

КОПИЯ

证明书

CERTIFICATE



中国国际贸易促进委员会
中国国际商会

China Council for the Promotion of International Trade
China Chamber of International Commerce

中国国际贸易促进委员会 中国国际商会

China Council for the Promotion of International Trade
China Chamber of International Commerce

证明书 CERTIFICATE



号码 No. 241100B0/H38913

兹证明：在所附文件上的杭州谱聚医疗科技有限公司的印章属实。

THIS IS TO CERTIFY THAT: the seal of HANGZHOU EXPECLIN MEDICAL TECHNOLOGY CO., LTD. on the annexed DOCUMENT is genuine.

China Council for the Promotion
of International Trade

签证员：

Authorized
Official:

Chen Yao

日期：2024年09月12日
(Date: Sep. 12, 2024)

证明书 Website for verifying the certificate: <http://www.rzccpit.com/validate.html>

УТВЕРЖДЕНО / APPROVAL

Hangzhou EXPECLIN Medical Technology Co., Ltd.

Организация / Organization

6th Floor, No.2466-1, Science&Technology Avenue,

Qingshanhu Street, Lin'an District, Hangzhou, Zhejiang Province, China

Адрес / Address

Managing Director

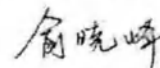
Должность / Occupation

俞晓峰 (Yu Xiaofeng)

Фамилия, имя / Surname, Name

03.09.2024

Дата ДД.ММ.ГГГГ / Date DD.MM.YYYY



Подпись / Signature

Руководство по эксплуатации на медицинское изделие

Operation manual for medical device

Система жидкостной хромато-масс-спектрометрии
для диагностики in vitro HELICON® Inspero 5200

Liquid chromatography mass spectrometry system
for in vitro diagnostics HELICON® Inspero 5200

Версия документа 1.0

Document Version 1.0



Производитель:

Hangzhou EXPECLIN Medical Technology Co., Ltd.

(ООО «Ханчжоуская медицинская технологическая компания Экспеклин»)

6th Floor, No.2466-1, Science&Technology Avenue, Qingshanhu Street, Lin'an District,
Hangzhou, Zhejiang Province, China

(Китай, провинция Чжэцзян, г. Ханчжоу, район Линьянь, квартал Циншаньху,
проспект Науки и техники, 2466-1, этаж 6)

Уполномоченный представитель производителя и дистрибьютор в Российской Федерации:

Общество с ограниченной ответственностью «Компания Хеликон» (ООО «Компания Хеликон»)

119619 Москва, Новомещерский проезд, дом №9, стр. 1, комн. 11





本附加证明书仅证明文书上的签名、印章人身份的真实性。请核对
所证明文书上所有印章。附加证明书不对文书内容予以证明。
This Apostille only certifies the authenticity of the signature, the capacity of
the person who has signed the public document and, where applicable,
the identity of the seal or stamp which the public document bears. This Apostille does not certify the content of the
document for which it was issued.
Visit www.mfa.gov.cn/APA/ and scan the QR code to verify the issuance of this Apostille.



11395903



附加证明书
APOSTILLE

(1961年10月5日海牙公约)
(Convention de La Haye du 5 octobre 1961)

1. 文书出具国: 中华人民共和国
Country: People's Republic of China

本公文书 This public document

2. 签署人
has been
signed by 陈尧
Chen Yao

3. 签署人身份
acting in the
capacity of 签证员
Authorized Official

4. 印鉴名称
bears the
seal/stamp of 中国国际贸易促进委员会
China Council for the Promotion of International Trade

证明 Certified

5. 签发地 北京
at Beijing

6. 签发日期 2024年09月13日
the September 13, 2024

7. 签发人 李燕, 一等秘书/ Li Yan, First Secretary
by 外交部领事司
Department of Consular Affairs of the Ministry of Foreign Affairs

8. 附加证明书编号 认字第240000416858号
No

9. 签发机关印鉴:
Seal/Stamp:

10. 签名:
Signature:

李燕



Перед работой прочитайте данное Руководство по эксплуатации

Обзор

Изделие, описанное в данном Руководстве по эксплуатации, прошло строгую проверку перед отправкой Производителем, чтобы гарантировать его качество. Чтобы обеспечить его безопасную и надежную работу и получить корректные результаты анализа, пользователь должен строго соблюдать требования по эксплуатации, перечисленные в данном Руководстве по эксплуатации. Кроме того, правильная транспортировка, хранение и установка, а также правильная эксплуатация и техническое обслуживание способствуют безопасной и нормальной работе изделия.

В данном Руководстве по эксплуатации содержится информация об использовании Системы жидкостной хромато-масс-спектрометрии для диагностики *in vitro* HELICON® Inspero 5200, а также подробное описание ее состава, установки, эксплуатации и технического обслуживания. Руководство является точным справочным материалом для потенциальных пользователей, которые прошли обучение по эксплуатации Системы. Пользователь должен правильно понимать информацию по технике безопасности и предупреждения, указанные в данном Руководстве по эксплуатации, и применять их в реальной работе.

Предостережения и предупреждения

В данном Руководстве по эксплуатации приведена область применения Системы HELICON® Inspero 5200, а также способы ее запуска, эксплуатации и технического обслуживания. Необходимо отметить, что предупредительная информация в данном Руководстве по эксплуатации очень важна и может эффективно предотвратить некорректную эксплуатацию Системы.

Изделие, описанное в данном Руководстве по эксплуатации, было разработано, изготовлено и испытано с учетом соответствующих стандартов безопасности.

В данном Руководстве по эксплуатации имеются соответствующие предостережения и предупреждения. Такая информация отображается с помощью специальных значков с соответствующим пояснительным текстом. Предостережения и предупреждения, используемые в данном Руководстве по эксплуатации, объясняются *следующим* образом:

Символы, используемые в данном Руководстве по эксплуатации приведены ниже:

Символ	Описание
	Напоминающие метки и информация. Обозначает общую информацию для напоминания пользователям во время использования продукта или части данного Руководства по эксплуатации, требующие общего внимания.
	Знаки внимания и информация — указывает на важную информацию, требующую внимания при использовании продукта, или на разделы данного Руководства по эксплуатации, требующие особого внимания.
	Предупреждающие знаки и информация. Указывает на то, что система не может выполнять правильные измерения, если во время использования изделия не соблюдаются надлежащие меры безопасности, а в особо тяжелых случаях это может привести к серьезной травме или повреждению имущества.

Символы и надписи, используемые на маркировке Системы HELICON® Inspero 5200, приведены ниже:

Символ	Описание
	Внимание, опасность
	Внимание, горячая поверхность
	Биологическая опасность
	Внимание, опасное напряжение
	Изготовитель
	Медицинское изделие для диагностики <i>in vitro</i>

Символ	Описание
	Обратитесь к инструкции по применению или инструкции по применению в электронном виде
	Серийный номер
	Хрупкое, обращаться осторожно
	Не допускать воздействия солнечного света
	Беречь от влаги
	Температурный диапазон хранения и транспортировки
	Диапазон влажности хранения и транспортировки
	Диапазон атмосферного давления хранения и транспортировки
	Не утилизировать как бытовые отходы
	Обратитесь к инструкции
	Соответствует основным требованиям директив ЕС
LAN	Локальная сеть
I/O	Разъем ввода-вывода
Fore Pump	Разъем для подключения насоса бинарного ультравысокого давления
Source Gas 0.6 MPa	Разъем для подключения источника газа давлением 0,6 МПа
Exhaust Inlet	Впускной патрубок
Exhaust Outlet	Выпускной патрубок
CID Gas 0.1 MPa	Использование жидкого газа под давлением 0,1 МПа
ON	Включение
OFF	Выключение
Power	Электропитание
Communication	Коммуникация
	Соответствует основным требованиям директив Китая
	«Вкл.» (питание)
	«Выкл.» (питание)

Поставка и доставка

Транспортировку прибора возможно осуществлять всеми видами сухопутного, воздушного, морского и речного транспорта. При транспортировке зазор между прибором и упаковочной коробкой должен быть заполнен пенопластом для его защиты. При транспортировке убедитесь, что прибор защищен от попадания дождя, прямых солнечных лучей и коррозионно-активных веществ, закреплен во избежание тряски и ударов, а также не наклоняется в течение длительного времени.

Условия транспортировки: температура окружающей среды: от минус 20 °C до 55 °C; относительная влажность воздуха: от 5 % до 80 %; атмосферное давление: 78,9–106 кПа (592–795 мм рт. ст.).

Если после получения пользователю необходимо осуществить транспортировку прибора, то он должен быть упакован аналогично оригинальной упаковке. Условия транспортировки приведены выше.

При распаковке внимательно прочитайте соответствующую информацию на упаковочных материалах, чтобы убедиться в целостности прибора и отсутствии повреждений на нем. Рекомендуется сохранить внешнюю упаковку прибора для использования, когда прибор необходимо будет вернуть для ремонта.

Уведомление пользователя

Благодарим Вас за выбор Системы жидкостной хромато-масс-спектрометрии для диагностики in vitro HELICON® Inspero 5200 (далее по тексту читать как: «Система», «Система HELICON® Inspero 5200», «медицинское изделие», «прибор», «изделие»). Перед использованием Системы внимательно прочтите данное Руководство по эксплуатации. В данном Руководстве содержится важная информация и данные по ее использованию. Пользователь должен строго соблюдать требования Руководства для обеспечения нормальной работы прибора. В то же время предостережения и предупреждения помогают пользователям правильно использовать прибор и получать корректные аналитические результаты.



Прибор маркирован символом , поэтому всегда обращайтесь к этому Руководству для избежания потенциальных опасностей. Если оборудование используется способом, не указанным в данном Руководстве, защита, обеспечиваемая оборудованием, может быть нарушена.

Утверждение

Правообладатель: Hangzhou EXPECLIN Medical Technology Co., Ltd.

Техническая поддержка

Для обеспечения нормальной эксплуатации и технического обслуживания данного прибора пользователь должен пройти соответствующие инструктаж и/или обучение. Для получения дополнительной информации по этому вопросу необходимо обратиться к уполномоченному представителю производителя в Российской Федерации (РФ).

Уполномоченный представитель производителя в РФ

Общество с ограниченной ответственностью «Компания Хеликон» (ООО «Компания Хеликон»)

Место нахождения (адрес юридического лица): 119619, г. Москва, Новомещерский проезд, дом 9, строение 1, комната 11.

Тел: 8 (800) 770-71-21, +7 (499) 705-50-50, + 7 (499) 769-51-60.

