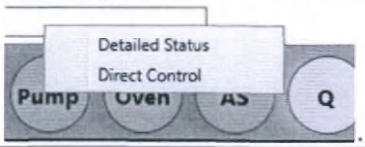
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Диалоговое окно «Home»

Batch List Creator	Создание списка серий
Generate or import your sample list	Создать или импортировать свой список проб
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Run samples and manage batch run order	Запустить пробы в работу и задать порядок прогона серии
Quantification Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
System state is Ready	Состояние системы: Готова
MS QSight 225 MD Mass Spectrometer Ready	Масс-спектрометр QSight 225 MD Mass Spectrometer готов
AS QSight MD UHPLC Autosampler Ready	Автосамплер QSight MD UHPLC Autosampler готов
Pump QSight MD UHPLC Pump Ready	Насос QSight MD UHPLC Pump готов
Oven QSight MD Column Oven Ready	Колоночный термостат QSight MD Column Oven готов
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

5 – В нижнем правом углу навести курсор мыши на «Pump» и щелкнуть правой клавишей, появится окно с надписью «Direct Control» (Прямое управление)

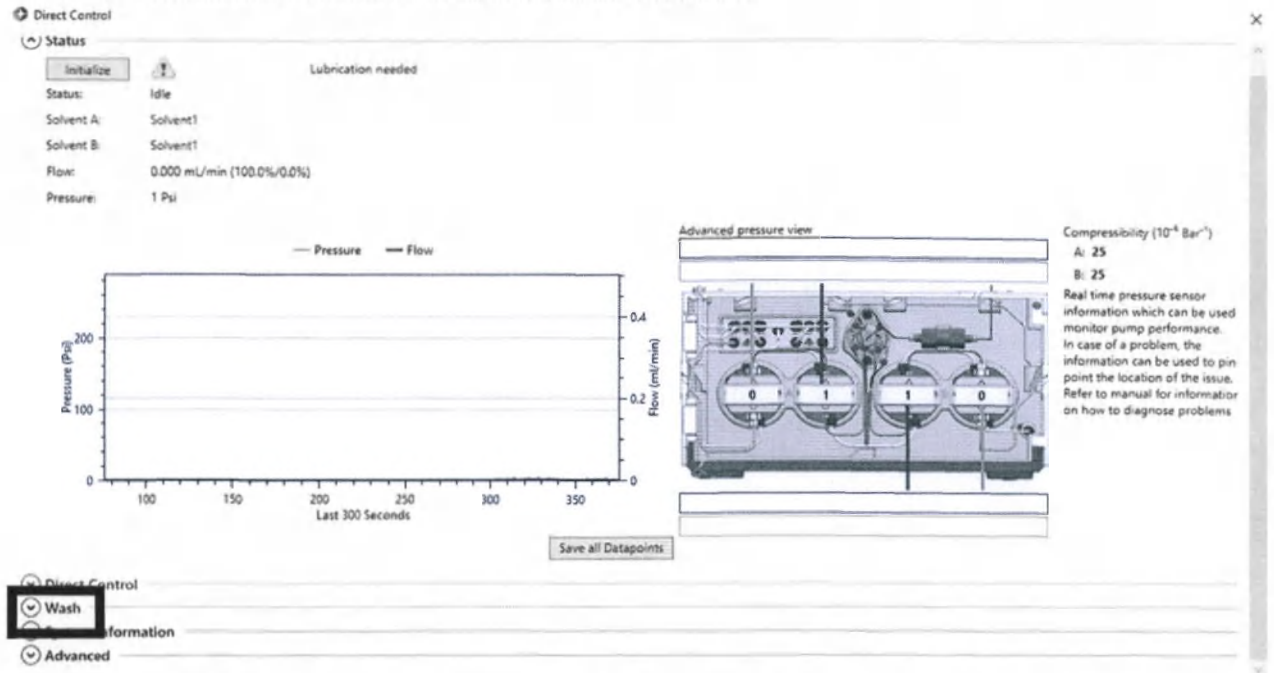


Detailed Status	Подробный статус
Direct Control	Прямое управление
MS	МС
AS	АС

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Pump	Насос

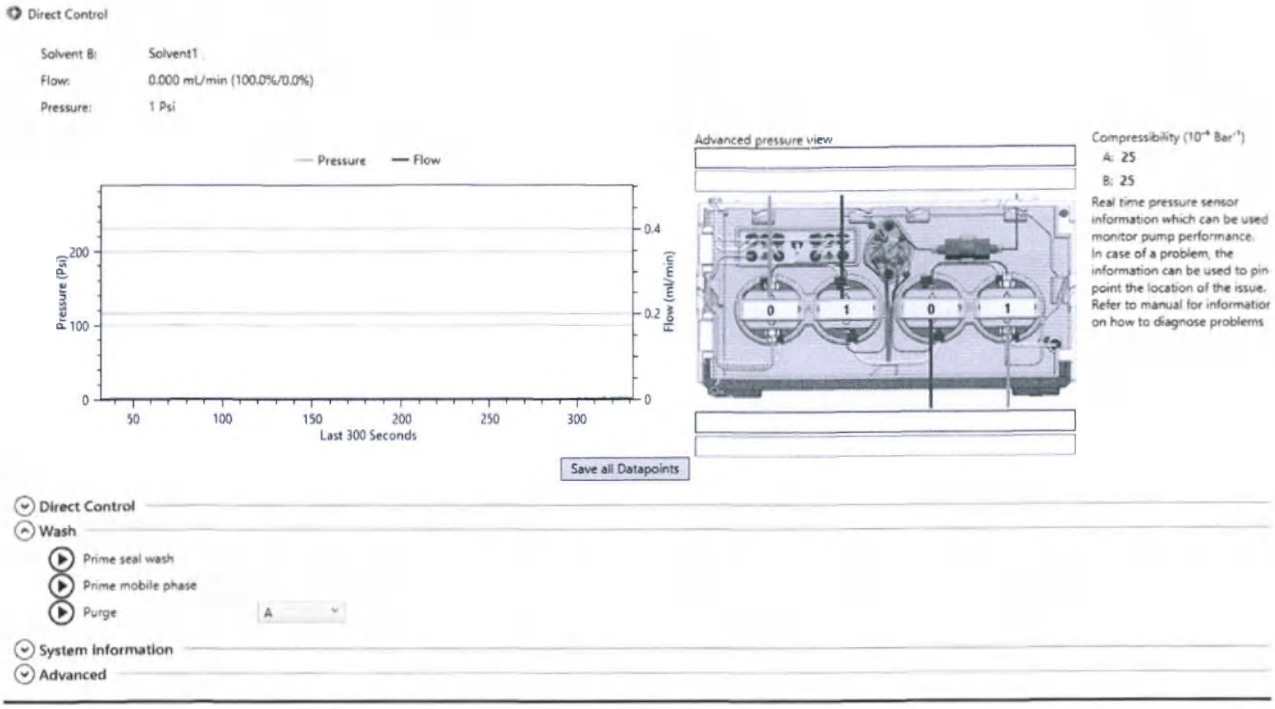
Нажать левой клавишей мыши и появится диалоговое окно



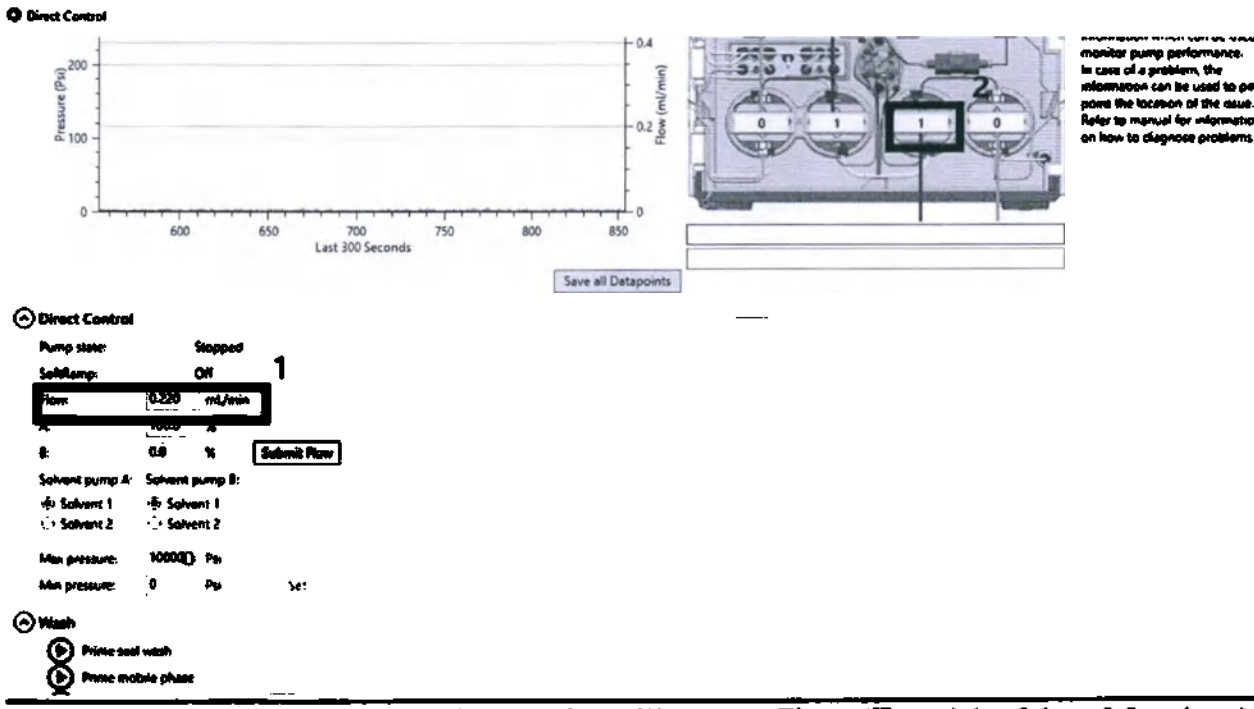
Solvent pump A	Растворитель для насоса A
Solvent pump B	Растворитель для насоса B
Solvent 1	Растворитель 1
Solvent 2	Растворитель 2

Нажать на кнопку «Wash» (Промывка) и последовательно запустить: Prime seal wash (Заправка раствором для промывки уплотнений); Prime mobil phase (Заправка подвижной фазой); Purge (Очистка).

Примечание: Каждая функция останавливается автоматически, если в каналах мобильной фазы и промывочных растворах остались пузыри воздуха, повторить Prime mobil phase; Purge.



ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



6 – Выставить значение потока мобильной фазы (1) в окне «Flow» (Поток) (от 0,1 до 0,5 мл/мин) в закладке «Direct Control» (Прямое управление) нажать на кнопку «Submit Flow» (Отправить Поток). Параметр давления (2) должен быть в диапазоне от 40psi до 210 psi.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



7 – Во время проверки уровня давления в системе (пункт 6) из выделенных на рисунке соединений не должна капать мобильная фаза. Если мобильная фаза капает, то плотно закрутить все соединения.

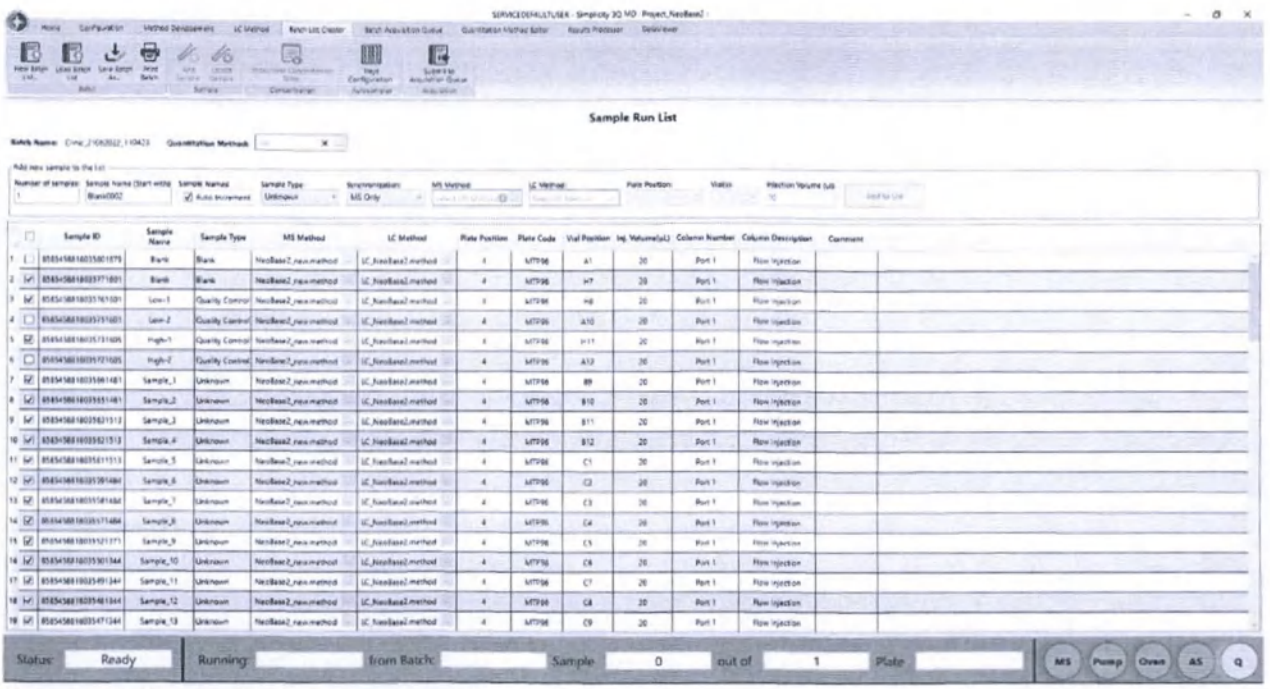
8- Запуск анализа образцов

- Нажмите на логотип программного обеспечения Simplicity в левом верхнем углу экрана, чтобы открыть **меню Simplicity**.
- Нажмите **Open Project** (Открыть проект). Появится диалоговое окно с предупреждением, что это действие приведет к закрытию файлов существующего проекта, и запросом подтверждения продолжения. Нажмите кнопку **Yes** (Да), чтобы создать новый проект.
- Откроется диалоговое окно **Select Project** (Выберите проект).
- Выберите Проект, с которым вы собираетесь работать
- Нажмите кнопку **OK**.