Факс: +7 (495) 930-00-84

E-mail: mail@helicon.ru

Содержание

Обзор	2
Предостережения и предупреждения	2
Поставка и доставка	3
Уведомление пользователя	4
Техническая поддержка	4
Уполномоченный представитель производителя в РФ	4
1. Общие сведения о медицинском изделии для диагностики <i>in vitro</i>	8
1.1. Наименование медицинского изделия для диагностики <i>in vitro</i>	8
1.2. Сведения о разработчике и производителе	9
1.3. Сведения о месте производства	9
1.4. Назначение	9
1.5. Функциональное назначение	10
1.6. Область применения	10
1.7. Описание целевого анализа	10
1.8. Специфическая патология, состояние или фактор риска, для обнаружения, определения или дифференцирования которого предназначено медицинское изделие для диагностики <i>in vitro</i>	10
1.9. Показания к применению	10
1.10. Противопоказания к применению	10
1.11. Возможные побочные действия	11
1.12. Тип анализируемого образца	11
1.13. Методика получения образцов сухих пятен крови	11
1.14. Хранение, транспортирование и утилизация образцов	12
1.15. Информация о потенциальных пользователях	12
1.16. Описание принципа действия медицинского изделия для диагностики <i>in vitro</i>	12
1.17. Перечень оборудования и материалов, которые требуются для поведения тестирования (анализа), но не содержащиеся в комплекте поставки	13
1.18. Дополнительные оборудования и материалы, которые требуются для поведения тестирования (анализа)	13
1.19. Описание процедуры тестирования	13
1.20. Перечень и описание материалов медицинского изделия для диагностики <i>in vitro</i> , вступающих в контакт с организмом пациента (телом человека)	13
1.21. Информация о наличии в медицинском изделии для диагностики <i>in vitro</i> материалов животного и (или) человеческого происхождения	13
1.22. Информацию о лекарственных препаратах и (или) фармацевтических субстанциях, входящих в состав медицинского изделия для диагностики <i>in vitro</i>	13
1.23. Информация о стерильности изделия	14
1.24. Техническое обслуживание и ремонт (ремонтпригодность)	14
1.25. Информация об обстоятельствах обращения потребителя к медицинскому работнику	14
1.26. Информация о ранее зарегистрированных вариантах исполнения	14
1.27. Информация о возможности применения для самотестирования	14
1.28. Условия эксплуатации, хранения и транспортировки	14
1.29. Порядок и условия утилизации или уничтожения медицинского изделия для диагностики <i>in vitro</i>	15
1.30. Данные о сроке службы медицинского изделия для диагностики <i>in vitro</i>	15
1.31. Гарантии производителя	15
1.32. Перечень применяемых национальных и международных стандартов с целью обеспечения безопасности, эффективности и качества медицинского изделия для диагностики <i>in vitro</i>	16
2. Обзор медицинского изделия для диагностики <i>in vitro</i>	18
2.1. Знакомство с прибором	18
2.2. Настройки параметров	18
2.3. Технические характеристики системы	20
2.3.1. Массогабаритные характеристики системы	20
2.3.2. Общие рабочие характеристики системы	21
2.3.3. Рабочие характеристики системы	22
2.3.4. Рабочие характеристики компонентов системы	23
2.3.5. Идентификационные данные программного обеспечения	23
2.3.6. Характеристики компьютера	24

2.3.7. Технические характеристики предохранителей.....	24
2.4. Метрологические характеристики системы.....	24
2.4.1. Метрологические характеристики.....	24
2.4.2. Основные технические характеристики.....	24
2.4.3. Показатели надежности.....	25
2.4.4. Знак утверждения типа.....	25
2.5. Меры предосторожности при использовании.....	25
2.5.1. Примечание по электрической безопасности.....	25
2.5.2. Уведомление о химической безопасности.....	25
3. Описание медицинского изделия для диагностики <i>in vitro</i>	26
3.1. Масс-спектрометр тройной квадрупольный.....	26
3.2. Основные компоненты масс-спектрометра тройного квадрупольного.....	28
3.2.1. Источник ионов.....	28
3.2.2. Светодиодный индикатор состояния.....	29
3.2.3. Вакуумный порт.....	29
3.2.4. Вакуумный насос.....	30
3.3. Составляющие части ВЭЖХ.....	30
3.3.1. Автосемплер с опцией охлаждения.....	30
3.3.2. Термостат колонок.....	31
3.3.3. Насос бинарный ультравысокого давления.....	32
4. Установка медицинского изделия для диагностики <i>in vitro</i>	34
4.1. Условия установки.....	34
4.1.1. Требования к окружающей среде.....	34
4.1.2. Требования к размещению.....	35
4.1.3. Требования к питанию.....	35
4.1.4. Проверка и техническое обслуживание защиты от перегрева.....	36
4.1.5. Проверка и обслуживание защиты программного обеспечения.....	36
4.1.6. Требования к источнику воздуха.....	36
4.1.7. Требования к выбросам выхлопных газов.....	37
4.1.8. Требования к сетевому подключению.....	37
4.1.9. Требования к компьютеру и принтеру.....	37
4.1.10. Требования к окружающей среде для электромагнитной совместимости.....	37
4.1.11. Требования к запуску.....	38
4.2. Этапы установки.....	39
4.2.1. Установка газовой линии.....	39
4.2.2. Установка ВЭЖХ.....	40
4.2.3. Установка вакуумного насоса.....	44
4.2.4. Монтаж электрокомпонентов.....	45
5. Ежедневная работа медицинского изделия для диагностики <i>in vitro</i>	46
5.1. Установка программного обеспечения.....	46
5.2. Подготовка перед использованием.....	46
5.3. Функции программного обеспечения.....	46
5.4. Настройки программного обеспечения при запуске.....	47
5.5. Проверка перед использованием.....	47
5.5.1. Вход пользователя.....	47
5.5.2. Регистрация программного обеспечения.....	47
5.5.3. Изменение пароля пользователя.....	50
5.5.4. Изменение информации о пользователе.....	51
5.5.5. Управление правами.....	52
5.5.6. Управление разрешениями.....	53
5.5.7. Конфигурация опций системы.....	55
5.6. Подготовка реагентов.....	57
5.7. Запуск прибора.....	57
5.8. Модуль мониторинга.....	58
5.9. Модуль сигнала тревоги.....	61
5.10. Запуск метода.....	63
5.10.1. Создание и импорт проекта.....	63
5.10.2. Создание и импорт последовательности.....	63

5.10.3. Редактирование метода LC («ЖХ»)	72
5.10.4. Редактирование метода MS («МС»)	79
5.10.5. Последовательность запуска	85
5.11. Обработка данных обычного анализа	86
5.11.1. Качественный анализ	87
5.11.2. Количественный анализ	95
5.12. Вывод отчета	160
5.13. Журнал аудита	162
5.14. Выключение прибора	163
6. Управление медицинским изделием для диагностики <i>in vitro</i> и настройка параметров	164
6.1. Модуль управления масс-спектрометром	164
6.2. Модуль управления хроматографией	165
6.3. Настройка параметров режима сканирования MS и MSMS	170
6.3.1. Режим сканирования MS («МС»)	170
6.3.2. Режим сканирования MSMS (MC-MC)	171
6.4. Оптимизация параметров MRM (мониторинга множественных реакций)	174
6.5. Калибровка разрешения и оси масс	182
6.6. Настройка положительного и отрицательного времени переключения	189
7. Плановое техническое обслуживание медицинского изделия для диагностики <i>in vitro</i>	191
7.1. Очистка поверхности инструментов, техническое обслуживание и дезинфекция	191
7.2. Обслуживание капилляров ESI	191
7.3. Очистка конуса для отбора проб	192
7.4. Очистка трансмиссионного стержня	193
7.5. Техническое обслуживание сливной трубки	193
7.6. Замена предохранителя	193
7.6.1 Замена предохранителя насоса бинарного ультравысокого давления	193
7.6.2 Замена предохранителя автосемплера с опцией охлаждения	194
7.6.3 Замена предохранителя термостата колонок	194
7.7. Техническое обслуживание вакуумного насоса	195
7.8. Очистка источника ионов	195
7.9. Замена азота	196
7.10. Проверка безопасности и техническое обслуживание	196
8. Утилизация отходов	197
9. Общая информация об ошибках при эксплуатации медицинского изделия для диагностики <i>in vitro</i>	198
10. Дополнительная информация о медицинском изделии для диагностики <i>in vitro</i>	201
11. Калибровочные стандарты	204
12. Запасные части и расходные материалы прибора	204
13. Заявление производителя по электромагнитной совместимости (ЭМС)	206
14. Руководство пользователя специальным модулем «NBS Analyst»	208
14.1. Общее описание	208
14.2. Создание соединения	209
14.3. Создание элементов анализа	212
14.3.1. Элемент анализа дозирования (внутренних стандартов)	213
14.3.2. Элемент анализа концентрации	217
14.3.3. Элемент анализа уравнения	220
14.4. Создание количественного метода	224
14.4.1. Настройка параметров метода	224
14.4.2. Добавление элементов анализа	228
14.5. Пакетная обработка результатов анализа	235

1. Общие сведения о медицинском изделии для диагностики *in vitro*

1.1. Наименование медицинского изделия для диагностики *in vitro*

Система жидкостной хромато-масс-спектрометрии для диагностики *in vitro* HELICON® Inspiro 5200

Состав:

- 1) Масс-спектрометр тройной квадрупольный – 1 шт.;
- 2) Насос бинарный ультравысокого давления – 1 шт.;
- 3) Фильтр для растворителей входной – 5 шт.;
- 4) Трубка стальная с фитингами – 1 шт.;
- 5) Капилляры для растворителей – 5 шт.;
- 6) Ключ шестигранный 2,5 мм – 1 шт.;
- 7) Ключ шестигранный 4 мм – 1 шт.;
- 8) Ключ гаечный 5/16–1/4 – 1 шт.;
- 9) Генератор азота мембранного типа – 1 шт.;
- 10) Трубка для слива конденсата – 1 шт.;
- 11) Ключ инженерного отсека – 1 шт.;
- 12) Автосемплер с опцией охлаждения – 1 шт.;
- 13) Держатель для виал на 48 шт. – 2 шт.;
- 14) Трубка Ø1/16x0,13 – 1 шт.;
- 15) Драйвер на USB – 1 шт.;
- 16) Кабель I/O – 1 шт.;
- 17) Предохранитель 2,5 А – 2 шт.;
- 18) Комплект гаек с отверстием Ø1/16 и ферулы – 1 шт.;
- 19) Ферулы – 2 шт.;
- 20) Гайки с отверстием Ø1/16 – 2 шт.;
- 21) Емкость для промывки 250 мл – 1 шт.;
- 22) Инструмент для снятия игл – 1 шт.;
- 23) Термостат колонок – 1 шт.;
- 24) Источник химической ионизации при атмосферном давлении (APCI) – 2 шт.;
- 25) Вакуумный насос – 1 шт.;
- 26) Кабель питания C14 – 3P+PE – 1 шт.;
- 27) Кабель питания EUROSCHUKO – 1 шт.;
- 28) Ключ шестигранный 12 мм – 1 шт.;
- 29) Переходник для труб – 1 шт.;
- 30) Насосное масло 1 л – не более 6 шт.;
- 31) Шприцевой насос – 1 шт.;
- 32) Шприц 10 мл – 1 шт.;
- 33) Шприц 5 мл – 1 шт.;
- 34) Шприц 60 мл – 1 шт.;
- 35) Ключ шестигранный 2,5 мм – 1 шт.;
- 36) Подставка для растворителей – 1 шт.;
- 37) Модуль для слива отработанной жидкости (при необходимости) – 1 шт.;
- 38) Постколоночный кран-переключатель потоков – не более 2 шт.;
- 39) Кабель RS 232 – 3 шт.;
- 40) Переходник сетевой адаптер – не более 8 шт.;
- 41) Кабель питания – не более 8 шт.;
- 42) Коннектор шприца – не более 3 шт.;
- 43) Шприц объемом 1 мл – не более 3 шт.;
- 44) 8-портовый высокоскоростной сетевой коммутатор – 1 шт.;
- 45) Входная трубка из фторопласта Ø6 мм – 1 шт.;
- 46) Трубка из фторопласта Ø4 мм – 1 шт.;
- 47) Отводная PU трубка Ø10 мм – 1 шт.;
- 48) Отводная трубка Ø14 мм – 1 шт.;
- 49) Хомут Kf40 – 2 шт.;
- 50) Пинцет – 1 шт.;

- 51) Соединитель из полиэфирэфиркетона Ø1/16x0,13 ID – 1 шт.;
- 52) Трубка из полиэфирэфиркетона 3 м – 1 шт.;
- 53) Редуктор азота для баллона – 1 шт.;
- 54) Редуктор азота для генератора азота – 1 шт.;
- 55) Коннектор для редуктора азота – 1 шт.;
- 56) Переходник быстросъемный PEG – 1 шт.;
- 57) Быстросъемный Т-коннектор – 2 шт.;
- 58) Быстросъемный коннектор R1/4-Ø6 – 2 шт.;
- 59) Фильтр прямой очистки – 2 шт.;
- 60) Кабель Ethernet – не более 8 шт.;
- 61) Крестовая отвертка – 1 шт.;
- 62) Плоская отвертка – 1 шт.;
- 63) Лазерная указка – 1 шт.;
- 64) Наклейка с qr-кодом – 1 шт.;
- 65) Вакуумная трубка – 1 шт.;
- 66) Емкость для растворителя – 5 шт.;
- 67) Крышка емкости для растворителя – 5 шт.;
- 68) Сливная трубка – 1 шт.;
- 69) Тройник для сливной трубки – 1 шт.;
- 70) Коннектор из полиэфирэфиркетона (5 шт./уп.) – не более 5 шт.;
- 71) Соединение из нержавеющей стали Ø0,005 – 1 шт.;
- 72) Трубка из нержавеющей стали (2 шт./уп.) – 1 шт.;
- 73) Пластиковая емкость 10 л – 1 шт.;
- 74) Крышка для пластиковой емкости – 1 шт.;
- 75) Кожух для инструмента для замены уплотнений – 1 шт.;
- 76) Инструмент для замены уплотнений – 1 шт.;
- 77) Вials стекло 2 мл (100 шт./уп.) – не более 10 шт.;
- 78) Крышки для vials (100 шт./уп.) – не более 10 шт.;
- 79) Руководство по эксплуатации – 1 шт.;
- 80) Программное обеспечение на USB – 1 шт.

Наименование медицинского изделия «Система жидкостной хромато-масс-спектрометрии для диагностики *in vitro* HELICON® Inspero 5200» далее по тексту читать как: «Система», «Система HELICON® Inspero 5200», «медицинское изделие», «прибор», «изделие».

1.2. Сведения о разработчике и производителе

Hangzhou EXPECLIN Medical Technology Co., Ltd. (ООО «Ханчжоуская медицинская технологическая компания Экспеклин»).

Адрес: 6th Floor, No.2466-1, Science&Technology Avenue, Qingshanhu Street, Lin'an District, Hangzhou, Zhejiang Province, China.

1.3. Сведения о месте производства

Hangzhou EXPECLIN Medical Technology Co., Ltd. (ООО «Ханчжоуская медицинская технологическая компания Экспеклин»).

Адрес: 3th Floor, No.2466-1, Science&Technology Avenue, Qingshanhu Street, Lin'an District, Hangzhou, Zhejiang Province, China.

1.4. Назначение

Предназначен для определения аминокислот, ацилкарнитинов и их метаболитов в сухих пятнах крови для скрининга новорожденных на метаболические нарушения обмена аминокислот и жирных кислот методом жидкостной хроматографии с tandemной масс-спектрометрией. Для диагностики *in vitro*.

1.5. Функциональное назначение

Вспомогательное средство в диагностике *in vitro* для скрининга новорожденных на метаболические нарушения обмена аминокислот и жирных кислот методом жидкостной хроматографии с tandemной масс-спектрометрией.

1.6. Область применения

Клиническая лабораторная диагностика.

1.7. Описание целевого анализа

Предназначен для определения аминокислот, ацилкарнитинов и их метаболитов в сухих пятнах крови для скрининга новорожденных на метаболические нарушения обмена аминокислот и жирных кислот методом жидкостной хроматографии с tandemной масс-спектрометрией. Для диагностики *in vitro*.

В зависимости от типа фильтровальной бумаги и гематокрита пробы, объем крови на сухом пятне крови, предназначенном непосредственно для анализа (диск 3 мм в диаметре) колеблется между 2,2–3,3 мкл крови. Это позволяет проводить только полуколичественное определение аналитов, поэтому результаты этого скринингового метода не должны использоваться в качестве подтверждающего теста. Для постановки окончательного диагноза, результаты скрининга должны быть всегда подтверждены молекулярно-генетическими и иммуноферментными методами или с помощью анализа аминокислот.

1.8. Специфическая патология, состояние или фактор риска, для обнаружения, определения или дифференцирования которого предназначено медицинское изделие для диагностики *in vitro*

Предназначен для определения аминокислот, ацилкарнитинов и их метаболитов в сухих пятнах крови для скрининга новорожденных на метаболические нарушения обмена аминокислот и жирных кислот методом жидкостной хроматографии с tandemной масс-спектрометрией. Для диагностики *in vitro*.

Применяется с целью скрининга новорожденных для диагностики наследственных нарушений обмена веществ, прежде чем данные нарушения могут навредить здоровью и развитию ребенка в клинко-диагностических лабораториях. Позволяет проводить только полуколичественное определение аналитов, поэтому результаты этого скринингового метода не должны использоваться в качестве подтверждающего теста. Для постановки окончательного диагноза, результаты скрининга должны быть всегда подтверждены молекулярно-генетическими и иммуноферментными методами или с помощью анализа аминокислот.

К наследственным нарушениям, которые могут быть диагностированы методом tandemной масс-спектрометрии относятся: нарушения метаболизма аминокислот (фенилкетонурия и болезнь кленового сиропа), нарушения метаболизма жирных кислот (например, средних и длинноцепочечных ацил-СоАдегидрогеназы), а также органоацидемии. Эти заболевания вызваны наследственными дефектами ферментов, приводящими к снижению или подавлению ферментативной активности. Впоследствии, нерасщепленные вещества накапливаются в организме. Это может привести к накоплению токсических метаболитов, которые могут вызывать дефекты органов и развитие системных заболеваний (амино- и органоацидемии). Эти нарушения обмена веществ вызывают серьезные необратимые повреждения у детей уже в течение нескольких дней после рождения. В случае фенилкетонурии (ФКУ), это ведет к физической и умственной задержке развития. Зачастую, поскольку эти дефекты наследственные, болезни не излечимы, и терапия ограничивается симптоматическим лечением. Тем не менее, если болезнь была диагностирована на раннем этапе развития, т.е. в первые несколько дней жизни, дети, страдающие фенилкетонурией, в состоянии жить нормальной жизнью при соблюдении диеты.

Тирозинемия I типа ведет к накоплению токсических метаболитов (особенно сукцинилацетона), что обуславливает развитие тяжелой болезни печени в раннем детстве.

Лабораторный диагноз этих болезней ставится по значительно увеличенным или сниженным значениям маркеров в крови новорожденного. Для этой цели берется кровь из пятки на фильтровальную бумагу, высушивается и посылается в клинко-диагностическую лабораторию.

На данный момент, с развитием метода tandemной масс-спектрометрии, возможно отслеживать широкий спектр метаболических нарушений за одно исследование. Этот метод позволяет надежно и быстро определять широкий спектр целевых соединений и их концентраций.

1.9. Показания к применению

Используется для полуколичественного определения аминокислот, ацилкарнитинов, их метаболитов в сухих пятнах крови для скрининга новорожденных на метаболические нарушения обмена аминокислот и жирных кислот методом жидкостной хроматографии с tandemной масс-спектрометрией.

1.10. Противопоказания к применению

Отсутствуют.

1.11. Возможные побочные действия

Отсутствуют.

1.12. Тип анализируемого образца

Сухие пятна крови новорожденных.

1.13. Методика получения образцов сухих пятен крови

Для получения сухих пятен крови (СПК) используется тест-бланк №903 Whatman (Карта Whatman FTA Card для хранения и транспортировки биологического материала, производства «ДжиИ Хэлскеа Ю-Кей Лимитед», Великобритания, РУ № РЗН 2016/4591 от 12.08.2016, срок действия: бессрочно). Тест-бланк представляет собой карту с пунктами для внесения шариковой ручкой информации о пациенте и кругами, напечатанными с одной стороны (или с обеих сторон) пунктирной или точечной линией, для нанесения крови; внутренняя впитывающая часть представляет собой целлюлозный материал определенного химического и физического состава. На тест-бланке обозначены круглые зоны для нанесения образца крови (рисунок 1.1.).



Рисунок 1.1. Образец тест-бланка для взятия крови Whatman 903.