Создание нового списка серий

- Откройте вкладку **Batch List Creator** (Создание списка серий).
- Нажмите **New Batch List** (Новый список серий). Программа автоматически создает новую серию. Имя серии состоит из буквы B и даты создания.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Создание и/или загрузка списка проб

ADVANCEDUSER - Simplicity 3Q MD : Project -	ПРОДВИНУТЫЙ ПОЛЬЗОВАТЕЛЬ - Simplicity 3Q MD : Проект -
Home	Главная
Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
New Batch List...	Новый список серий…
Load Brach List	Загрузить список серий
Save Batch As...	Сохранить список серий как…
Print Batch	Печать серии
Batch	Серия
Add Sample	Добавить пробу
Delete Sample	Удалить пробу
Show/Hide Concentration Table	Показать/Скрыть таблицу концентраций
Concentration	Концентрация
Trays Configuration	Конфигурация лотков
Autosampler	Автосамплер
Submit to Acquisition Queue	Добавить в очередь сбора данных
Acquisition	Сбор данных
Sample Run List	Список прогонов проб
Batch Name B201028	Название серии B201028
Quantitation Method	Метод количественного анализа
Add new sample to the list	Добавить новую пробу в список
Number of samples:	Количество проб:
Sample Name (Start with):	Название проб (формат начала):
SampleName0022	НазваниеПробы0022
Sample Names:	Названия проб
Auto Increment	Автоматическое увеличение номера
Sample Type:	Тип пробы:
Unknown	Неизвестный

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Synchronization:	Синхронизация
MS Only	Только МС
MS Method:	Метод МС:
Select MS Method	Выбрать метод МС
MS_Standby_APCI3.method	MS_Standby_APCI3.method
LC Method:	Метод ЖХ
Select LC Method	Выбрать метод ЖХ
Plate Position:	Положение планшета
Vial(s):	Виала (виалы):
Select MS Method	Выбрать метод МС
Select LC Method	Выбрать метод ЖХ
Injection Volume (ul):	Объем дозирования (мкл)
Add to List	Добавить в список
Sample ID	Идентификатор пробы
Sample Name	Название пробы
Sample Type	Тип пробы
MS Method	Метод МС
LC Method	Метод ЖХ
Plate Position	Положение планшета
Plate Code	Код планшета
Vial Position	Положение виалы
Inj. Volume (uL)	Объем дозирования (мкл)
Column Number	Номер колонки
Column Description	Описание колонки
SampleName0012	НазваниеПробы0012
SampleName0013	НазваниеПробы0013
SampleName0014	НазваниеПробы0014
SampleName0015	НазваниеПробы0015
SampleName0016	НазваниеПробы0016
SampleName0017	НазваниеПробы0017
SampleName0018	НазваниеПробы0018
SampleName0019	НазваниеПробы0019
SampleName0020	НазваниеПробы0020
SampleName0021	НазваниеПробы0021
Unknown	Неизвестно
MS_Standby_APCI3.method	MS_Standby_APCI3.method
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

После отправки в очередь серия автоматически сохраняется повторно с добавлением метки времени, что помогает отличить ее от других серий, отправленных в этот же день.

Примечание. Чтобы начать с ранее созданного списка, нажмите кнопку **Load Batch List** (Загрузить список серий).

- Введите число анализируемых проб в поле **Number of samples** (Число проб).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

- В поле **Sample Name (Start with)** (Имя начальной пробы) введите имя первой пробы в списке. Программное обеспечение создаст последовательные имена для всех проб в списке (до заданного суммарного количества проб).

Пример

1- **Number of samples** (Число проб): 10.
2 - **Sample Name (Start with)** [Имя начальной пробы]: Sample0001.
3 - Программное обеспечение Simplicity создаст 9 дополнительных проб со следующими именами: от *Sample0002* до *Sample0010*.

Примечание. Чтобы не использовать функцию автоматической нумерации и вручную нумеровать пробы, включите в имя пробы символ подчеркивания (_). Также можно снять флажок Auto Increment (Автоприращение). Но не используйте символ подчеркивания в качестве первого знака в имени пробы.

Выберите значение параметра **Sample Type** (Тип пробы) для вводимых проб из раскрывающегося меню. Эта информация добавляется к пробам по мере их сбора, но не используется для количественного анализа. Доступные типы проб:

a. **Unknown** (Неизвестная): проба.
b.**Standard** (Стандарт): используется для создания стандартной кривой.
c. **Quality Control** (Контроль качества): известная концентрация аналита.
d. **Solvent** (Растворитель): ввод чистого растворителя
e.**Double Blank** (Двойная пустая проба): матрица без аналитов или внутренних стандартов.
f. **Blank** (Пустая проба): матрица, без аналита, но с добавленным внутренним стандартом внутренним стандартом.
g. После добавления проб в список серий все пробы будут иметь указанный тип. Его можно изменить перед отправкой проб в очередь.

- Выберите режим синхронизации для серии: **LC/MS** (ЖХ/МС) или **MS Only** (Только МС). Режим синхронизации должен быть одинаков для всей серии. Нельзя отправить в очередь серию, которая содержит одновременно пробы, синхронизированные и с ЖХ/МС, и только с МС.
- Если выбран режим синхронизации ЖХ/МС, задайте **Plate Position** (Положение планшета) и **Vial(s) Location** (Расположение флаконов) для пробы (при добавлении в список нескольких проб — для первой пробы) и **Injection Volume** (Вводимый объем). В одну пробу можно ввести не более 80 мкл.

a. Положения планшета 1-12 используются для 96-луночных планшет.
b. Положения планшета 13-18 используются для 1,5/2 мл виал.

9 - Проверка состояния пробы и запуск списка для анализа

- Откройте вкладку Batch Acquisition Queue (Очередь сбора данных серии).
- Откройте вкладку **Batch List Creator** (Создание списка серий).
- Создайте новый или загрузите существующий **Batch List** (Список серий). Чтобы загрузить существующий список серий, нажмите на значок **Load Batch List** (Загрузить список серий).
- Измените список серий нужным образом и нажмите **Submit to Acquisition Queue** (Добавить в очередь сбора данных).
- Данные для проб серии будут сохранены в папке **Run Batches** (Анализируемые серии) текущего активного проекта.

- В таблице **Sample List** (Список проб) наведите курсор мыши на значок состояния, отображаемый в столбце **Status** (Состояние). Отобразится сообщение с указанием состояния пробы.
- В первой строке этой подсказки отображается состояние анализа для сбора данных: **Incomplete** (Не завершено), **Complete** (Завершено), **In Progress** (Выполняется) или **Not Ready** (Не готово).

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

- Во второй строке показаны результаты проверки завершения количественного анализа: **N/A** (Не применимо), **Not completed** (Не завершено), **Passed** (Успешно) или **Failed** (Неудачно).
- Дополнительно возможны сообщения состояния **Activate** (Активировать) и **Deactivate** (Деактивировать), которые отображаются при остановке или прерывании сбора данных после нажатия правой кнопкой мыши по выбранной пробе.
  Кроме того, в строке состояния внизу экрана всегда отображаются цветовые индикаторы состояния системы для МС, ВЭЖХ, насоса, термостата и очереди сбора данных (Q).
- Чтобы начать сбор данных, нажмите кнопку **Start** (Пуск) в ленте ниже.

Воспользуйтесь раскрывающимся меню **Start** (Пуск), чтобы задать отложенный запуск. Введите продолжительность задержки из всплывающего окна, чтобы включить таймер обратного отсчета.



START	Пуск
DELAY START	Отменить пуск

По мере обработки очереди из списка проб будет изменяться значок **Status** (Состояние) в списке проб.

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

- Остановка сбора данных -эта функция останавливает сбор данных на текущей пробе или в конце очереди текущей серии.

Во время выполнения сбора данных нажмите **Stop after current sample** (Остановить после текущей пробы), чтобы завершить анализ текущей пробы, или нажмите **Stop after current batch** (Остановить после текущей серии), чтобы завершить по окончании текущей серии. Программное обеспечение отслеживает проанализированные пробы и перезапускается со следующей не проанализированной пробы в очереди серии.

- Принудительная остановка сбора данных

На вкладке **Batch Acquisition Queue** (Очередь сбора данных серии) нажмите по значку **ABORT** (ПРЕРВАТЬ). Анализ немедленно остановится, и данные текущей пробы будут утрачены. Система будет обозначать эту пробу как проанализированную с состоянием **Failed** (Неудачно). Программное обеспечение отследит завершенные пробы и перезапустит сбор данных со

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

следующей не проанализированной пробы в очереди серии.

Обработка данных

Откройте вкладку **Quantitation Method Editor** (Редактор методов количественного анализа).

В ленте меню нажмите **Open Method** (Открыть метод) и выберите файл предварительно сохраненного метода количественного анализа.

- В меню ленты нажмите **Process Results with Current Method** (Обработать результаты с использованием текущего метода) и выберите анализируемую серию и пробы, которые необходимо обработать.
- Откроется вкладка **Results Processor** (Обработчик результатов), и результаты количественного анализа будут показаны в таблице результатов (Results Table).
- Перейдите на вкладку **By Analyte** (По аналиту) для просмотра проб по аналиту или переходу. Перейдите на вкладку **By Sample** (По пробе) для просмотра аналитов по номеру пробы.
- Параметры сглаживания можно также изменять для отдельных проб.
- Чтобы изменить параметры отображения диаграммы, нажмите на неё правой кнопкой мыши.
- Нажмите **Save Results As...** (Сохранить результаты как...), чтобы сохранить результаты.
- Интерпретируйте данные.
- Если включен внутренний стандарт, программное обеспечение оценивает площадь каждого пика как для пробы, так и для внутреннего стандарта, а затем рассчитывает измеренное значение (обычно равное расчетной концентрации).

- Если требуется выполнить интегрирование вручную, нажмите и удерживайте клавишу **Shift** (рядом с курсором появится элемент ***Manual Integration*** [Интегрирование вручную]) и нажмите левой кнопкой мыши, перетаскивая курсор вдоль интересующего пика.

Экспорт отчетов для результатов количественного анализа

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

- На вкладке **Results Processor** (Обработчик результатов) нажмите **Export Results** (Экспорт результатов).
- Выберите способ экспорта данных.

To Excel (All Analytes) / [В Excel (все аналиты)]. Используйте этот формат для создания файла данных Excel (.XLSX) для всех собранных аналитов. Файл Excel включает страницы сводок по аналитам и по пробам, а также отдельные страницы для всех аналитов в таблице результатов.