Тест-бланк используется для взятия и транспортировки биологического материала в лабораторию для анализа. Тест-бланк, благодаря специализированной целлюлозной пластине, выступает в качестве носителя цельной крови или другой биологической жидкости. Биологические молекулы адсорбируются на поверхности целлюлозы. Для адсорбции не требуется ни дополнительных реагентов, ни отдельной стадии очистки.

Требования к нанесению крови на тест-бланк:

Время абсорбции крови на тест-бланке.

Полный пунктирный круг содержит примерно 80–100 мкл крови. Для пятен, которые образуются при нанесении 100 мкл крови (с гематокритом $55 \% \pm 1 \%$), время абсорбции крови должно быть в среднем 12 с, диапазон 5–30 с.

Диаметр пятна крови и средний объем сыворотки в диске диаметром 3,2 мм.

Средний объем цельной крови для диска диаметром 3,2 мм, выбитого из пятна, образованного при нанесении 100 мкл крови с интактными эритроцитами и гематокритом 55 %, должен быть 3,1–3,2 мкл.

Подготовка к взятию крови:

Подготовка к взятию крови стандартна: медицинский персонал должен соблюдать правила стерильности, протирая место прокола раствором антисептика, используя одноразовые иглы-скарификаторы и перчатки.

Перед проведением неонатального скрининга у законного представителя новорожденного необходимо получить добровольное информированное согласие/отказ на проведение данного исследования. Заполненное информированное согласие/отказ хранится в медицинской организации, осуществившей взятие крови.

Получение сухого пятна крови:

У новорожденных кровь на неонатальный скрининг берут только из пятки, в исключительных случаях – из пальца (при невозможности взятия крови из пятки).

Образец крови берут не ранее, чем через 3 часа после кормления в возрасте 24–48 часов жизни у доношенного и на 7 сутки (144–168 часов) жизни у недоношенного новорожденного.

Образец должен быть взят перед трансфузионной терапией или экстракорпоральной мембранной оксигенации (ЭКМО). Если образец не был взят до введения трансфузионных средств, кровь берется не ранее чем через 48–72 часа после трансфузии. В случае, если недоношенному ребенку по состоянию здоровья может быть назначена трансфузионная терапия или ЭКМО, рекомендуется взятие крови до

проведения трансфузии, даже если возраст ребенка менее 144 часов. Если по достижении ребенком возраста 144 часов трансфузия не проводилась или проведена ранее, чем за 48–72 часа до взятия крови, то кровь берется заново, а тест-бланки, взятые ранее, утилизируются. В противном случае на исследование отправляются тест-бланки, полученные пред проведением трансфузии до достижения недоношенным ребенком возраста 144 часов.

Место прокола (пятка, палец) следует обработать стерильной салфеткой, смоченной 70% спиртом, после чего промокнуть сухой стерильной салфеткой.

Во избежание гемолиза крови обработанное место следует промокнуть сухой стерильной салфеткой. Взятие крови у новорожденного с признаками нарушения микроциркуляции и терморегуляции может привести к искажению результатов неонатального скрининга вследствие нарушения технологии взятия крови.

Место прокола должно быть расположено медиально от линии, проведенной от большого пальца до пятки, или латерально от линии, проведенной от мизинца до пятки. Глубина пунктирования не должна превышать 2 мм (рисунок 1.2.).

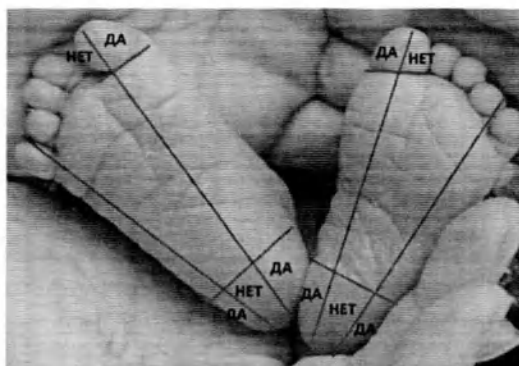


Рисунок 1.2. Место прокола (пятка) для взятия крови для получения образцов сухих пятен крови.

Если у ребенка нет кровотечения, сделайте второй прокол на другой части той же стопы или на другой стопе.

Первая капля, образовавшаяся на месте прокола, не используется – ее стирают сухим ватным тампоном. Последующие капли поочередно наносят в круги на впитывающую мембрану тест-бланка. Круги на бланке должны быть пропитаны равномерно, насквозь, без белых пятен на обратной стороне бланка. Для получения одного пятна требуется 80–100 мкл крови. После нанесения крови на тест-бланк образец выдерживают до полного высыхания в течение не менее 2-х часов при комнатной температуре, не соприкасаясь с другими тест-бланками. После высушивания тест-бланки складываются в индивидуальную упаковку (zip-пакет), не соприкасаясь и не накладываясь пятнами крови друг на друга.

1.14. Хранение, транспортирование и утилизация образцов

До отправки тест бланки хранятся при температуре не выше 25 °С.

Транспортировка тест-бланков осуществляется при температуре не выше 25 °С.

Срок хранения сухих пятен крови составляет 21 день при комнатной температуре (от 20 °С до 25 °С) или в прохладном месте (от 2 °С до 8 °С).

Для более длительного хранения до 6 месяцев защитите образцы от влаги и заморозьте ниже температуры минус 18 °С.

Использованные тест-бланки утилизируются как отходы класса Б согласно СанПиН 2.1.3684-21.

1.15. Информация о потенциальных пользователях

Врачи, технические специалисты клинических лабораторий, прошедшие специальное обучение или профессиональную подготовку по процедурам проведения анализов с использованием Системы.

1.16. Описание принципа действия медицинского изделия для диагностики *in vitro*

После первоначального разделения целевого соединения с помощью высокоэффективной жидкостной хроматографии оно преобразуется в заряженные ионы под действием ионного источника. Заряженные частицы (ионы-предшественники) проходят через конус для отбора проб и под действием потока газа и электрического поля проходят через трансмиссионный стержень, управляемый напряжением радиочастоты, входят в квадруполь Q1. Квадруполь Q1 экранирует целевые ионы-предшественники, и они попадают в реакционную ячейку столкновения и реагируют с реакционным газом, который преобразует ионы-предшественники в ионы-продукты, которые поступают в квадруполь Q2. Квадруполь Q2 экранирует целевые ионы-продукты, и экранированные ионы-продукты поступают в детектор для

генерации окончательного сигнала обнаружения.

Ионно-оптическая система помещена в вакуумную камеру, которая разделена на три уровня вакуума:

- 1 уровень – включает зону между конусом для отбора проб и трансмиссионным стержнем первого уровня (давление воздуха 1Е-2 Торр);
- 2 уровень – включает зону, в которой располагается трансмиссионный стержень второго уровня (давление воздуха 1Е-4 Торр);
- 3 уровень – включает квадруполь Q1, ячейку столкновений и квадруполь Q2, а также зону детектора (давление воздуха 1Е-6 Торр).

1.17. Перечень оборудования и материалов, которые требуются для поведения тестирования (анализа), но не содержащиеся в комплекте поставки

- Медицинское изделие «MassChrom Набор реагентов для ЖХ-МС/МС анализа аминокислот и ацилкарнитиннов в сухих пятнах крови (состав на 960 анализов)», производства «Хромсистемс Инструментс унд Ке-микалс ГмбХ», Германия (ПУ № РЗН 2018/7415 от 27.07.2018 г., срок действия: бессрочно);
- Медицинское изделие «Набор реагентов для анализа аминокислот и ацилкарнитиннов в сухих пятнах крови человека методом tandemной масс-спектрометрии (Neo screen 01), по ТУ 21.20.23-001-66475153-2022», производства ООО «ХромсистемсЛаб», Россия (ПУ № РЗН 2024/21871 от 15.01.2024 г., срок действия: бессрочно).

1.18. Дополнительные оборудования и материалы, которые требуются для поведения тестирования (анализа)

- шейкер с термостатом для экстракции и дериватизации проб, например медицинское изделие «Термошейкер PST-60HL-4», производства ООО «Биосан», Латвия (ПУ № ФСЗ 2008/01398 от 10.06.2021 г., срок действия: бессрочно);
- дозаторы пипеточные, 60-200 мкл, например медицинское изделие «Дозаторы пипеточные, одно- и многоканальные, «Лайт» по ТУ 9443-007-33189998-2007», производства АО «Термо Фишер Сайентифик», Россия (ПУ № ФСР 2007/01095 от 15.11.2016, срок действия: бессрочно);
- вытяжной шкаф;
- мерная колба вместимостью 50 мл.

Могут быть использованы другие медицинские изделия с аналогичными характеристиками, зарегистрированные в установленном порядке на территории Российской Федерации.

1.19. Описание процедуры тестирования

Процедура тестирования образцов проводится в строгом соответствии с инструкцией по применению медицинского изделия «MassChrom Набор реагентов для ЖХ-МС/МС анализа аминокислот и ацилкарнитиннов в сухих пятнах крови (состав на 960 анализов)», производства «Хромсистемс Инструментс унд Кемикалс ГмбХ», Германия (ПУ № РЗН 2018/7415 от 27.07.2018 г., срок действия: бессрочно) и «Набор реагентов для анализа аминокислот и ацилкарнитиннов в сухих пятнах крови человека методом tandemной масс-спектрометрии (Neo screen 01), по ТУ 21.20.23-001-66475153-2022», производства ООО «ХромсистемсЛаб», Россия (ПУ № РЗН 2024/21871 от 15.01.2024 г., срок действия: бессрочно).

1.20. Перечень и описание материалов медицинского изделия для диагностики *in vitro*, вступающих в контакт с организмом пациента (телом человека)

При использовании медицинского изделия по назначению в соответствии с руководством по эксплуатации его составляющие ни опосредованно, ни непосредственно с организмом пациента (телом человека) *не контактируют*.

Металлические части изделия изготовлены из коррозионностойких материалов.

1.21. Информация о наличии в медицинском изделии для диагностики *in vitro* материалов животного и (или) человеческого происхождения

В медицинском изделии для диагностики *in vitro* материалы животного и (или) человеческого происхождения *отсутствуют*.

1.22. Информацию о лекарственных препаратах и (или) фармацевтических субстанциях, входящих в состав медицинского изделия для диагностики *in vitro*

Медицинское изделие *не содержит* лекарственные препараты и (или) фармацевтические субстанции.

1.23. Информация о стерильности изделия

Медицинское изделие и его компоненты поставляются нестерильными. Стерилизации не подлежат.

1.24. Техническое обслуживание и ремонт (ремонтопригодность)

Подробные сведения о проведении технического обслуживания и ремонта (ремонтопригодности) медицинского изделия приведены в его Руководстве по эксплуатации.

1.25. Информация об обстоятельствах обращения потребителя к медицинскому работнику

При использовании медицинского изделия по назначению, указанному в Руководстве по эксплуатации, обращение пользователя к медицинскому сотруднику *не требуется*.

1.26. Информация о ранее зарегистрированных вариантах исполнения

Система жидкостной хромато-масс-спектрометрии для диагностики *in vitro* HELICON® Inspero 5200 на территории Российской Федерации процедуру государственной регистрации в качестве медицинского изделия для диагностики *in vitro* проходит впервые.

1.27. Информация о возможности применения для самотестирования

Не применимо.

1.28. Условия эксплуатации, хранения и транспортировки

1.28.1. Условия эксплуатации

Высота над уровнем моря: менее 2000 м;

Температура окружающей среды: от 18 °C до 25 °C;

Относительная влажность воздуха: не более 60 %.

Колебания напряжения питания не должны превышать номинальное напряжение питания ± 10 %.

Переходное избыточное давление относится ко II классу оборудования.

Уровень загрязнения: 2.

1.28.2. Условия хранения

Температура окружающей среды: от минус 20 °C до 55 °C;

Относительная влажность воздуха: от 5 % до 80 %;

Атмосферное давление: 78,9–106 кПа (592–795 мм рт. ст.).

Хранение в закрытом или внутреннем помещении прибора вместе с упаковкой, должно соответствовать *следующим* условиям:

1. В чистом помещении, аккуратно, без скопления воды, химических препаратов и коррозионных газов;
2. Хорошая вентиляция без источников загрязнений;
3. Защита прибора от прямых солнечных лучей и влажности.

Хранение прибора без упаковки также должно соответствовать указанным выше требованиям к температуре, относительной влажности воздуха и атмосферному давлению. Необходимо принять меры по защите от пыли и воды, такие как термоусадочная пленка и полиэтиленовые пакеты. Кроме того, между прибором и полом, стеной, потолком и т.д. должно быть достаточно свободного пространства, чтобы предотвратить нежелательные повреждения. Если прибор хранится более трех месяцев, обратитесь к сервисным инженерам по послепродажному обслуживанию для оценки прибора перед использованием.

По возможности сохраните упаковочный материал, чтобы его можно было использовать повторно в случае необходимости возврата или перевозки прибора.

1.28.3. Условия транспортировки

Температура окружающей среды: от минус 20 °C до 55 °C;

Относительная влажность воздуха: от 5 % до 80 %;

Атмосферное давление: 78,9–106 кПа (592–795 мм рт. ст.).

Транспортировка прибора чаще всего осуществляется наземным транспортом. При транспортировке зазор между прибором и упаковочной коробкой должен быть заполнен пенопластом для его защиты. При транспортировке убедитесь, что прибор защищен от попадания дождя, прямых солнечных лучей и коррозионно-активных веществ, закреплен во избежание тряски и ударов, а также не наклоняется в течение длительного времени.

1.29. Порядок и условия утилизации или уничтожения медицинского изделия для диагностики *in vitro*

После истечения срока службы и прекращения эксплуатации прибора утилизируйте его в соответствии с местным законодательством.

Все составляющие медицинского изделия, входившие в контакт с биологическими образцами, а также отработанные жидкости на территории Российской Федерации утилизируют как отходы класса Б (эпидемиологически опасные) – согласно требованиям СанПиН 2.1.3684-21; прибор и его электронные компоненты утилизируются как отходы класса Г – согласно требованиям СанПиН 2.1.3684-21.

Уничтожение осуществляется организациями, имеющими соответствующую лицензию, на специально оборудованных площадках, полигонах и в помещениях в соответствии с требованиями, предусмотренными существующими Федеральными законами, и с соблюдением обязательных требований по охране окружающей среды, при использовании методов, согласованных с территориальными органами, ответственными за санитарно-эпидемиологическое благополучие населения.

Очистка отработанных газов прибора

Для работы прибора используют азот высокой чистоты. Во время работы и анализа прибора большая часть выхлопных газов представляет собой азот, а небольшое количество – органические отработанные газы. После сброса выхлопных газов их следует отводить по специальной линии, проведя испытания в соответствии с национальными стандартами выбросов для соответствующих загрязнителей воздуха.

1.30. Данные о сроке службы медицинского изделия для диагностики *in vitro*

Срок службы прибора – 7 лет.

В соответствии с требованиями «Уведомления о выпуске Руководящих принципов технического обзора регистрации периода использования медицинских изделий» (№ 23 от 2019 г.) заявленные продукты должны быть объединены с характеристиками продукта и соответствовать GB/T 34986-2017 «Методы испытания ускоренного старения продукта». Ускоренное старение реализуется для основных компонентов, на которые влияет срок службы, при этом стареющие компоненты переустанавливаются в прототип и тестируются по мере необходимости для определения срока службы (периода эксплуатации) прибора.

С марта по май 2021 года Производитель проверял срок службы приборов в соответствии с вышеуказанными требованиями. Все проверенные изделия соответствуют техническим требованиям к продукции и показателям, указанным в схеме проверки, что свидетельствует о том, что данные приборы могут эксплуатироваться до 7 лет при нормальных условиях эксплуатации.

1.31. Гарантии производителя

Гарантийный срок – 1 год.

Гарантийный срок хранения прибора – 7 лет.

Производитель гарантирует отсутствие дефектов материалов и изготовления в течение одного года с даты поставки, при соблюдении условий эксплуатации, хранения и транспортировки. Гарантия включает ремонт или замену (при невозможности ремонта) неисправных деталей, узлов и частей.

Если прибор по какой-то причине перестал работать, обратитесь к уполномоченному представителю производителя в Российской Федерации. Повреждения прибора, вызванные его использованием не в соответствии с требованиями Руководства по эксплуатации, приводят к прекращению гарантии и освобождают Производителя от гарантийных обязательств. Гарантия производителя не распространяется на расходные части и материалы, вышедшие из строя вследствие их естественного износа.

Производитель не обязан выполнять гарантийный ремонт и/или обслуживание, если повреждения вызваны следующими факторами:

1. стихийные бедствия или другие причины, не зависящие от воли или действий Производителя;
2. в процессе эксплуатации, хранения и транспортировки (после поставки) нарушены правила эксплуатации (Руководство по эксплуатации), установленные Производителем, в том числе, но не ограничиваясь: эксплуатация осуществляется в условиях, не предназначенных для прибора (повышенная запыленность, влажность, повышенная или пониженная температура в помещении, эксплуатация вне помещения, др.);
3. на приборе существуют механические повреждения (удары, падение, небрежная эксплуатация и др.), следы жизнедеятельности насекомых и/или других животных, следы попадания жидкости, следы неавторизованного вмешательства, в том числе ремонт, техническое обслуживание и модификация прибора без авторизации Производителя;
4. повреждения при автоматическом тушении пожара, скачках напряжения или других отклонениях параметров электропитания, в том числе эксплуатация при нестабильном напряжении в электросети;

5. в процессе эксплуатации использованы некачественные реагенты и расходные материалы, в том числе неправильно хранящиеся, просроченные, несовместимые, либо использованы реагенты и расходные материалы с нарушением инструкции по их эксплуатации;
6. недостатки возникли в результате неисправности программного обеспечения, системных блоков компьютеров, мониторов, принтеров, сканеров, клавиатур, источников бесперебойного питания и прочего оборудования, приобретенного у сторонних поставщиков.

Если потребуется такое обслуживание и/или ремонт, они будут предоставляться на платной основе по отдельным договорам.

Гарантийный срок на замененные неисправные детали, узлы и части, которые были отремонтированы или заменены, устанавливается в каждом конкретном случае отдельно.

Неисправные детали, узлы и части после замены их исправными являются собственностью конечного пользователя, если иное не оговорено в договоре поставки.

Данная гарантия заменяет собой все иные явные или подразумеваемые гарантии, включая гарантии товарной пригодности или пригодности для определенных целей. Производитель не несет ответственности за косвенные, побочные, фактические или последующие убытки ни при каких обстоятельствах независимо от наличия или отсутствия уведомления Производителя о таких убытках.

1.32. Перечень применяемых национальных и международных стандартов с целью обеспечения безопасности, эффективности и качества медицинского изделия для диагностики *in vitro*

1.32.1. Перечень применяемых национальных стандартов на территории Российской Федерации (РФ)

Стандарт	Название национального стандарта на территории РФ
ГОСТ Р 50444–2020	Приборы, аппараты и оборудование медицинские. Общие технические требования
ГОСТ Р МЭК 61326-1–2014	Оборудование электрическое для измерения, управления и лабораторного применения. Требования 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. Медицинское оборудование для диагностики в лабораторных условиях
ГОСТ IEC 61010-1–2014	Безопасность электрических контрольно-измерительных приборов и лабораторного оборудования. Часть 1. Общие требования
ГОСТ IEC 61010-2-081–2013	Безопасность электрических контрольно-измерительных приборов и лабораторного оборудования. Часть 2-081. Частные требования к автоматическому и полуполупроводниковому лабораторному оборудованию для проведения анализов и других целей
ГОСТ IEC 61010-2-101–2013	Безопасность электрических контрольно-измерительных приборов и лабораторного оборудования. Часть 2-101. Частные требования к медицинскому оборудованию для лабораторной диагностики (IVD)
ГОСТ Р ИСО 15223-1–2023	Изделия медицинские. Символы, применяемые для передачи информации, предоставляемой изготовителем. Часть 1. Основные требования
ГОСТ Р EN 13612–2010	Оценка функциональных характеристик медицинских изделий для диагностики <i>in vitro</i>
ГОСТ IEC 62304–2022	Изделия медицинские. Программное обеспечение. Процессы жизненного цикла
ГОСТ Р МЭК 62366-1–2023	Изделия медицинские. Часть 1. Проектирование медицинских изделий с учетом эксплуатационной пригодности
ГОСТ Р ИСО/МЭК 12119–2000	Информационная технология. Пакеты программ. Требования к качеству и тестирование
ГОСТ Р ИСО/МЭК 9126–93	Информационная технология. Оценка программной продукции. Характеристики качества и руководства по их применению
ГОСТ Р ИСО 9127–94	Системы обработки информации. Документация пользователя и информация на упаковке для потребительских программных пакетов
ГОСТ 28195–89	Оценка качества программных средств. Общие положения
ГОСТ Р 51188–98	Защита информации. Испытания программных средств на наличие компьютерных вирусов. Типовое руководство
ГОСТ Р ИСО 18113-1–2015	Медицинские изделия для диагностики <i>in vitro</i> . Информация, предоставляемая изготовителем (маркировка). Часть 1. Термины, определения и общие требования