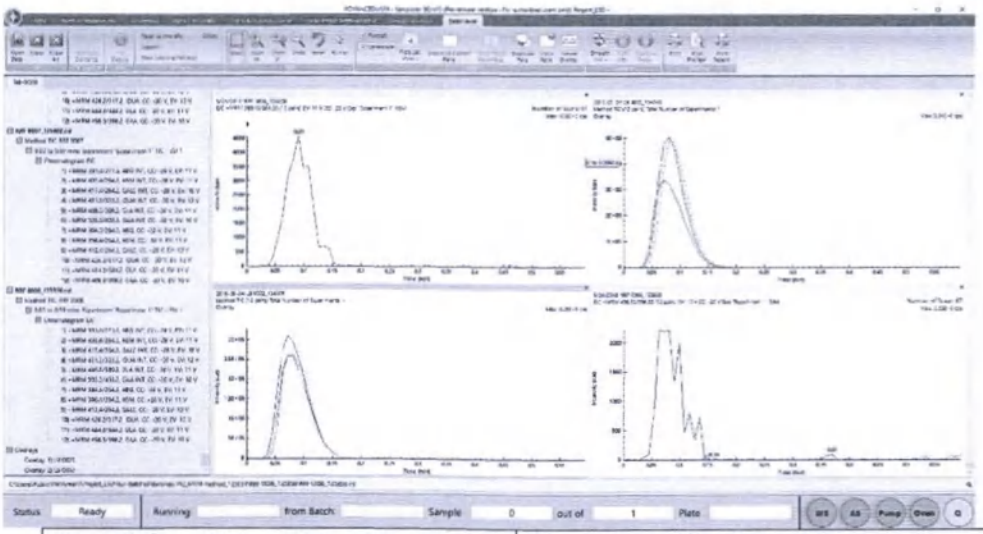
To Excel (Current Analyte/Sample Only) / [В Excel (только текущий аналит/пробу)]. Используйте этот формат для создания файла данных Excel (.XLSX) для текущего выбранного аналита или пробы.

To MSMS Workstation (На рабочую станцию MC/MC). Используйте этот параметр для экспорта данных в формате, совместимом с программным обеспечением рабочей станции MC/MC Perkin Elmer.

Просмотр данных

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

На вкладке DataViewer (Средство просмотра данных) можно загружать файлы данных в формате .IRD, чтобы просматривать такие данные хроматограмм, как информация о пробах, сведения о методе, время удерживания, форма пика, интенсивность пика и т. д. В процессе сбора данных доступна также функция просмотра в реальном времени, которая позволяет просматривать и печатать актуальные интерактивные данные, поступающие с масс-спектрометра. Для просмотра с помощью функции Real-Time DataViewer (Средство просмотра данных в реальном времени) необходимо сначала открыть вкладку DataViewer (Средство просмотра данных).



Simplicity 3Q MD (Pre-release version - For authorized users only): Project.LSD -	Simplicity 3Q MD (Предварительная версия - Только для авторизованных пользователей): Project.LSD -
Home	Главная
Method Development	Разработка метода
LC Method	Метод ЖХ
Batch List Creator	Создание списка серий
Batch Acquisition Queue	Очередь сбора данных серии
Quantitation Method Editor	Редактор методов количественного анализа
Results Processor	Обработчик результатов
DataViewer	Средство просмотра данных
Open Data	Открыть данные
Close	Закрыть
Sort Sub Elements	Сортировка вложенных элементов
File Explorer	Проводник
File Details	Сведения о файле
Info	Информация
Relative intensity	Относительная интенсивность
Legend	Условные обозначения
Peak Labeling Settings	Настройки маркировки пиков
Colors	Цвета
Options	Опции
Select	Выбрать
Zoom in	Увеличить
Undo	Отменить
Reset	Сбросить
Pointer	Указатель
Plot	График
Portrait	Портретная ориентация
Landscape	Альбомная ориентация

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Plots per View	Графиков на экране
Maximize current pane	Развернуть текущую панель
Reset from Maximized	Сбросить развернутую панель
Duplicate Pate	Дублировать панель
Close Pane	Закрыть панель
Create Overlay	Создать наложение
View	Просмотр
Smooth Plot	Сгладить график
EMS Info	Информация EMS
Signal to Noise	Сигнал/ шум
Analysis	Анализ
Print	Печать
Print Preview	Предварительный просмотр печати
Print Report	Печать отчета
Tab-0000	Таб-0000
7) + MRM 3843/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V	7) + MRM 3843/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V
8) + MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V	8) + MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V
9) + MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V	9) + MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V
10) + MRM 426.2/317.2, IDUA CC: -20 V, EV: 12 V	10) + MRM 426.2/317.2, IDUA CC: -20 V, EV: 12 V
11) + MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V	11) + MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V
12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V	12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V
RRF 0007.1358O2.ird	RRF 0007.135802.ird
Method TIC RRF 0007	Метод TIC RRF 0007
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ESI 1	0,00 - 0,59 мин Эксперимент "Эксперимент 1" TIC - ESI 1
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
1) +MRM 391.4/2713, ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V	1) +MRM 391.4/2713, ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V
2) +MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V. EV: 11 V	2) +MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V. EV: 11 V
3) +MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V	3) +MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V
4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V, EV: 12 V	4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V, EV: 12 V
5) +MRM 489.3/3893, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V	5) +MRM 489.3/3893, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V
6) +MRM 503.3/4033, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V	6) +MRM 503.3/4033, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V
7) +MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V	7) +MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V
8) +MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V	8) +MRM 398.4/2643, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V
9) +MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V	9) +MRM 412.4/2643, GALC, CC: -28 V, EV: 10 V
10) +MRM 426.2/317.2, IDUA, CC: -20 V, EV: 12 V	10) +MRM 426.2/317.2, IDUA, CC: -20 V, EV: 12 V
11) +MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V	11) +MRM 484.3/384.2, GLA, CC: -20 V, EV: 11 V
12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC:	12) +MRM 498.3/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

-20 V, EV: 10 V	
RRF 0008_135858.ird	RRF 0008_135858.ird
Method TIC RRF 0008	Метод TIC RRF 0008
0.00 to 0.59 mins Experiment "Experiment 1" TIC - ES11	0,00 - 0,59 мин Эксперимент ""Эксперимент 1"TIC - ES11
Chromatogram EIC	Хроматограмма EIC
1) + MRM 391.4/271 Д ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V	1) + MRM 391.4/271 E ABG INT, CC: -28 V, EV: 11 V
2) + MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V, EV: 11 V	2) + MRM 405.4/2643, ASM INT, CC: -28 V, EV: 11 V
3) + MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V	3) + MRM 417.4/2643, GALC INT, CC: -28 V, EV: 10 V
4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V.. EV: 12 V	4) + MRM 431.3/322.2, IDUA INT, CC: -20 V.. EV: 12 V
5) + MRM 489.3/389.3, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V	5) + MRM 489.3/389.3, GLA INT, CC: -20 V. EV: 11 V
6) + MRM 503.3/403.3, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V	6) + MRM 503.3/403.3, GAA INT, CC: -20 V, EV: 10 V
7) + MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V	7) + MRM 384.3/2643, ABG, CC: -28 V, EV: 11 V
8) + MRM 398.4/264.3, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V	8) + MRM 398.4/264.3, ASM, CC: -28 V, EV: 11 V
9) +MRM 412.4/264.3, GALC, CC: -28 V. EV: 10 V	9) +MRM 412.4/264.3, GALC, CC: -28 V. EV: 10 V
10) + MRM 426.2/317.2, IDUA. CC: -20 V. EV: 12 V	10) + MRM 426.2/317.2, IDUA. CC: -20 V. EV: 12 V
11) + MRM 4843/384.2, GLA CC: -20 V, EV: 11 V	11) + MRM 4843/384.2, GLA CC: -20 V, EV: 11 V
12) + MRM 4983/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V	12) + MRM 4983/398.2, GAA, CC: -20 V, EV: 10 V
2018-05-24: RRF 0008.135858	2018-05-24: RRF 0008.135858
5/24/2013: RRF 0008.135858	5/24/2013: RRF 0008.135858
EIC +MRM 398.43/264.30 (12 pairs) EV: 11 V CC: -28 V Exp "Experiment 1" ASM	EIC +MRM 398.43/264.30 (12 пар) EV: 11 В CC: -28 В Эксперимент 1 ASM
Number of Scans: 67	Количество сканирований: 67
Max: 4.53E-3 cps	Макс: 4.53E-3 имп/с
2018-05-24: L9 0035.134740	2018-05-24: L9 0035.134740
Method TIC (12 pairs) Total Number of Experiments: 1	Метод TIC (12 пар) Общее количество экспериментов: 1
Overlay	Наложение
Max: 5.04E-6 cps	Максимум: 5.04E-6 имп/с
0 to 0.59413	от 0 до 0.59413
201S-05-24: L8 0032.134009	201S-05-24: L8 0032.134009
Method TIC (12 pairs) Total Number of Experiments: 1	Метод TIC (12 пар) Общее количество экспериментов: 1
Overlay	Наложение
Max: 3.28E-6 cps	Максимум: 3.28E-6 имп/с
5/24/2018: RRF 0008.135858	5/24/2018: RRF 0008.135858
EIC +MRM 498.30/398.20 (12 pairs) EV: 10 V CC: -20 V Exp "Experiment 1" GAA	EIC +MRM 498.30/398.20 (12 пар) EV: 10 В CC: -20 В Эксперимент 1 GAA
Number of Scans: 67	Количество сканирований: 67
Max: 2.23 E-3 cps	Максимум: 2.23 E-3 имп/с
Relative Intensity (%)	Относительная интенсивность (%)

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Time (min)	Время (мин)
C:\Users\Public\Instrument\Project_ LSD\Run Batches\Baroness PQ_MRM methocM25051 \RRF 0008_135858\RRF 0008_135858.ird	C:\Пользователи\Публичный\Прибор\Проект_LSD\Текущие_ серии\Baroness PQ_MRM метод_M25051 \RRF 0008_135858\RRF 0008_135858.ird
Printing	Печать
Status	Статус
Ready	Готов
Running	В работе
from Batch	из серии
Sample	Проба
out of	из
Plate	Планшет
MS	МС
AS	АС
Pump	Насос
Oven	Термостат
Q	Q

Функции меню для Просмотра данных

• **Open Data** (Открыть данные). Нажмите, чтобы открыть существующий файл данных .IRD и загрузить связанные данные в окно.
Close (Закрыть). Нажмите, чтобы закрыть текущий активный файл .IRD и соответствующие отображаемые диаграммы.
• **Close All** (Закрыть все). Нажмите, чтобы закрыть все загруженные в данный момент файлы .IRD (перечислены на панели слева) и все отображаемые диаграммы.
• **Sort Sub Elements** (Сортировка дочерних элементов). Нажмите, чтобы отсортировать список MRM по параметрам **Number** (Номер), **Q1 Mass** (Масса Q1), **Q3 Mass** (Масса Q3) или **Retention Time** (Время удерживания). Эта возможность доступна только при выборе списка MRM или диаграммы XIC.
• **File Details** (Сведения о файле). Нажмите, чтобы отобразить подробную информацию о загруженном файле данных, включая сведения о пробе и методе, разрешение и данные калибровки, а также состояние оборудования.
• **Relative Intensity** (Относительная интенсивность). Переключает шкалу по оси Y с показателя **Intensity (cps)** (Интенсивность, отсч/сек) на **Relative Intensity (%)** (Относительная интенсивность, %) и обратно.
• **Legend** (Условные обозначения). Нажмите, чтобы открыть условные обозначения для наложений диаграмм, содержащих несколько MRM-переходов.
• **Peak Labeling Settings** (Настройки разметки пиков). Нажмите, чтобы открыть одноименное диалоговое окно, в котором можно задавать параметры разметки пиков для спектров и хроматограмм.
• **Colors** (Цвета). Нажмите, чтобы открыть диалоговое окно **Color Palette** (Цветовая палитра), в котором можно задавать цвета для линий и контуров диаграмм.
• **Select** (Выбрать). Нажмите, чтобы активировать курсор для выбора конкретных пиков или площадей на диаграмме в выделенном прямоугольнике. Чтобы очистить выбор, нажмите правую кнопку мыши и выберите **Clear Current Selection** (Очистить текущий выбор) или **Clear All Selections** (Очистить все выбранные значения).
• **Zoom (X vertical and Y horizontal)** [Увеличить (X по вертикали и Y по горизонтали)]. Нажмите, чтобы увеличить выбранную область по оси X или Y. Дважды нажмите на диаграмму, чтобы восстановить исходный масштаб.
• **Undo** (Отменить). Нажмите для отмены или аннулирования предыдущего действия.
• **Reset** (Сброс). Нажмите, чтобы отобразить исходное представление диаграммы.
• **Pointer** (Указатель). Нажмите, чтобы отображать координаты курсора при его перемещении по диаграмме в реальном времени.
• **Portrait/Landscape** (Книжная)/(Альбомная). Выбор ориентации диаграммы при

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

отображении для печати.
• **Plots per View** (Диаграмм в представлении) *(раскрывающееся меню)*. Выбор суммарного количества диаграмм для одновременного просмотра. Можно выбрать *4, 6, 9, 12* или *16* диаграмм.
• **Maximize Current Pane** (Увеличить текущую область). Нажмите, чтобы максимально увеличить окно просмотра для выбранной диаграммы.
• **Reset from Maximized** (Сброс с максимального). Если окно диаграммы максимально увеличено, нажмите, чтобы восстановить исходное представление.
• **Duplicate Pane** (Дублировать область). Нажмите, чтобы дублировать выбранную диаграмму и создать копию выбранного MRM-перехода в списке MRM. Дубликат отображается как дочерний элемент родительского перехода и помечается как **Copy of…** (Копия...).
• **Close Pane** (Закрыть область). Нажмите, чтобы закрыть выбранную диаграмму.
• **Create Overlay** (Создать наложение). Нажмите, чтобы создать наложение выбранных MRM-переходов.
При выборе этого параметра для всех MRM-переходов в дереве каталогов на панели слева создаются флажки. Выберите с помощью этих флажков MRM-переходы, которые будут использоваться для наложения, и нажмите кнопку **Create** (Создать), чтобы создать наложение. Для каждого перехода будут использоваться разные цвета.
• **Smooth Plot** (Сгладить диаграмму) *(раскрывающееся меню)*. Доступны варианты **Set** (Установка) и **Reset** (Сброс) свойств сглаживания диаграммы. При выборе установки свойств отображается диалоговое окно, в котором можно указать количество точек для сглаживания.
• **EMS Info** (Информация EMS). Нажмите, чтобы создать графический отчет, детализирующий выбранный файл данных. В этот отчет включены данные об *определенной массе (m/z), ширине (m/z), расчете разрешения и интенсивности (отсчетов в секунду)*.
• **Signal to Noise** (Сигнал — шум). Выберите одну область хроматограммы по извлеченному иону (XIC) в качестве фона, а другую в качестве пика, затем нажмите **Signal to Noise** (Сигнал — шум), чтобы отобразить итоговые данные расчета отношения «сигнал — шум».
• **Service Calculator** (Служебный калькулятор). *Только для пользователей типа **Service** (Обслуживание).*
• **Print** (Распечатать). Нажмите, чтобы распечатать выбранные диаграммы.
• **Print Preview** (Предварительный просмотр материала для печати). Нажмите, чтобы просмотреть и задать свойства печати перед тем, как продолжить распечатывание диаграмм.
• **Print Report** (Распечатать отчет). Нажмите, чтобы распечатать отчет, который включает выбранные диаграммы и соответствующую информацию о методе.