Стандарт	Название национального стандарта на территории РФ
ГОСТ Р ИСО 18113-3-2015	Медицинские изделия для диагностики in vitro. Информация, предоставляемая изготовителем (маркировка). Часть 3. Инструменты для диагностики in vitro для профессионального применения

1.32.2. Перечень применяемых международных стандартов

Стандарт	Название международного стандарта
EN 61326-1:2013	Электрооборудование для измерения, управления и лабораторного использования. Требования к электромагнитной совместимости. Часть 1. Общие требования
EN 61326-2-6:2013	Электрооборудование для измерения, управления и лабораторного использования. Требования к электромагнитной совместимости. Часть 2-6. Частные требования. Медицинское оборудование для диагностики in vitro
EN 61010-1:2010+A1:2019	Безопасность электрических контрольно-измерительных приборов и лабораторного оборудования. Часть 1. Общие требования. Изменение 1
EN 61010-2-101:2017	Безопасность электрических контрольно-измерительных приборов и лабораторного оборудования. Часть 2-101. Частные требования к медицинскому оборудованию для лабораторной диагностики (IVD)
EN ISO 9001:2015	Системы менеджмента качества. Требования
EN ISO 13485:2016	Изделия медицинские. Системы менеджмента качества. Требования для целей регулирования
EN ISO 14971:2012	Изделия медицинские. Применение менеджмента риска к медицинским изделиям
EN ISO 15223-1:2021	Изделия медицинские. Символы, применяемые в документации, предоставляемой производителем. Часть 1. Основные требования
EN 62304:2006 +A1:2015	Изделия медицинские. Программное обеспечение. Процессы жизненного цикла. Изменение 1
EN ISO 18113-1: 2011	Изделия медицинские для in vitro диагностики. Информация, предоставляемая производителем (этикетирование). Часть 1. Термины, определения и общие требования
EN ISO 18113-3:2011	Изделия медицинские для in vitro диагностики. Информация, предоставляемая производителем (этикетирование). Часть 3. Профессиональные инструменты для in vitro диагностики
EN ISO 20417:2021	Изделия медицинские. Информация, поставляемая изготовителем

2. Обзор медицинского изделия для диагностики *in vitro*

2.1. Знакомство с прибором

Система HELICON® Inspero 5200 имеет в своем составе детектор – масс-спектрометр, который основан на технологии тройной квадрупольной tandemной масс-спектрометрии, и предназначен для измерений содержания компонентов, входящих в состав органических и неорганических смесей веществ различной природы.

Внешний вид масс-спектрометра тройного квадрупольного показан на рисунке 2.1.

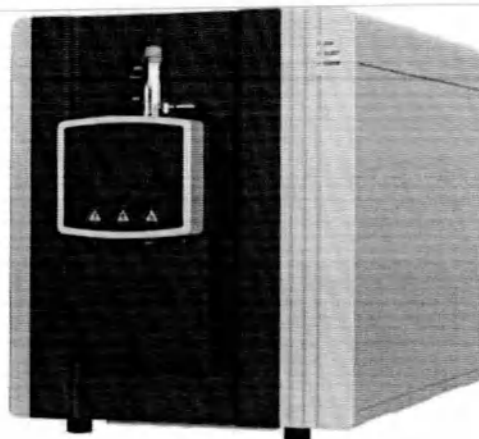


Рисунок 2.1. Внешний вида масс-спектрометра тройного квадрупольного.

В данном Руководстве по эксплуатации приведены подробные инструкции по установке, эксплуатации и техническому обслуживанию Системы HELICON® Inspero 5200, а также ее состав и их рабочие характеристики.

Система жидкостной хроматографии с tandemной масс-спектрометрией органично сочетает в себе физическо-химическое разделение методом хроматографии и возможности масс-спектрометра для масс-анализа. Данные Системы используются во многих областях, требующих высокой чувствительности и селективности, для качественного обнаружения и количественного определения потенциальных аналитов в сложных смесях.

Технология жидкостной хроматографии и tandemной масс-спектрометрии включает источник ионов, вакуумный интерфейс, высокоэффективную технологию передачи ионов (электростатическую линзу, многополюсник), технологию высокоскоростной реакционной ячейки столкновений, технологию радиочастотного привода и высоковольтный источник питания, технология обнаружения ионов, программное обеспечение для сбора и анализа данных.

2.2. Настройки параметров

Настройки параметров Системы HELICON® Inspero 5200 для режимов положительных и отрицательных ионов приведены в таблице 2.1.

Таблица 2.1. Настройки параметров Системы HELICON® Inspero 5200 для режимов положительных и отрицательных ионов

Компонент / параметр системы, размерность	Диапазон	Рекомендуемое значение	Примечание
Режим положительных ионов			
Капилляр высокого напряжения, кВ	От 0 до 6	5,5	Высокий расход жидкой фазы
		4,8	Низкий расход для шприцевого насоса
Расход распыляющего газа, л/мин	От 0 до 2	1,2	Высокий расход жидкой фазы
		0,1	Низкий расход для шприцевого насоса
Расход газа десольватации, л/мин	От 0 до 15	5,0	Высокий расход жидкой фазы
		2,0	Низкий расход для шприцевого насоса
Температура десольватации, °C	От 5 до 750	500	Высокий расход жидкой фазы
		300	Низкий расход для шприцевого насоса
Расход газа обратной промывки, л/мин	От 0 до 5	2	–
Температура интерфейса вакуума, °C	От 5 до 120	110	–
Напряжение перегородки, В	От 0 до 1500	600	–

Компонент / параметр системы, размерность	Диапазон	Рекомендуемое значение	Примечание
Напряжение на конусе для отбора проб, В	От 0 до 150	50	—
Наружная стенка трансмиссионного стержня 1, В	От 0 до 150	120	—
Трансмиссионный стержень 1, В	От 0 до 80	15	—
Передающая линза 1, В	От 0 до 50	12	—
Трансмиссионный стержень 2, В	От 0 до 10	8	—
Передающая линза 2, В	От 0 до 10	7	—
Трансмиссионный стержень 3, В	От 0 до 10	0,8	—
Передающая линза 3, В	От -10 до 10	0,5	—
Напряжение на пред-стержне MS1, В	От -50 до 0	-18	—
Энергия ионов MS1	От -10 до 0	-0,5	—
Входное напряжение ячейки столкновения, В	От -120 до 0	-40	Без столкновений
		-2	Столкновения
Энергия столкновений, В	От -120 до 0	-2	Без столкновений
		40	Столкновения
Выходное напряжение ячейки столкновения, В	От -120 до 0	-40	Без столкновений
		-2	Столкновения
Поток газа при столкновении, мл/мин	От 0 до 1	0	Без столкновений
		0,3	Столкновения
Напряжение на пред-стержне MS2, В	От -120 до 0	-12	—
Энергия ионов MS2	От -150 до 0	-3	—
Входное напряжение детектора, В	От -6000 до 0	-6000	—
Напряжение отклонения детектора, В	От -400 до 400	200	—
Напряжение множителя детектора, В	От 0 до 4000	2000	—
Режим отрицательных ионов			
Капилляр высокого напряжения, кВ	От -5 до 0	-4,5	Высокий расход жидкой фазы
		-4,0	Низкий расход для шприцевого насоса
Расход распыляющего газа, л/мин	От 0 до 2	1,2	Высокий расход жидкой фазы
		0,1	Низкий расход для шприцевого насоса
Расход газа десольватации, л/мин	От 0 до 15	5,0	Высокий расход жидкой фазы
		2,0	Низкий расход для шприцевого насоса
Температура десольватации, °C	От 5 до 750	500	Высокий расход жидкой фазы
		300	Низкий расход для шприцевого насоса
Расход газа обратной промывки, л/мин	От 0 до 5	2	—
Температура интерфейса вакуума, °C	От 5 до 120	110	—
Напряжение перегородки, В	От -1500 до 0	-600	—
Напряжение на конусе для отбора проб, В	От -150 до 0	-50	—
Наружная стенка трансмиссионного стержня 1, В	От -150 до 0	-120	—
Трансмиссионный стержень 1, В	От -80 до 0	-15	—
Передающая линза 1, В	От -50 до 0	-12	—
Трансмиссионный стержень 2, В	От -10 до 0	-8	—
Передающая линза 2, В	От -10 до 0	-7	—
Трансмиссионный стержень 3, В	От -10 до 0	-0,8	—
Передающая линза 3, В	От -10 до 10	-0,5	—
Напряжение на пред-стержне MS1, В	От 0 до 50	18	—
Энергия ионов MS1	От 0 до 10	0,5	—
Входное напряжение ячейки столкновения, В	От 0 до 120	40	Высокий расход жидкой фазы
		2	Низкий расход для шприцевого насоса
Энергия столкновений, В	От 0 до 120	2	Высокий расход жидкой фазы
		40	Низкий расход для шприцевого насоса
Выходное напряжение ячейки столкновения, В	От 0 до 120	40	Высокий расход жидкой фазы
		2	Низкий расход для шприцевого насоса
Поток газа при столкновении, мл/мин	От 0 до 1	0	Высокий расход жидкой фазы
		0,3	Низкий расход для шприцевого насоса
Напряжение на пред-стержне MS2, В	От 0 до 120	12	—
Энергия ионов MS2	От 0 до 150	3	—
Входное напряжение детектора, В	От 0 до 5000	5000	—
Напряжение отклонения детектора, В	От -400 до 400	-200	—

Компонент / параметр системы, размерность	Диапазон	Рекомендуемое значение	Примечание
Напряжение множителя детектора, В	От 0 до 4000	2000	–

2.3. Технические характеристики системы

2.3.1. Массогабаритные характеристики системы

Массогабаритные характеристики Системы HELICON® Inspeco 5200 приведены в таблице 2.2.