Выключение системы

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

Перечень и описание материалов медицинского изделия, вступающих в контакт с телом пациента (телом человека)

Не применимо.

Компоненты данного медицинского изделия не вступают в контакт с телом пациента ни напрямую, ни опосредованно.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Информация о содержащихся в медицинском изделии лекарственных препаратах для медицинского применения, фармацевтических субстанциях для медицинского применения

Не применимо. Не содержит лекарственных препаратов для медицинского применения. Не содержит фармацевтических субстанций для медицинского применения.

Метод заключительной стерилизации

Не применимо. Данное медицинское изделие не является стерильным.

Информация о предыдущих модификациях медицинского изделия для диагностики in vitro

«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии» не имеет предыдущих модификаций.

Специальные требования в отношении помещений, специальной подготовки или особой квалификации пользователя и (или) третьих лиц (при необходимости):
Габариты основных компонентов «Системы скрининговой «QSight 225MD UHPLC Screening System»:
Масс-спектрометр QSight 225 MD (на колесах) в/ш/г (см) – 120/50/50, вес (кг) - 273;
Автосемплер для УВЭЖХ QSight MD в/ш/г (см) - 76,2/33/62, вес (кг) – 47;
Насос для УВЭЖХ QSight 225 MD в/ш/г (см) - 33/54/18, вес (кг) – 21;
Колоночный термостат QSight MD в/ш/г (см) - 60/17/34,5, вес (кг) – 16;
Би-роторный лопастной насос SV 40 в/ш/г (см) - 34/30/51, вес (кг) – 45.

В лаборатории должна работать приточно-вытяжная вентиляция принудительного типа.
Система должна включаться за полчаса до начала рабочего дня.
Кратность воздухообмена должна быть равна 15.
Разреженность воздуха должна быть равна 5-10 Па.
Забор воздуха из помещений должен проводиться на нижнем уровне помещений и на верхнем.
Для подключения используется армированная трубка 300 см с ВНУТРЕННИМ диаметром 2.54 см (1 дюйм) HOSE, VARDEX 1.00IN OD X 300CM LONG

Перечень национальных стандартов, которым соответствует медицинское изделие

№	Название
1	ГОСТ Р 50444-2020 Приборы, аппараты и оборудование медицинские. Общие технические условия
2	ГОСТ IEC 61010-1:2014 Безопасность электрических контрольно-измерительных приборов и лабораторного оборудования. Часть 1. Общие требования.
3	ГОСТ IEC 61010-2-010-2013 Безопасность электрических контрольно-измерительных приборов и лабораторного оборудования. Часть 2-010. Частные требования к лабораторному оборудованию для нагревания материалов
4	ГОСТ IEC 61010-2-081-2013 Безопасность электрических контрольно-измерительных приборов и лабораторного оборудования. Часть 2-081. Частные требования к автоматическому и полуавтоматическому лабораторному оборудованию для проведения анализов и других целей
5	ГОСТ IEC 61010-2-101-2013 Безопасность электрических контрольно-измерительных приборов и лабораторного оборудования. Часть 2-101. Частые требования к медицинскому оборудованию для лабораторной диагностики (IVD)
6	ГОСТ Р МЭК 62304-2013 Изделия медицинские. Программное обеспечение. Процессы жизненного цикла.
7	ГОСТ Р МЭК 62366-2013 Изделия медицинские. Проектирование медицинских изделий с учетом эксплуатационной пригодности.
8	ГОСТ Р ИСО 15223-1-2020 Изделия медицинские. Символы, применяемые при маркировании на медицинских изделиях, этикетках и в сопроводительной документации. Часть 1. Основные требования.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

9	ГОСТ Р МЭК 61326-1-2014 Оборудование электрическое для измерения, управления и лабораторного применения. Требования к электромагнитной совместимости. Часть 1. Общие требования.
10	ГОСТ Р МЭК 61326-2-6-2014 Оборудование электрическое для измерения, управления и лабораторного применения. Требования электромагнитной совместимости. Часть 2-6. Частные требования. Медицинское оборудование для диагностики в лабораторных условиях.
11	ГОСТ ISO 14971-2011. Изделия медицинские. Применение менеджмента риска к медицинским изделиям.
12	ГОСТ Р ЕН 13612-2010 Оценка функциональных характеристик медицинских изделий для диагностики in vitro.
13	ГОСТ ISO 13485-2017 Изделия медицинские. Системы менеджмента качества. Системные требования для целей регулирования.

Срок службы

Приборы могут использоваться в течение такого периода времени, какое необходимо пользователям, при условии, что они следуют инструкциям по использованию для своевременной замены соответствующих частей и регулярно проводят техническое обслуживание,
приборы поддерживаются локально в лаборатории (на месте использования),
детали заменяются сервисными инженерами при осуществлении профилактического обслуживания и ремонтных работ,
детали, подверженные износу, указанные в руководстве по сервисному обслуживанию, обслуживаются в соответствии с процедурами, которые были установлены и валидированы при разработке изделия.
Срок эксплуатации. При соответствующем периодическом осмотре и техническом обслуживании изделие рассчитано на 10 лет службы.
Гарантированный срок хранения 12 месяцев со дня изготовления.

Защита окружающей среды

Во время эксплуатации и хранения медицинское изделие «Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии» не оказывает отрицательного влияния на пользователя, пациента, медицинских работников и на окружающую среду при соблюдении правил, описанных в Руководстве пользователя.

Меры предосторожности

Основная информация о мерах предосторожностях приведена в Руководстве пользователя.
Информация о мерах предосторожности, предпринимаемых в случае:
а) неисправности медицинского изделия, сбоя в его работе или отклонений в функционировании, которые могут влиять на безопасность медицинского изделия, в том числе определяемых по внешним признакам:
В случае обнаружения неисправности медицинского изделия, сбоя в его работе или отклонений в функционировании необходимо обращаться к Уполномоченному представителю - АО «ПРИБОРЫ», 109028, ГОРОД МОСКВА, ПЕР.ПЕВЧЕСКИЙ, Д.4, СТР.1, ПОМЕЩ.I, КОМНАТА 10, Тел.: 8 (495) 937-45-94/ 8 (495) 937-45-92. Электронная почта: info@pribori.com
Любой ремонт, замену деталей и техническое обслуживание Системы (кроме того, что указано в Руководстве пользователя) осуществляет сервисный инженер уполномоченного представителя.

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

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

б) воздействия на функционирование медицинского изделия внешних факторов, связанных с применением медицинского изделия в комбинации с другими медицинскими изделиями и (или) оборудованием, или таких предсказуемых факторов, как внешние электромагнитные поля, электростатические разряды, излучение (электромагнитное, ионизирующее, иное), атмосферное давление и его перепады, влажность и температура воздуха:
Система используется только с медицинскими изделиями, рекомендованными Производителем.
В лаборатории необходимо поддерживать условия среды, способствующие работе прибора, роторного лопастного насоса, вытяжного вентилятора, источника и компьютера, который будет использоваться для управления системой.
Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» предназначена исключительно для использования в помещении.

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».

в) риска электромагнитных помех, создаваемых медицинским изделием для других медицинских изделий, оборудования и средств связи при проведении и оценке результатов диагностики, лечения или при его применении по назначению (например, электромагнитное излучение медицинского изделия, оказывающее влияние на другое оборудование)

Медицинское изделие не оказывает влияние на другое оборудование.

Условия транспортировки

Транспортировка данного медицинского изделия может осуществляться любым способом с соблюдением условий хранения*.
Материалы и упаковка обеспечивают возможность использования медицинского изделия после транспортировки и хранения в соответствии с рекомендациями, представленными в инструкции по применению.
Температура хранения от -25°С до +50°С, относительная влажность без конденсации 20—80%, максимальная высота над уровнем моря 2000 м.
Температура при транспортировке -25 …+ 50°С
Градиент температуры хранения: 20°С/час
Градиент температуры транспортировки: 20°С/час
Относительная влажность при хранении: 20 - 80%
Относительная влажность при транспортировке: 5 - 90%
Когда медицинское изделие доставлено, конечный пользователь несет ответственность за снятие транспортных контейнеров с грузовика и их хранение до момента установки. Необходимо связаться с сервисным инженером АО «ПРИБОРЫ», чтобы договориться о дате установки.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Сервисный инженер должен выполнить следующие действия:
- Распаковка «Системы скрининговой «QSight 225MD UHPLC Screening System» и проверка наличия и целостности всех компонентов.
- Установка, подключение и включение системных компонентов системы.
- Проверка соответствия системы заявленной спецификации поставки и техническим характеристикам.
- Базовое ознакомление пользователя с системным оборудованием и программным обеспечением
- При перемещении оборудования должно быть задействовано не менее трех человек (сервисные инженеры, грузчики), разрешено использование специальных средств разгрузки-погрузки (ремни, тележки и т.д.)

Утилизация


или


Маркировка с изображением перечеркнутого символа мусорного ведра и прямоугольника указывает на то, что изделие соответствует требованиям Директивы ЕС об утилизации электрического и электронного оборудования (WEEE) и его не следует утилизировать вместе с другими не отсортированными бытовыми отходами. Отходы любых изделий, обозначенных этим символом, необходимо собирать отдельно в соответствии с местными нормативными требованиями.

Целью этой программы является сохранение, защита и улучшение качества окружающей среды, защита здоровья человека, а также разумное и рациональное использование природных ресурсов. Специальная обработка изделий согласно требованиям этой Директивы является обязательной. Это позволит предотвратить распространение загрязняющих веществ в массе переработанных материалов или отходов. Такая обработка является наиболее эффективным средством защиты окружающей среды клиента.

Требования к сбору, повторному использованию, переработке и восстановлению отходов устанавливаются местными регулирующими органами. Обратитесь в местный ответственный орган (например, к руководителю лаборатории) или к уполномоченному представителю для получения информации о применимых правилах утилизации.

Систему следует утилизировать по истечении срока эксплуатации, в соответствии с требованиями существующих федеральных законов и в соответствии с обязательными требованиями охраны окружающей среды. Для получения дополнительной информации об утилизации бывших в употреблении медицинских изделий свяжитесь с уполномоченным представителем изготовителя на территории Российской Федерации.

Сведения об очистке и дезинфекции

Очистку и/или дезинфекцию осуществляет квалифицированный техник или пользователь. Ситуации, требующие очистки и дезинфекции прибора, перечислены ниже.

- При разливе опасных жидкостей на прибор или в него.
- Перед любыми перемещениями.

Перед проведением разборки прибора по какой-либо причине, за исключением проникновения жидкости внутрь прибора, необходимо также проводить очистку и дезинфекцию. Эту операцию осуществляют квалифицированный техник. В этом случае обратитесь в сервисную службу уполномоченного представителя.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Процедура очистки

Биологические образцы, физиологические сыворотки, растворители, которые могут привести к повреждению прибора, должны храниться вдали от внешней поверхности прибора.

Наружные поверхности прибора следует регулярно протирать влаговпитывающей салфеткой.