Таблица 2.2. Массогабаритные характеристики Системы HELICON® Inspeco 5200

№, п/п	Компонент системы	Габаритные размеры, мм	Масса
1	Масс-спектрометр тройной квадрупольный	648 × 526 × 998	115 кг
2	Насос бинарный ультравысокого давления	590 × 335 × 220	23,5 кг
3	Фильтр для растворителей входной	55 × 23	38 г
4	Трубка стальная с фитингами	850 × Ø1,6	21 г
5	Капилляры для растворителей	1500 × Ø3	20 г
6	Ключ шестигранный 2,5 мм	2,5	4,5 г
7	Ключ шестигранный 4 мм	4	13,5 г
8	Ключ гаечный 5/16-1/4"	Длина – 125,0	17,5 г
9	Генератор азота мембранного типа	750 × 600 × 550	85 кг
10	Трубка для слива конденсата	1400 × Ø6	78,5 г
11	Ключ инженерного отсека	Длина – 52,0	15 г
12	Автосемплер с опцией охлаждения	335 × 360 × 650	26 кг
13	Держатель для виал на 48 шт.	135 × 23 × 85	174 г
14	Трубка Ø1/16×0,13	50 × Ø1,6 × Ø0,13	8 г
15	Драйвер на USB	Объем накопителя 4 Гб	–
16	Кабель I/O	Длина – 1500	119 г
17	Предохранитель 2,5 А	20 × 5	1 г
18	Комплект гаек с отверстием Ø1/16 и ферулы	Гайка с отверстием: 8 × 10	1,5 г
		Ферула: 5 × 3	0,005 г
		Ключ для гаек: 10 × 82	15 г
19	Ферулы	5 × 3	0,005 г
20	Гайки с отверстием Ø1/16	8 × 10	1,5 г
21	Емкость для промывки 250 мл	75 × 45 × 120	45
22	Инструмент для снятия игл	25 × 30 × 2,5	2,5 г
23	Термостат колонок	605 × 195 × 385	10,5 кг
24	Источник химической ионизации при атмосферном давлении (APCI)	Ø44 × 130	52,5 г
25	Вакуумный насос	385 × 365 × 515	59 кг
26	Кабель питания C14 – 3P+PE	Длина – 2500	350 г
27	Кабель питания EUROSCHUKO	Длина – 2500	418 г
28	Ключ шестигранный 12 мм	12	166 г
29	Переходник для труб	240 × 35	58,5
30	Насосное масло 1 л	105 × 68 × 230	978 г
31	Шприцевой насос	280 × 210 × 140	3,6 кг
32	Шприц 10 мл	Длина – 107,0	10 г
33	Шприц 5 мл	Длина – 85,0	5 г
34	Шприц 60 мл	Длина – 150,0	36 г
35	Ключ шестигранный 2,5 мм	2,5	3 г
36	Подставка для растворителей	100 × 540 × 335	5 кг
37	Модуль для слива отработанной жидкости	40 × 550 × 332	11,5 кг
38	Постколоночный кран-переключатель потоков	280 × 190 × 150	2542 г
39	Кабель RS 232	Длина – 1350	91 г
40	Переходник сетевой адаптер	Длина – 70,0	79 г
41	Кабель питания	Длина – 1700	190 г
42	Коннектор шприца	9 × 47	10 г
43	Шприц объемом 1 мл	110 × 8	27 г
44	8-портовый высокоскоростной сетевой коммутатор	Коммутатор: 28 × 73 × 130	174,5 г

№, п/п	Компонент системы	Габаритные размеры, мм	Масса
		Блок питания: 1150	43,5 г
45	Входная трубка из фторопласта Ø6 мм	Длина – 3000	336 г
46	Трубка из фторопласта Ø4 мм	1080 × Ø4	28 г
47	Отводная PU трубка Ø10 мм	3000 × Ø10	211 г
48	Отводная трубка Ø14 мм	3000 × Ø14	660 г
49	Хомут Kf40	90 × 70	115,5 г
50	Пинцет	125 × 4	15,5 г
51	Соединитель из полиэфирэфиркетона Ø1/16x0,13 ID	Ø10 × 60	4 г
52	Трубка из полиэфирэфиркетона 3 м	3000 × Ø1,6	12 г
53	Редуктор азота для баллона	Редуктор: 75 × 45 × 45	112 г
		Настенное крепление: 60 × 25	33 г
		Манометр: 45 × 40	48 г
54	Редуктор азота для генератора азота	160 × 110 × 108	1103 г
55	Коннектор для редуктора азота	37 × 16	27,5 г
56	Переходник быстросъемный PEG	33 × 12	3 г
57	Быстросъемный Т-коннектор	36 × 27	6 г
58	Быстросъемный коннектор R1/4–Ø6	16 × 21	10,5 г
59	Фильтр прямой очистки	86 × 25 × 25	45 г
60	Кабель Ethernet	Длина – 1520	64 г
61	Крестовая отвертка	265 × 40	75 г
62	Плоская отвертка	137 × 25	11,5 г
63	Лазерная указка	146 × 10	28,5 г
64	Наклейка с qr-кодом	75 × 75	3 г
65	Вакуумная трубка	1000 × 55	833 г
66	Емкость для растворителя	Размеры – 230 × 100	572 г
		Объем – 1 л	
67	Крышка емкости для растворителя	32 × 54	46,5 г
68	Сливная трубка	1500 × Ø11	85 г
69	Тройник для сливной трубки	55 × 35 × Ø8	2 г
70	Коннектор из полиэфирэфиркетона (5 шт./уп.)	Ø10 × 26	1 г
71	Соединение из нержавеющей стали Ø0,005	36 × 7	7,5 г
72	Трубка из нержавеющей стали (2 шт./уп.)	500 × Ø1,6 × 0,12	8 г
73	Пластиковая емкость 10 л.	230 × 155 × 360	283,5 г
74	Крышка для пластиковой емкости	50 × 25	14 г
75	Кожух для инструмента для замены уплотнений	20 × 20	4,5 г
76	Инструмент для замены уплотнений	30 × 55	48,0 г
77	Вials стекло 2 мл (100 шт./уп.)	32 × 11,7	2,2 г
78	Крышки для вials (100 шт./уп.)	12 × 5	0,28 г
79	Руководство по эксплуатации	Формат А4	–
80	Программное обеспечение на USB	Объем 32 Гб	–

Примечание. Предельно допустимое отклонение массогабаритных характеристик ±10 %, если не указано другое.

2.3.2. Общие рабочие характеристики системы

Общие рабочие характеристики Системы HELICON® Inpero 5200 приведены в таблице 2.3.

Таблица 2.3. Общие рабочие характеристики Системы HELICON® Inpero 5200

Характеристика	Параметр
Метод ионизации	Электроспрей в катионном и анионном режимах (ESI+/-), химическая ионизация при атмосферном давлении
Масс-спектрометр тройной квадрупольный	
Режимы детектирования	Полное сканирование; сканирование характеристических ионов (SIM/SIR), множественных реакций (MRM), ионов-предшественников (Precursor Ion), ионов-продуктов (Product Ion), потеря нейтральных частиц (Neutral Loss Scan)

Характеристика	Параметр
Диапазон определяемых масс	5–1000 а.е.м.
Стабильность массы	$\pm 0,1$ а.е.м. за 24 ч при нормальной рабочей температуре
Динамический диапазон	6 порядков от предела обнаружения
Ультравысокоэффективный жидкостный хроматограф	
Рабочее давление	До 1200 бар
Пульсации давления	$<1\%$
Диапазон потока	1–4 мл/мин
Вместимость автосемплера	2×48 виал объемом 2 мл, 2×12 виал объемом 10 мл или 2 многолуночных держателя для образцов
Объем пробоотборной петли автосемплера	250 мкл, 500 мкл
Дополнительные опции автосемплера	Охлаждение образцов до 4 °С, постколоночный кран-переключатель потоков между 6 хроматографическими колонками
Рабочая температура термостата колонок	От 5 °С выше температуры окружающей среды до 90 °С с шагом 1 °С
Вместимость термостата колонок	До 6 хроматографических колонок длиной 250 мм
Вакуумный насос	
Скорость откачки	$\geq 50 \text{ м}^3/\text{ч}$
Уровень шума	$\leq 60 \text{ дБ}$
Шприцевой насос	
Диапазон объемной скорости	0,831 нл/мин – 54,155 мл/мин
Диапазон линейной скорости	5 мкм/мин – 65 мм/мин
Максимальный объем вводимого образца	1 мл
Погрешность общего объема вводимого образца	$\leq 0,5\%$ при условии $>30\%$ от максимального объема инфузии
Система	
Общий уровень шума	Не более 65 дБ(А)
Общее время включения	Не более 7200 с

2.3.3. Рабочие характеристики системы

Рабочие характеристики Системы HELICON® Inspero 5200 приведены в таблице 2.4.

Таблица 2.4. Рабочие характеристики Системы HELICON® Inspero 5200

Характеристика	Параметр
Скорость сканирования	Не менее 12000 а.е.м./с
Положительное и отрицательное время переключения	Время переключения сканирования положительных и отрицательных ионов может быть установлено минимум на 50 мс.
Минимальное время выдержки	1 мс
Стабильность оси качества	В течение 24 часов подряд смещение оси масс $\leq 0,1$ а.е.м.
Перекрестное загрязнение при столкновении	Ионные перекрестные помехи $<0,5\%$
Точность калибровки оси масс	Погрешность теоретического отношения массы к заряду не превышает $\pm 0,2$ а.е.м.
Разрешение масс	Ширина на полувысоте (FWHM) может быть отрегулирована менее чем на 0,8 а.е.м.
Точность потока насоса	При установлении скорости потока 0,5 мл/мин измеренная погрешность вывода скорости потока составляет $\pm 2\%$.
Точность температуры автосемплера	Измеренная температура находится в диапазоне $\pm 2,0$ °С от заданной температуры
Точность температуры термостата колонок	Измеренная температура находится в диапазоне $\pm 2,0$ °С от заданной температуры
Линейность автосемплера	Коэффициент линейной регрессии автосемплера (r) должен быть больше 0,990.

Характеристика	Параметр
Уровень загрязнения при массопереносе	Коэффициент загрязнения при массопереносе не должен превышать 0,05 %.

2.3.4. Рабочие характеристики компонентов системы

Рабочие характеристики компонентов Системы HELICON* Inspero 5200 приведены в таблице 2.5.