При загрязнении – протереть влаговпитывающей салфеткой, пропитанной 70% раствором изопропанола.

Если внутрь прибора проникла какая-либо жидкость, квалифицированный специалист должен провести процедуру очистки и дезинфекции. Обратитесь в авторизованную сервисную службу.

В случае попадания любой разлитой жидкости в прибор, его необходимо отключить от сети, видимые поверхности прибора необходимо немедленно очистить и дезинфицировать. Прибор может быть разобран для проведения очистки и дезинфекции только специалистом авторизованной сервисной службы.

Процедура дезинфекции

Очень важно проводить процедуры дезинфекции прибора перед выполнением определенных процессов, чтобы предотвратить любой риск инфицирования.

Дезинфекцию прибора следует проводить при следующих обстоятельствах:

• В случае разлива и просачивания потенциально загрязняющих жидкостей, которые разливаются во время и после окончания работы прибора.
• Во время подготовки прибора к хранению или транспортировке.
• Перед проведением обслуживания или ремонта специалистом авторизованной сервисной службы.
• При выводе из эксплуатации.

Для дезинфекции прибора выполните следующие операции:
• Выключите прибор, отключите его от сети и подождите, пока прибор остынет.
• В случае утечки жидкости впитайте ее с помощью одноразового абсорбирующего материала (например, бумажным полотенцем, марлей или тканью).
• Поверхность дезинфицируется с помощью неагрессивного дезинфицирующего раствора (например, 70% раствором изопропанола), безворсовую ткань погружают в дезинфицирующее средство до тех пор, пока она полностью не станет влажной, после производится очистка поверхности.
• Впитайте дезинфицирующий раствор одноразовым материалом.
• Для устранения возможного запаха и остатков опасных химических компонентов протрите поверхность салфеткой.
• Дайте поверхностям высохнуть.
• **Утилизируйте загрязненные в ходе дезинфекции чистящие материалы в контейнер для биологических отходов.**

Исследования на ЭМС и электробезопасность

Оборудование прошло испытания на соответствие стандартам и нормативным документам: ГОСТ Р МЭК 61326-1-2014 Оборудование электрическое для измерения, управления и лабораторного применения. Требования к электромагнитной совместимости. Часть 1. Общие требования, ГОСТ Р МЭК 61326-2-6-2014 Оборудование электрическое для измерения, управления и лабораторного применения. Требования электромагнитной совместимости. Часть 2-6.
Частные требования.
Система прошла испытания на соответствие стандартам IEC 61010-1.

Ожидаемые и предсказуемые побочные эффекты, связанные с применением медицинского изделия по назначению

Не применимо. Побочных эффектов при применении медицинского изделия для диагностики in vitro не выявлено.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Информация о наличии в медицинском изделии материалов животного и (или) человеческого происхождения

Не применимо. Данное медицинское изделие для диагностики in vitro не содержит материалов животного и (или) человеческого происхождения.

Сведения об аналитической эффективности и чувствительности

Не применимо. Зависит от конкретного набора реагентов, см. инструкции к наборам реагентов.

Сведения о диагностической чувствительности и специфичности

Не применимо. Зависит от конкретного набора реагентов, см. инструкции к наборам реагентов.

Информация о биологическом референтном интервале применения медицинского изделия

Не применимо. Зависит от конкретного набора реагентов, см. инструкции к наборам реагентов.

Информация об интерферирующих веществах или ограничениях, связанных с пробой, которые могут повлиять на результат исследования

Не применимо. Зависит от конкретного набора реагентов, см. инструкции к наборам реагентов.

Информация о характеристиках аналитической эффективности

Исследование прецизионности:

Пятидневное прецизионное исследование было проведено в соответствии с директивой CLSI EP15-A3 при помощи набора недериватизированных растворов для анализа методом тандемной масс-спектрометрии NeoBase 2 и системы QSight 225MD. Результаты проверки прецизионности образца для QSight 225 MD соответствовали критериям приемлемости исследования для всех типов аналитов и уровней пробы, а также полученные профили прецизионности для конкретных аналитов были близки с выше указанным профилями двацатидневной прецизионности с системой QSight 210 .

Спецификация вариации внутри партии при различных концентрациях аналита (мкмоль/л).

Аминокислоты, кроме Asa (мкмоль/л)	**CV% в пределах партии**
<3 (постоянное SD)	1,7SD
5	≤34%
15	≤24%
Asa (мкмоль/л)	**CV% в пределах партии**
<3 (постоянное SD)	1,02SD
3	≤34%
≥5	≤24%
SA (мкмоль/л)	**CV% в пределах партии**
<2 (постоянное SD)	0,68 SD
2	≤34%
≥4	≤24%
Свободный карнитин и ацилкарнитины (мкмоль/л)	**CV% в пределах партии**
<0,5 (постоянное SD)	0,17 SD
0,5	≤34%
≥1	≤24%
Лизофосфолипиды (LPC) (мкмоль/л)	**CV% в пределах партии**

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

<0,5 (постоянное SD)	0,17 SD
0,5	≤34%
≥1	≤24%
ADO (мкмоль/л)	**CV% в пределах партии**
<2 (постоянное SD)	0,68 SD
2	≤34%
≥4	≤24%

Исследование повторяемости

Результаты исследования повторяемости Системы демонстрируют, что параметр соответствует критериям приемлемости исследования для всех типов аналитов и уровней пробы. Коэффициент вариации находится в допустимых пределах (<20% КВ).

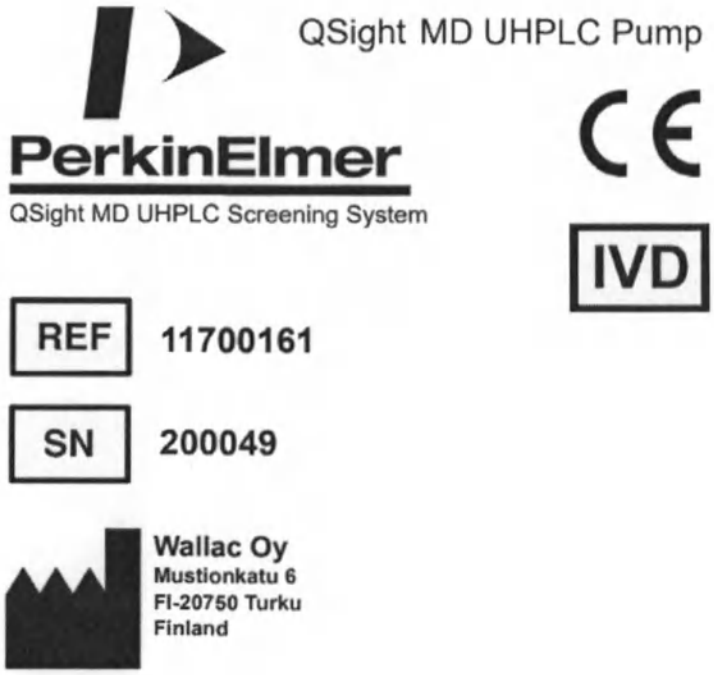
Исследование перенесенного остатка:
Результаты переноса аналита (резерпин) с высокой и низкой концентрацией с помощью прибора QSight показал, что резерпин не имеет эффекта перенесенного остатка. Средний перенос аналита от пробы с высоким содержанием к пробе с низким содержанием пределах критериев приемлемости. Согласно спецификации, процент последовательного загрязнения образцов должен быть менее 1%. (Оценка перенесенного остатка в клинических испытаниях не проводилась).

Сведения об упаковке и маркировке

Описание упаковки
Медицинское изделие «Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии» упаковано в деревянные ящики и картонные коробки.

Маркировка транспортной упаковки
1. Насос для УВЭЖХ QSight 225 MD (QSight MD UHPLC Pump)
Этикетка для коробки

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Made in The Netherlands

QSight MD UHPLC Pump	Насос для УВЭЖХ QSight 225 MD (QSight MD UHPLC Pump)
PerkinElmer	PerkinElmer
QSight MD UHPLC Screening System	Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System»
IVD	Для диагностики in vitro
REF	НОМЕР ПО КАТАЛОГУ
SN	СЕРИЙНЫЙ НОМЕР
Wallac Oy	Wallac Oy
Mustionkatu 6	Мустионкату 6
FI-20750 Turku	FI-20750 Турку
Finland	Финляндия
Made in The Netherlands	Сделано в Нидерландах

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

2. Колоночный термостат QSight MD (QSight Column Oven MD)
Этикетка для коробки



QSight MD Column Oven	Колоночный термостат QSight MD (QSight Column Oven MD)
PerkinElmer	PerkinElmer
QSight MD UHPLC Screening System	Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System»
IVD	Для диагностики in vitro
REF	НОМЕР ПО КАТАЛОГУ
SN	СЕРИЙНЫЙ НОМЕР
Wallac Oy	Wallac Oy
Mustionkatu 6	Мустионкату 6
FI-20750 Turku	FI-20750 Турку
Finland	Финляндия
Made in The Netherlands	Сделано в Нидерландах

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

4. Автосемплер для УВЭЖХ QSight MD (QSight MD UHPLC Autosampler)
Этикетка для коробки



PerkinElmer	PerkinElmer
PALSYSTEM	PALSYSTEM
MAC Address	MAC-адрес
00-14-2D-A0-3E-C8	00-14-2D-A0-3E-C8
SNo:	Серийный номер:
Country of Origin: Switzerland	Страна происхождения: Швейцария

Дополнительная маркировка на транспортной упаковке для Российской Федерации
Маркировка для транспортной упаковки:

Наименование:
«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии»

Назначение:
«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии» предназначена для качественной идентификации и количественного определения соединений в клинических образцах путем разделения образца на простые аналиты с помощью УВЭЖХ, с последующей ионизацией соединений в электроспрее и разделения полученных ионов с помощью электрического поля в соответствии с их массой. Система пригодна для применения в клинических условиях и должна эксплуатироваться квалифицированным лабораторным персоналом. Устройство работает от сети (на переменном токе), при минимальном участии техника, некоторые этапы анализа автоматизированы.

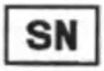
Производитель
Wallac Oy (Валлак Ою), Финляндия
Mustionkatu 6, FI-20750, Turku, Finland
(Мустионкату 6, FI-20750, Турку, Финляндия)
Тел: 358-(0)2-267 8111
Факс: 358-(0)2-267 8357

Уполномоченный представитель на территории Российской Федерации:
Акционерное общество «ПРИБОРЫ», Российская Федерация
109028, ГОРОД МОСКВА, ПЕР.ПЕВЧЕСКИЙ, Д.4, СТР.1, ПОМЕЩ.I, КОМНАТА 10
Тел.: 8 (495) 937-45-94/ 8 (495) 937-45-92
E-mail: info@pribori.com

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Регистрационное удостоверение: <указывается дата и номер регистрационного удостоверения>

 гггг

 xxxxxxxx



Масса брутто: _____ г
Масса нетто: _____ г

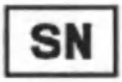


Наименование:
«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии»
Компонент:
Масс-спектрометр QSight 225 MD (QSight 225 MD Mass spectrometer)

 Производитель
Wallac Oy (Валлак Ою), Финляндия
Mustionkatu 6, FI-20750, Turku, Finland
(Мустионкату 6, FI-20750, Турку, Финляндия)
Тел: 358-(0)2-267 8111
Факс: 358-(0)2-267 8357

Уполномоченный представитель на территории Российской Федерации:
Акционерное общество «ПРИБОРЫ», Российская Федерация
109028, ГОРОД МОСКВА, ПЕР.ПЕВЧЕСКИЙ, Д.4, СТР.1, ПОМЕЩ.I, КОМНАТА 10
Тел.: 8 (495) 937-45-94/ 8 (495) 937-45-92
E-mail: info@pribori.com
Регистрационное удостоверение: <указывается дата и номер регистрационного удостоверения>

 гггг

 xxxxxxxx



Масса брутто: _____ г
Масса нетто: _____ г



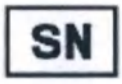
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Наименование:
«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии»
Компонент:
Автосемплер для УВЭЖХ QSight MD (QSight MD UHPLC Autosampler)


Производитель
Wallac Oy (Валлак Ою), Финляндия
Mustionkatu 6, FI-20750, Turku, Finland
(Мустионкату 6, FI-20750, Турку, Финляндия)
Тел: 358-(0)2-267 8111
Факс: 358-(0)2-267 8357

Уполномоченный представитель на территории Российской Федерации:
Акционерное общество «ПРИБОРЫ», Российская Федерация
109028, ГОРОД МОСКВА, ПЕР.ПЕВЧЕСКИЙ, Д.4, СТР.1, ПОМЕЩ.I, КОМНАТА 10
Тел.: 8 (495) 937-45-94/ 8 (495) 937-45-92
E-mail: info@pribori.com
Регистрационное удостоверение: <указывается дата и номер регистрационного удостоверения>


гггггг



xxxxxx



Масса брутто: _____ г
Масса нетто: _____ г



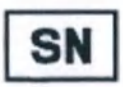
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Наименование:
«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии»
Компонент:
Насос для УВЭЖХ QSight 225 MD (QSight MD UHPLC Pump)


Производитель
Wallac Oy (Валлак Ою), Финляндия
Mustionkatu 6, FI-20750, Turku, Finland
(Мустионкату 6, FI-20750, Турку, Финляндия)
Тел: 358-(0)2-267 8111
Факс: 358-(0)2-267 8357

Уполномоченный представитель на территории Российской Федерации:
Акционерное общество «ПРИБОРЫ», Российская Федерация
109028, ГОРОД МОСКВА, ПЕР.ПЕВЧЕСКИЙ, Д.4, СТР.1, ПОМЕЩ.I, КОМНАТА 10
Тел.: 8 (495) 937-45-94/ 8 (495) 937-45-92
E-mail: info@pribori.com
Регистрационное удостоверение: <указывается дата и номер регистрационного удостоверения>


гггг-мм-дд



xxxxxx



Масса брутто: _____ г
Масса нетто: _____ г



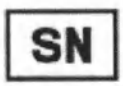
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Наименование:
«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии»
Компонент:
Колоночный термостат QSight MD (QSight Column Oven MD)


Производитель
Wallac Oy (Валлак Ою), Финляндия
Mustionkatu 6, FI-20750, Turku, Finland
(Мустионкату 6, FI-20750, Турку, Финляндия)
Тел: 358-(0)2-267 8111
Факс: 358-(0)2-267 8357

Уполномоченный представитель на территории Российской Федерации:
Акционерное общество «ПРИБОРЫ», Российская Федерация
109028, ГОРОД МОСКВА, ПЕР.ПЕВЧЕСКИЙ, Д.4, СТР.1, ПОМЕЩ.I, КОМНАТА 10
Тел.: 8 (495) 937-45-94/ 8 (495) 937-45-92
E-mail: info@pribori.com
Регистрационное удостоверение: <указывается дата и номер регистрационного удостоверения>


2021-02-22



210038

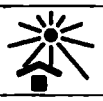


Масса брутто: _____ г
Масса нетто: _____ г



ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Таблица символов транспортной упаковки

Символ	Значение
	Номер по каталогу
	Серийный номер
	Медицинское изделие для диагностики in vitro
	Изготовитель
	Дата изготовления
	Обратитесь к инструкции по применению
	Знак соответствия стандартам качества и безопасности Европейского Сообщества
	Хрупкое, обращаться осторожно
	Не допускать воздействия солнечного света
	Беречь от влаги
	Не использовать при повреждении упаковки

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Маркировка медицинского изделия

1. Масс-спектрометр QSight 225 MD (QSight 225 MD Mass spectrometer)



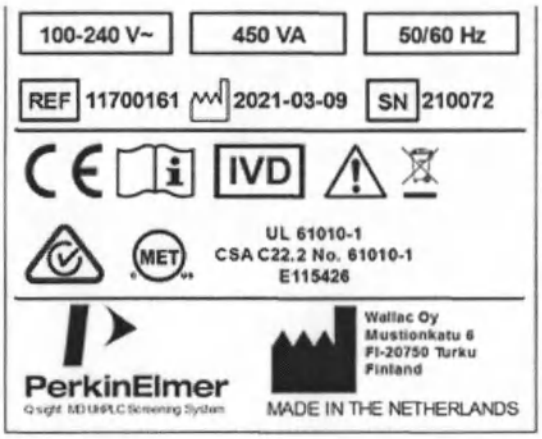
PerkinElmer	PerkinElmer
QSight 225 MD - Mass Spectrometer	Масс-спектрометр QSight 225 MD (QSight 225 MD Mass spectrometer)
REF	НОМЕР ПО КАТАЛОГУ
SN	СЕРИЙНЫЙ НОМЕР
Made in Finland	Сделано в Финляндии
Wallac Oy, Mustionkatu 6	Wallac Oy, Мустионкату 6
FI-20750 Turku, Finland	FI-20750 Турку, Финляндия
FCC Compliance	Соответствие требованиям FCC
This device complies with Part 15 of the FCC Rules.	Данное устройство соответствует части 15 правил FCC.
Operation is subject to the following two conditions:	Эксплуатация осуществляется при соблюдении следующих двух условий:
1) this device may not cause harmful interference, and	1) данное устройство не должно вызывать вредных помех, и
2) this device must accept any interference received, including interference that may cause undesired operation.	2) данное устройство должно выдерживать любые принимаемые помехи, включая помехи, которые могут вызвать нежелательную работу.
CAN ICES-1 (A) / NMB-1 (A)	CAN ICES-1 (A) / NMB-1 (A)

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Rx Only	Для продажи только по рецепту врача
Warning	Предупреждение
Equipment needs be de-energized for 60 seconds to allow safe discharging of capacitors.	Оборудование необходимо обесточить на 60 секунд для безопасной разрядки конденсаторов.
190-240V- 50/60HZ 12A	190-240В- 50/60 Гц 12А

2. Насос для УВЭЖХ QSight 225 MD (QSight MD UHPLC Pump)

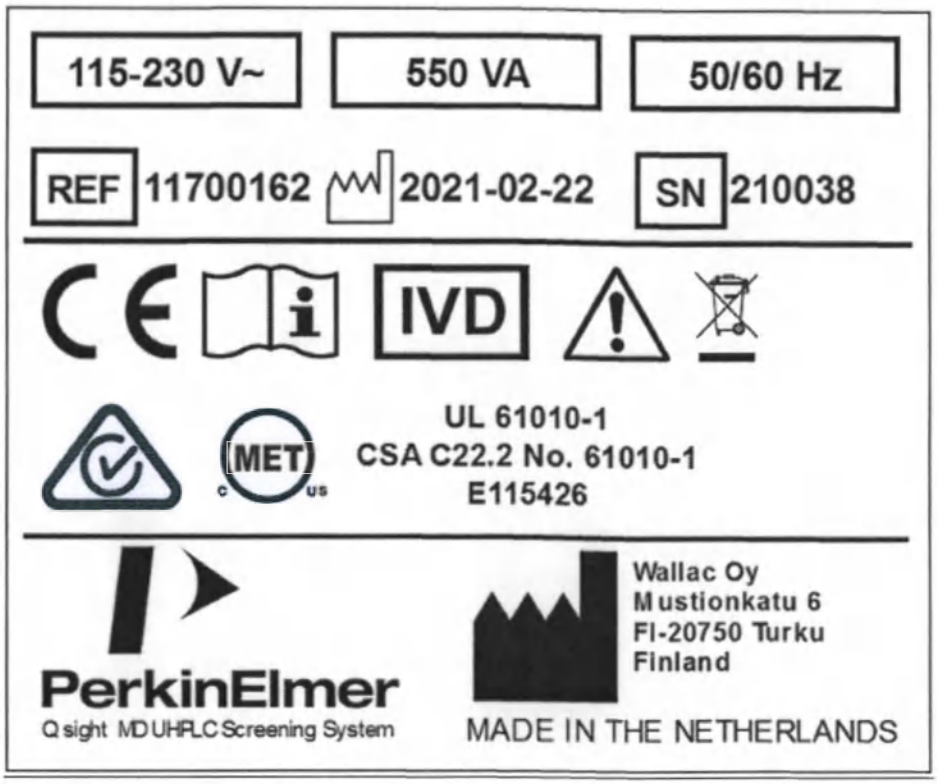




100-240 V~	100-240 D~
450 VA	450 DF
50/60 Hz	50/60 Гц
REF 11700161	Номер по каталогу 11700161
SN 210072	Серийный номер 210072
UL 61010-1 CSAC22.2 No. 61010-1	UL 61010-1 CSAC22.2 № 61010-1
E115426	E115426
PerkinElmer	PerkinElmer
Qsight MD UHPLC Screening System	Скрининговая система Qsight MD UHPLC Screening System
Wallac Oy Mustionkatu 6 FI-20750 Turku Finland	Wallac Oy Мустионкату 6 FI-20750 Turku Финляндия
MADE IN THE NETHERLANDS	СДЕЛАНО В НИДЕРЛАНДАХ

3. Колоночный термостат QSight MD (QSight Column Oven MD)

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

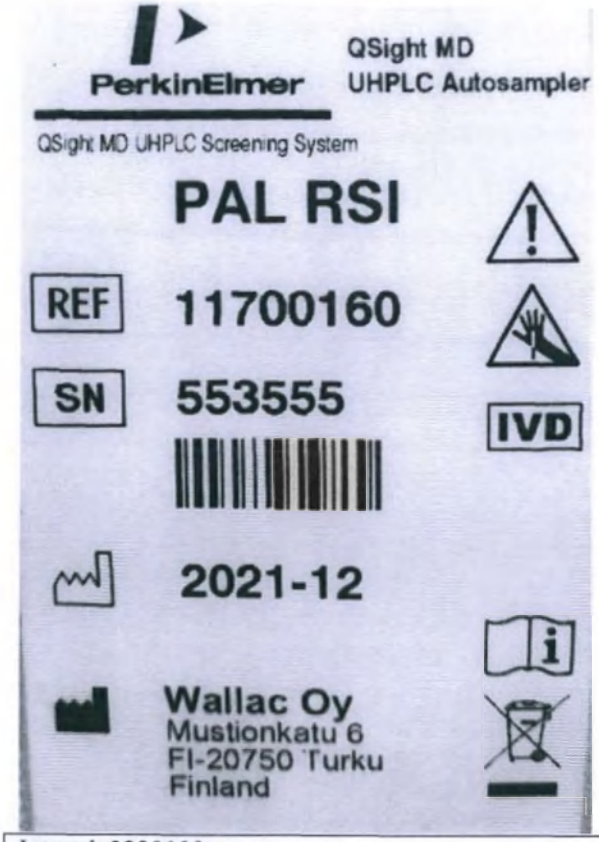


115-230 V~	115-230 В~
550 VA	550 ВА
50/60 Hz	50/60 Гц
REF	НОМЕР ПО КАТАЛОГУ
SN	СЕРИЙНЫЙ НОМЕР
UL 61010-1 CSAC22.2 No. 61010-1	UL 61010-1 CSAC22.2 № 61010-1
E115426	E115426
PerkinElmer	PerkinElmer
Qsight MD UHPLC Screening System	Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System»
Wallac Oy Mustionkatu 6 FI-20750 Turku Finland	Wallac Oy Мустионкату 6 FI-20750 Turku Финляндия
MADE IN THE NETHERLANDS	СДЕЛАНО В НИДЕРЛАНДАХ

4. Автосемплер для УВЭЖХ QSight MD (QSight MD UHPLC Autosampler)



ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



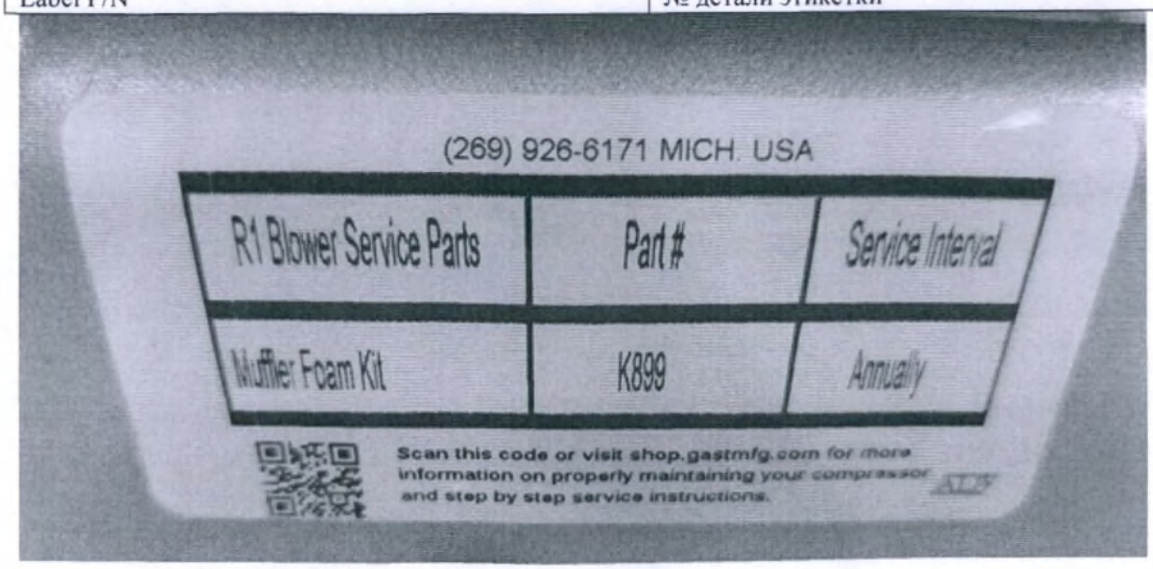
Intertek 3239100	Intertek 3239100
ETL LISTED	ВНЕСЕН В СПИСОК ETL
CONFORMS TO UL STD. 61010-1	СООТВЕТСТВУЕТ UL STD. 61010-1
CERTIFIED TO CAN/CSA STD. C22.2 No 61010-1	СЕРТИФИЦИРОВАН НА СООТВЕТСТВИЕ СТАНДАРТУ CAN/CSA STD. C22.2 № 61010-1
Qsight MD UHPLC Autosampler	Автосемплер для УВЭЖХ QSight MD (QSight MD UHPLC Autosampler)
Qsight MD UHPLC Screening System	Скрининговая система Qsight MD UHPLC Screening System
PAL RSI	PAL RSI
Wallac Oy	Wallac Oy
Mustionkatu 6	Мустионкату 6
FI-20750 Turku	FI-20750 Турку
Finland	Финляндия
Terminal	Терминал
PALbus	PALbus
Interface	Интерфейс
Fuse	Предохранитель
Power	Питание

5. SX Блоуер, 220 Вольт переменного напряжения (выхлопной насос) (SX Blower, 220VAC (Exhaust pump)

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



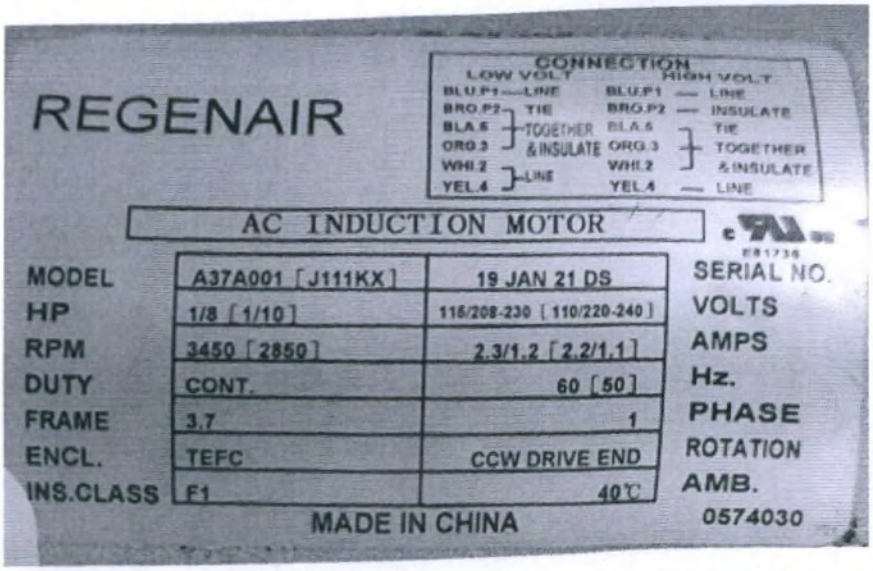
PerkinElmer	PerkinElmer
Shelton, CT 06484 USA	Шелтон, Коннектикут 06484 США
QSB M3 Exhaust Blower	Вытяжной вентилятор QSB M3
Part No.	Номер детали
Serial No.	Серийный номер
230V	230 В
1.5A	1,5 А
50/60HZ	50/60 Гц
Mfg Date: 03-Mar-22	Дата изготовления: 03-мар-22
Made in USA	Сделано в США
Label P/N	№ детали этикетки



MICH. USA	МИЧИГАН, США
R1 Blower Service Parts	Запчасти для обслуживания воздуходувок R1
Muffler Foam Kit	Комплект пены для глушителя

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Part #1	Деталь №1
K899	K899
Service Interval	Интервал обслуживания
Annually	Ежегодно



REGENAIR	REGENAIR
Connection	Подключение
Low volt.	Низкое напряжение.
BLU.P1 - Line	СИНИЙ.P1 - линия
BRO.P2 - Tie together & insulate	КОРИЧНЕВЫЙ.P2 - соединить и изолировать
BLA.5	ЧЕРНЫЙ.5
ORG.3	ОРАНЖЕВЫЙ.3
WHI.2 - Line	БЕЛЫЙ.2 - линия
YEL.4	ЖЕЛТЫЙ.4
High volt.	Высокое напряжение.
BLU.P1 - Line	СИНИЙ.P1 - Линия
BRO.P2 - Insulate	КОРИЧНЕВЫЙ.P2 - Изоляция
BLA.5 - Tie together & insulate	ЧЕРНЫЙ.5 - соединить и изолировать
ORG.3	ОРАНЖЕВЫЙ.3
WHI.2 - Line	БЕЛЫЙ.2 - Линия
YEL.4	ЖЕЛТЫЙ.4
Line	Линия
Tie together & insulate	Соединить и изолировать
Insulate	Изолировать
AC Induction Motor	Асинхронный двигатель переменного тока
MODEL	МОДЕЛЬ
HP	МОЩНОСТЬ
RPM	ОБ/МИН
DUTY	РЕЖИМ РАБОТЫ
FRAME	КАРКАС
ENCL.	КОЖУХ
INS.CLASS	КЛАСС ИЗОЛЯЦИИ
CONT.	НЕПРЕРЫВНЫЙ
TEFC	Электродвигатель закрытого типа с вентиляторным охлаждением (TEFC)
SERIAL NO.	СЕРИЙНЫЙ НОМЕР
VOLTS	НАПРЯЖЕНИЕ (В)
AMPS	СИЛА ТОКА (А)
Hz.	ЧАСТОТА (Гц)
PHASE	ФАЗА
ROTATION	ВРАЩЕНИЕ
AMB.	АМБ.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

19 JAN 21 DS	19 ЯНВ 21 ДС
CCW DRIVE END	ПРОТИВ ЧАСОВОЙ СТРЕЛКИ С ПРИВОДНОГО КОНЦА
MADE IN CHINA	СДЕЛАНО В КИТАЕ

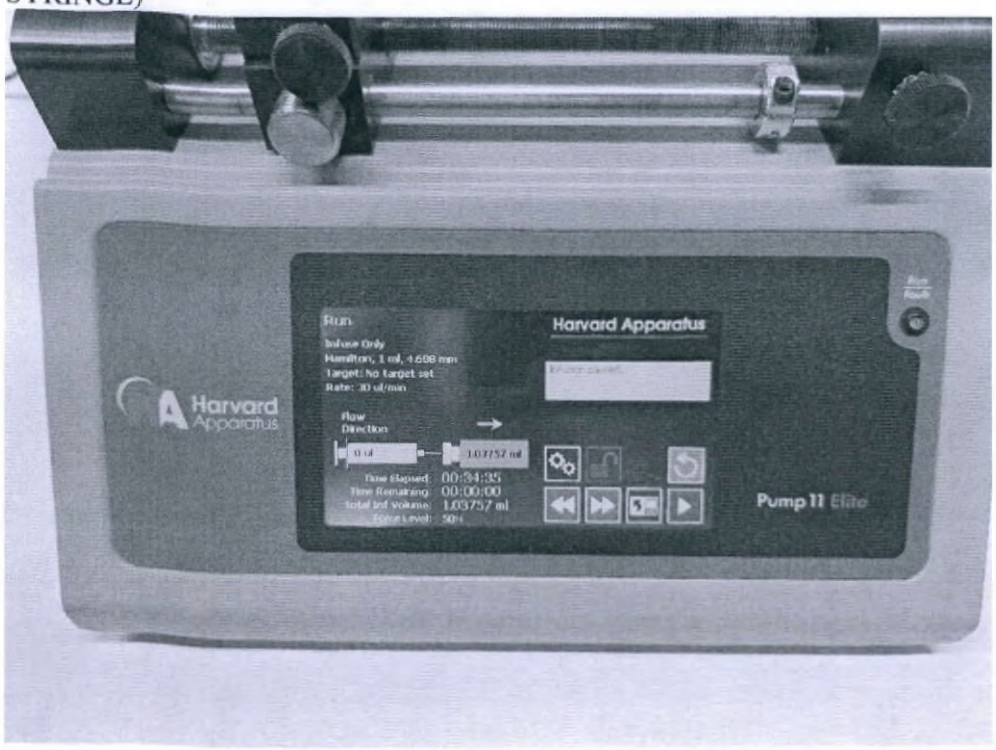


WARNING	ВНИМАНИЕ
THIS MOTOR IS THERMALLY PROTECTED AND WILL AUTOMATICALLY RESTART WHEN PROTECTOR RESETS. ALWAYS DISCONNECT POWER SUPPLY BEFORE SERVICING.	ДАННЫЙ ДВИГАТЕЛЬ ОСНАЩЕН ЗАЩИТОЙ ОТ ПЕРЕГРЕВА И АВТОМАТИЧЕСКИ ПЕРЕЗАПУСКАЕТСЯ ПРИ СБРОСЕ ЗАЩИТЫ. ВСЕГДА ОТКЛЮЧАЙТЕ ЭЛЕКТРОПИТАНИЕ ПЕРЕД ОБСЛУЖИВАНИЕМ.
GAST	GAST
A Unit of IDEX Corporation	Подразделение корпорации IDEX
(265)926-6171 MI USA	(265)926-6171 Мичиган, США
Made in US of foreign and domestic parts	Изготовлено в США из деталей иностранного и отечественного производства
REGENAIR	REGENAIR
MODEL: R1102K-01	МОДЕЛЬ: R1102K-01
CFM OPEN: 27 at 60 Hz; 23 at 50 Hz	Куб фт/мин в открытом состоянии: 27 при 60 Гц; 23 при 50 Гц
Max In. H2O Pressure: 28.5 at 60 Hz; 21 at 50 Hz	Макс. давление H2O: 28,5 при 60 Гц; 21 при 50 Гц
Max In. H2O Vacuum: 26.5 at 60 Hz; 20 at 50 Hz	Макс. разрежение H2O: 26,5 при 60 Гц; 20 при 50 Гц

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

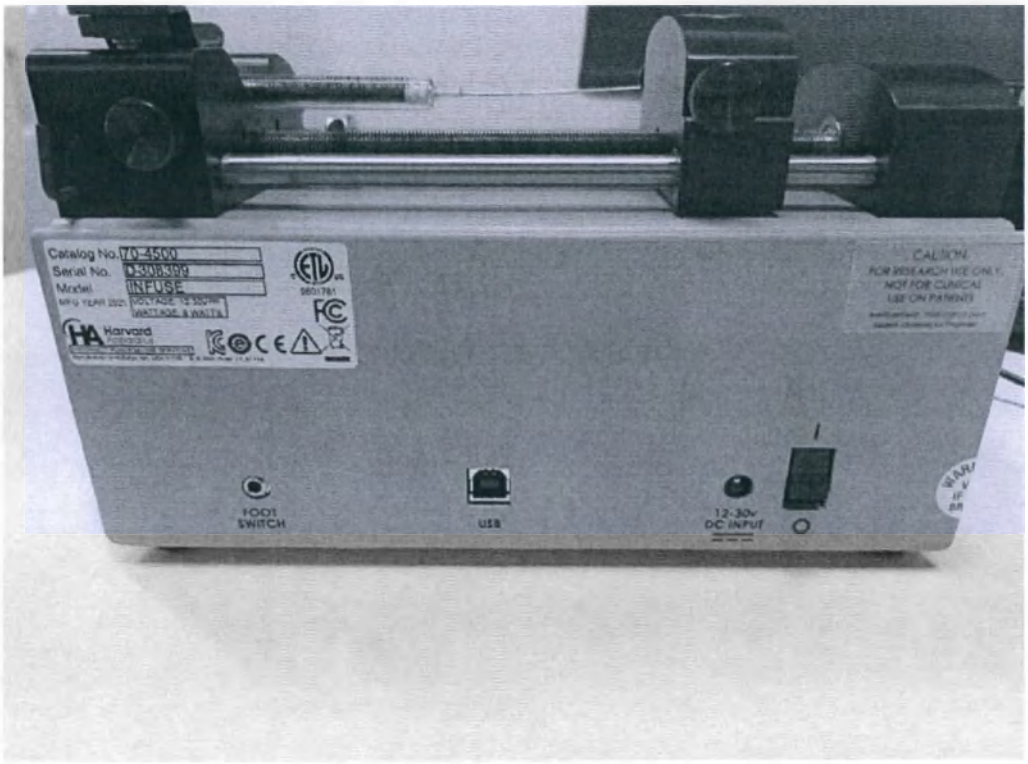


6. Стандартный инфузионный шприцевой насос 11 ELITE (STD- INFUSION PUMP 11 ELITE SYRINGE)



Harvard Apparatus	Harvard Apparatus
Run	Работает
Infuse Only	Только инфузия
Hamilton, 1 ml, 4.608 mm	Hamilton, 1 мл, 4,608 мм
Target: No target set	Цель: Цель не установлена
Rate: 30 ul/min	Подача: 30 мкл/мин
Infusion paused	Инфузия приостановлена
Flow Direction	Направление потока
Time Elapsed: 00:34:35	Прошло времени: 00:34:35
Time Remaining: 00:00:00	Осталось времени: 00:00:00
Total Inf Volume: 1.03757 ml	Общий объем инфузии: 1,03757 мл
Force Level: 50%	Уровень силы: 50%

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



Catalog No.	Каталожный номер
Serial No.	Серийный номер
Model	Модель
Infuse	Инфузия
MFG Year 2021	Год выпуска 2021
VOLTAGE 12-30V	НАПРЯЖЕНИЕ 12-30 В ПОСТОЯННОГО ТОКА
WATTAGE: 8	МОЩНОСТЬ: 8
CAUTION. FOR RESEARCH USE ONLY. NOT FOR CLINICAL USE ON PATIENTS	ВНИМАНИЕ. ИСПОЛЬЗОВАТЬ ТОЛЬКО В НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ ЦЕЛЯХ. НЕ ДЛЯ КЛИНИЧЕСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ НА ПАЦИЕНТАХ

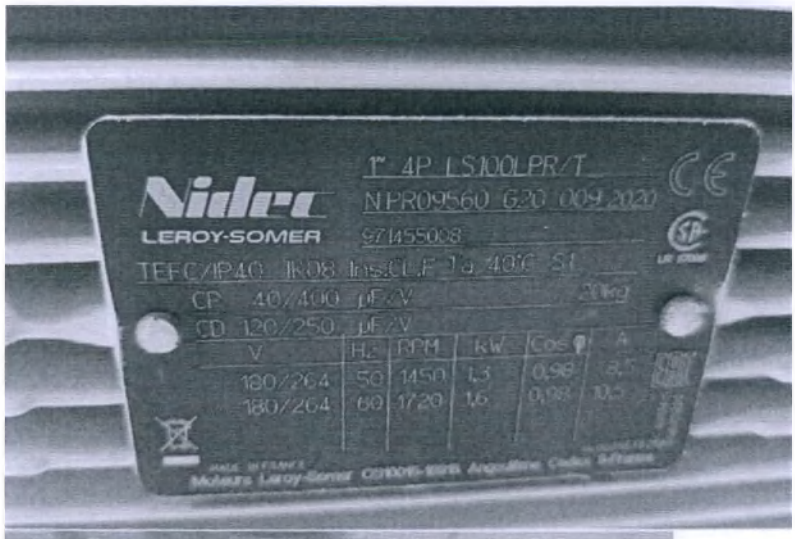
7. Би-роторный лопастной насос SV 40 (SV40 BI Rotary Vane Pump)

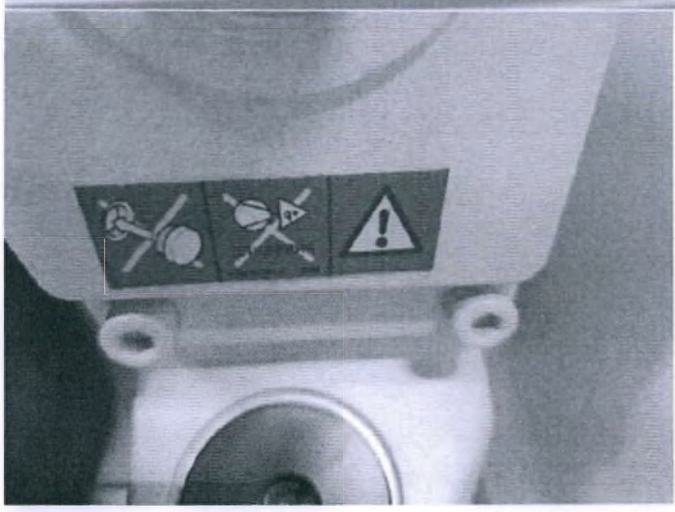
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU



SOGEVAG	SOGEVAG
SV 40 BI	SV 40 BI
NRTL Listed	NRTL Listed
Maximum abs. operation pressure in coninuous duty	Максимальное абсолютное рабочее давление в непрерывном режиме работы
1000 mbar	1000 мбар
V	В
Hz	Гц
kW	кВт
A	А
OPERATING VOLTAGE RANGE	ДИАПАЗОН РАБОЧЕГО НАПРЯЖЕНИЯ
It is mandatory to read the operating instructions	Обязательно ознакомьтесь с инструкцией по эксплуатации
Exhaust port	Выпускное отверстие
Lifting lug	Подъемная проушина
Inlet port	Впускное отверстие
Oil sight glass	Смотровое стекло для масла
Max	Макс.
Min	Мин
Oil filling	Заполнение маслом
Oil drain	Слив масла
Gas ballast	Газовый балласт
Open	Открыто
Closed	Закрыто
Leybold France	Leybold, Франция
LVO 200 Ester oil	LVO 200 Эфирное масло

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU





NIDER Leroy-Somer	NIDER Leroy-Somer
TEFC/IP40	Электродвигатель закрытого типа с вентиляторным охлаждением (TEFC)/IP40
V	В
Hz	Гц
RPM	об/мин
kW	кВт
cos Phi	cos Phi
A	A
Made in France	Сделано во Франции
Pressure	Давление

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU





Pump delivered with closed gas ballast	Насос поставляется с закрытым отделением для газового балласта
Open	Открыто
Closed	Закрыто
Before connecting the pump	Перед подключением насоса
Remove in following sequence	Снимите в следующей последовательности
With hose adapter	С переходником для шланга
REMOVE Silicon Cap	Снять силиконовый колпачок
With KF connection	С соединением KF
Remove KF blank flanges	Снять глухие фланцы KF
Hose clip to remove	Снять зажим для шланга
OPTION	ОПЦИЯ

8. Программное обеспечение QSight Simplicity 3Q MD, версия 2.0

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Number 70029873
Revision -
Created By Jouni Reivolahti



PerkinElmer

Copyright © 2021 Wallac Oy
All Rights Reserved. PKI

Number	Номер
Revision	Ревизия
Created By Jouni Reivolahti	Разработал Йоуни Рейволахти
Simplicity 3Q MD	Simplicity 3Q MD
Software version 2.0	Версия ПО 2.0
PerkinElmer	PerkinElmer
Copyright © 2021 Wallac Oy All Rights Reserved. PKI	© 2021 Wallac Oy Все права защищены. PKI

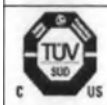
Таблица символов и обозначений

Символ	Название символа
IVD	Медицинское изделие для диагностики in vitro
REF	Номер по каталогу
SN	Серийный номер
⚠	Осторожно!

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

EC REP	Уполномоченный представитель в Европейском сообществе
	Изготовитель
	Дата изготовления
	Обратитесь к инструкции по применению
	Хрупкое, обращаться осторожно
	Не допускать воздействия солнечного света
	Беречь от влаги
	Не использовать при повреждении упаковки
	Переменный ток
	Выкл. (выключатель электропитания)
	Вкл. (выключатель электропитания)
	Клемма защитного заземления
	Осторожно, горячая поверхность!
	Осторожно, риск поражения электрическим током!
	Внимание! Биологическая опасность!
	Внимание! Острый инструмент!
	Внимание! Опасность раздавливания!
CE	Знак соответствия стандартам качества и безопасности Европейского Сообщества

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

	FCC: Федеральная комиссия по связи
	Маркировка соответствия требованиям, действующим в Австралии и Новой Зеландии (маркировка ACMA — RCM)
	Сертификационная маркировка MET Labs
	Безопасные и ответственные процедуры сбора, переработки и утилизации всех видов электронных отходов
	Сертификационный знак TUV SUD
	Сертификационный знак Intertek
	Сертификационный знак KC (Республика Корея)

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

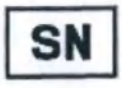
Дополнительная маркировка на медицинском изделии для Российской Федерации

Наименование:
«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии»
Компонент:
Масс-спектрометр QSight 225 MD (QSight 225 MD Mass spectrometer)


Производитель
Wallac Oy (Валлак Ою), Финляндия
Mustionkatu 6, FI-20750, Turku, Finland
(Мустионкату 6, FI-20750, Турку, Финляндия)
Тел: 358-(0)2-267 8111
Факс: 358-(0)2-267 8357

Уполномоченный представитель на территории Российской Федерации:
Акционерное общество «ПРИБОРЫ», Российская Федерация
109028, ГОРОД МОСКВА, ПЕР.ПЕВЧЕСКИЙ, Д.4, СТР.1, ПОМЕЩ.I, КОМНАТА 10
Тел.: 8 (495) 937-45-94/ 8 (495) 937-45-92
E-mail: info@pribori.com
Регистрационное удостоверение: <указывается дата и номер регистрационного удостоверения>


20XX



xxxxxxxx



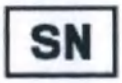
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Наименование:
«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии»
Компонент:
Автосемплер для УВЭЖХ QSight MD (QSight MD UHPLC Autosampler)


Производитель
Wallac Oy (Валлак Ою), Финляндия
Mustionkatu 6, FI-20750, Turku, Finland
(Мустионкату 6, FI-20750, Турку, Финляндия)
Тел: 358-(0)2-267 8111
Факс: 358-(0)2-267 8357

Уполномоченный представитель на территории Российской Федерации:
Акционерное общество «ПРИБОРЫ», Российская Федерация
109028, ГОРОД МОСКВА, ПЕР.ПЕВЧЕСКИЙ, Д.4, СТР.1, ПОМЕЩ.I, КОМНАТА 10
Тел.: 8 (495) 937-45-94/ 8 (495) 937-45-92
E-mail: info@pribori.com
Регистрационное удостоверение: <указывается дата и номер регистрационного удостоверения>


гггг-мм



xxxxxx



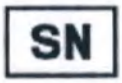
ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Наименование:
«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии»
Компонент:
Насос для УВЭЖХ QSight 225 MD (QSight MD UHPLC Pump)


Производитель
Wallac Oy (Валлак Ою), Финляндия
Mustionkatu 6, FI-20750, Turku, Finland
(Мустионкату 6, FI-20750, Турку, Финляндия)
Тел: 358-(0)2-267 8111
Факс: 358-(0)2-267 8357

Уполномоченный представитель на территории Российской Федерации:
Акционерное общество «ПРИБОРЫ», Российская Федерация
109028, ГОРОД МОСКВА, ПЕР.ПЕВЧЕСКИЙ, Д.4, СТР.1, ПОМЕЩ.I, КОМНАТА 10
Тел.: 8 (495) 937-45-94/ 8 (495) 937-45-92
E-mail: info@pribori.com
Регистрационное удостоверение: <указывается дата и номер регистрационного удостоверения>


гггг-мм-дд



xxxxxx



ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Наименование:
«Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» для проведения исследований in vitro на клинических образцах методом масс-спектрометрической идентификации аналитов с применением тандемной масс-спектрометрии и ультра высокоэффективной жидкостной хроматографии»
Компонент:
Колоночный термостат QSight MD (QSight Column Oven MD)


Производитель
Wallac Oy (Валлак Ою), Финляндия
Mustionkatu 6, FI-20750, Turku, Finland
(Мустионкату 6, FI-20750, Турку, Финляндия)
Тел: 358-(0)2-267 8111
Факс: 358-(0)2-267 8357

Уполномоченный представитель на территории Российской Федерации:
Акционерное общество «ПРИБОРЫ», Российская Федерация
109028, ГОРОД МОСКВА, ПЕР.ПЕВЧЕСКИЙ, Д.4, СТР.1, ПОМЕЩ.I, КОМНАТА 10
Тел.: 8 (495) 937-45-94/ 8 (495) 937-45-92
E-mail: info@pribori.com
Регистрационное удостоверение: <указывается дата и номер регистрационного удостоверения>


гггг-мм-дд



xxxxxx



Рекламация

Для получения технической консультации и поддержки просьба обращаться к уполномоченному представителю производителя на территории Российской Федерации:
Акционерное общество «ПРИБОРЫ» (АО «ПРИБОРЫ»)
109028, ГОРОД МОСКВА, ПЕР.ПЕВЧЕСКИЙ, Д.4, СТР.1, ПОМЕЩ.I, КОМНАТА 10
Тел.: 8 (495) 937-45-94/ 8 (495) 937-45-92
Электронная почта: info@pribori.com

В случае выявления побочных действий, не указанных в инструкции по применению или руководстве по эксплуатации медицинского изделия, нежелательных реакций при его применении, особенностей взаимодействия медицинских изделий между собой, фактов и обстоятельств, создающих угрозу жизни и здоровью граждан и медицинских работников при применении и эксплуатации медицинских изделий, необходимо направить сообщение, содержащее указанные сведения, в Федеральную службу по надзору в сфере здравоохранения.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU

Прошито и скреплено печатью

301

_____листов

Генеральный директор АО «Приборы»

_____Ефимов Л.Н.

ООО ЦИРМИ INFO@CIRMI.RU WWW.GOSZDRAVNADZOR.RU