Таблица 2.5. Рабочие характеристики компонентов Системы HELICON* Inspero 5200

Компонент системы	Рабочая характеристика
Насос бинарный ультравысокого давления	Характеристики электропитания (напряжение, частота): 220 В ± 10 %, 50 Гц ± 1 Гц Максимальная потребляемая мощность: 800 В·А Максимальный потребляемый ток: 10 А Производительность: до 4 мл/мин Давление: 1200 бар
Редуктор азотный для баллона	Давление выходное: 0,1–1,6 МПа
Редуктор азотный для генератора азота	Давление выходное: 0–1,0 МПа
Генератор азота мембранного типа	Характеристики электропитания (напряжение, частота): 220 В ± 10 %, 50 Гц ± 1 Гц Максимальная потребляемая мощность: 660 В·А Максимальный потребляемый ток: 10 А Производительность потока: 16–26 л/мин, шаг 5 л/мин Давление: 0,9 МПа Чистота азота: 95–98 %
Автосемплер с опцией охлаждения	Характеристики электропитания (напряжение, частота): 220 В ± 10 %, 50 Гц ± 1 Гц Максимальная потребляемая мощность: 800 В·А Максимальный потребляемый ток: 10 А
Термостат колонок	Характеристики электропитания (напряжение, частота): 220 В ± 10 %, 50 Гц ± 1 Гц Максимальная потребляемая мощность: 2200 В·А Максимальный потребляемый ток: 10 А
Вакуумный насос	Характеристики электропитания (напряжение, частота): 220 В ± 10 %, 50 Гц ± 1 Гц Максимальная потребляемая мощность: 1800 В·А Максимальный потребляемый ток: 12 А Нормальная рабочая мощность: 1,5 кВт·А Предельное общее давление с небольшим газовым балластом: ≤ 1,0 мбар Предельное парциальное давление без газового балласта: ≤ 1,0 мбар
Шприцевой насос	Характеристики электропитания (напряжение, частота): 220 В ± 10 %, 50 Гц ± 1 Гц Максимальная потребляемая мощность: 20 В·А
Масс-спектрометр тройной квадрупольный	Характеристики электропитания (напряжение, частота): 220 В ± 10 %, 50 Гц ± 1 Гц Максимальная потребляемая мощность: 2200 В·А Максимальный потребляемый ток: 10 А

2.3.5. Идентификационные данные программного обеспечения

Идентификационные данные программного обеспечения Системы HELICON* Inspero 5200 приведены в таблице 2.6.

Таблица 2.6. Идентификационные данные программного обеспечения Системы HELICON* Inspero 5200

Идентификационные данные/признаки	Значение
Наименование программного обеспечения	Analyse software
Идентификационное наименование ПО	Analyse
Номер версии (идентификационный номер ПО), не ниже	P004.V005.002
Цифровой идентификатор ПО	—

2.3.6. Характеристики компьютера

Программное обеспечение Системы HELICON® Inspero 5200 работает на компьютере общего назначения, а операционная среда выглядит следующим образом:

- Операционная система: Microsoft Windows 7 (включительно) или выше;
- Минимальные требования к памяти: 4 Гб;
- Минимальные требования к ЦП: Intel(R) Core(TM) Core i5;
- Минимальный объем дискового пространства: 512 Гб;
- Размер экрана: 21 дюйм (включительно) или больше;
- Минимальное разрешение экрана: 1920×1080.

2.3.7. Технические характеристики предохранителей

Технические характеристики предохранителей составляющих системы приведены ниже:

Спецификация предохранителя автосемплера с опцией охлаждения	T 2,5 A H 250 B
Спецификация предохранителя термостата колонок	T 6,3 A H 250 B
Спецификация двойного предохранителя насоса бинарного ультравысокого давления	T 5 A H 250 B

2.4. Метрологические характеристики системы

2.4.1. Метрологические характеристики

Метрологические характеристики Системы HELICON® Inspero 5200 приведены ниже:

Наименование характеристики	Значение
Диапазон массовых чисел, а.е.м.	5–1000
Чувствительность (отношение сигнал/шум) в режиме ионизации электроспреем при отслеживании множественных реакций (MRM, переход m/z 321 → 152) при дозировании 10 пг левомецетина, не менее	25000:1
Предел допускаемого относительного среднего квадратичного отклонения (ОСКО) выходного сигнала при дозировании 100 пг левомецетина, %: – по площади пика – по времени удержания	10,0 1,5
Чувствительность (отношение сигнал/шум) в режиме ионизации электроспреем при отслеживании множественных реакций (MRM, переход m/z 609 → 195) при дозировании 10 пг резерпина, не менее	2000:1
Предел допускаемого относительного среднего квадратичного отклонения (ОСКО) выходного сигнала при дозировании 100 пг резерпина, %: – по площади пика – по времени удержания	10,0 1,5

2.4.2. Основные технические характеристики

Основные технические характеристики Системы HELICON® Inspero 5200 приведены ниже:

Наименование характеристики	Значение
Параметры электрического питания: – напряжение переменного тока, В – частота переменного тока, Гц	220±10 50±1
Потребляемая мощность, В·А, не более: – насоса бинарного ультравысокого давления – автосемплера с опцией охлаждения – термостата колонок – масс-спектрометра тройного квадрупольного	800 800 2200 2200
Габаритные размеры (высота×ширина×длина), мм, не более: – насоса бинарного ультравысокого давления – автосемплера с опцией охлаждения – термостата колонок – масс-спектрометра тройного квадрупольного	220×335×590 335×360×650 605×195×385 648×526×998
Масса, кг, не более: – насоса бинарного ультравысокого давления – автосемплера с опцией охлаждения – термостата колонок – масс-спектрометра тройного квадрупольного	23,5 26 10,5 115

Наименование характеристики	Значение
Рабочие условия измерений: – температура окружающей среды, °C – относительная влажность, %, не более	от +18 до +25 60

2.4.3. Показатели надежности

Показатели надежности Системы HELICON® Inspecro 5200 приведены ниже:

Наименование характеристики	Значение
Средний срок службы, лет	7
Средняя наработка на отказ, ч	10000

2.4.4. Знак утверждения типа

Знак утверждения типа наносится на титульный лист Руководства по эксплуатации типографским способом и на маркировочную наклейку любым технологическим способом в виде самоклеящегося стикера на заднюю панель масс-спектрометра тройного квадрупольного.

2.5. Меры предосторожности при использовании

2.5.1. Примечание по электрической безопасности

Установка и техническое обслуживание электрооборудования должны выполняться сервисными инженерами, направленными уполномоченным представителем производителя в Российской Федерации. Неквалифицированному персоналу строго запрещается выполнять соответствующие электрические операции. Без разрешения нельзя разбирать соответствующие части прибора во избежание поражения электрическим током. Основным источником питания должен иметь хорошую защиту заземления, установка линии заземления должна быть проверена квалифицированным персоналом.

2.5.2. Уведомление о химической безопасности

При работе с химическими веществами или веществами с потенциальной биологической опасностью:

1. Необходимо работать в хорошо проветриваемом помещении.
2. Необходимо надевать соответствующее защитное снаряжение, такое как перчатки и лабораторные халаты, чтобы избежать прямого контакта с телом человека.
3. С опасными веществами должен работать квалифицированный персонал, прошедший соответствующую подготовку по их применению.
4. При использовании легковоспламеняющихся химических веществ, таких как метанол, изопропанол, запрещается иметь поблизости источник огня.
5. При использовании химических веществ избегайте контакта с кожей и мойте руки после работы с ними.
6. Храните, транспортируйте, используйте и утилизируйте соответствующие химические вещества в соответствии с применимыми местными законами и правилами.

При эксплуатации и техническом обслуживании необходимо убедиться, что используемые химические вещества совместимы с данным прибором.

3. Описание медицинского изделия для диагностики *in vitro*

3.1. Масс-спектрометр тройной квадрупольный

Краткое описание масс-спектрометра тройного квадрупольного: после первоначального разделения целевого соединения с помощью высокоэффективной жидкостной хроматографии оно преобразуется в заряженные ионы под действием ионного источника. Заряженные частицы (ионы-предшественники) проходят через конус для отбора проб и под действием потока газа и электрического поля проходят через трансмиссионный стержень, управляемый напряжением радиочастоты, входят в квадруполь Q1. Квадруполь Q1 экранирует целевые ионы-предшественники, и они попадают в реакционную ячейку столкновения и реагируют с реакционным газом, который преобразует ионы-предшественники в ионы-продукты, которые поступают в квадруполь Q2. Квадруполь Q2 экранирует целевые ионы-продукты, и экранированные ионы-продукты поступают в детектор для генерации окончательного сигнала обнаружения.

Ионно-оптическая система помещена в вакуумную камеру, которая разделена на три уровня вакуума:

1 уровень – включает зону между конусом для отбора проб и трансмиссионным стержнем первого уровня (давление воздуха $1\text{E-}2$ Торр);

2 уровень – включает зону, в которой располагается трансмиссионный стержень второго уровня (давление воздуха $1\text{E-}4$ Торр);

3 уровень – включает квадруполь Q1, ячейку столкновений и квадруполь Q2, а также зону детектора (давление воздуха $1\text{E-}6$ Торр).

Масс-спектрометр тройной квадрупольный состоит из источника ионов при атмосферном давлении, вакуумного интерфейса, трансмиссионного стержня, масс-анализатора, реакционной ячейки для столкновений, модуля сбора сигналов и вакуумной системы. Внешний вид прибора показан на рисунках 3.1–3.3.

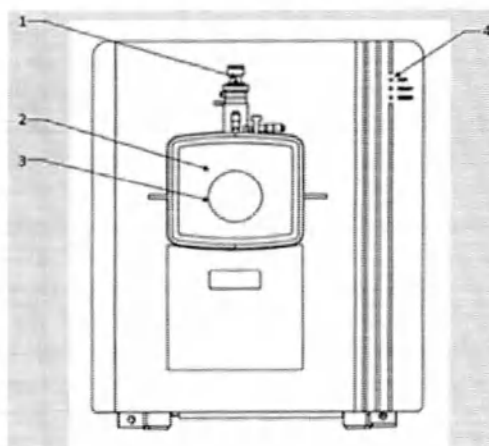


Рисунок 3.1. Масс-спектрометр тройной квадрупольный (вид спереди):

1 – источник ионов при атмосферном давлении; 2 – камера распыления; 3 – смотровое окно; 4 – светодиодный индикатор.

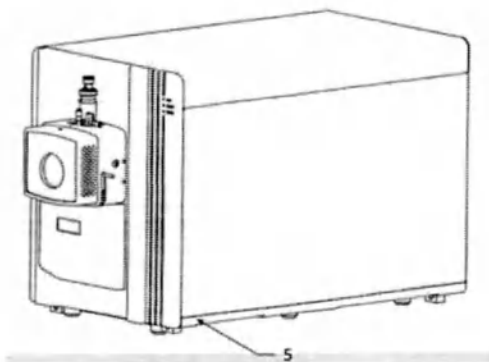


Рисунок 3.2. Масс-спектрометр тройной квадрупольный (вид сбоку):

5 – кнопка (встроенная) перезагрузки контроллера материнской платы.

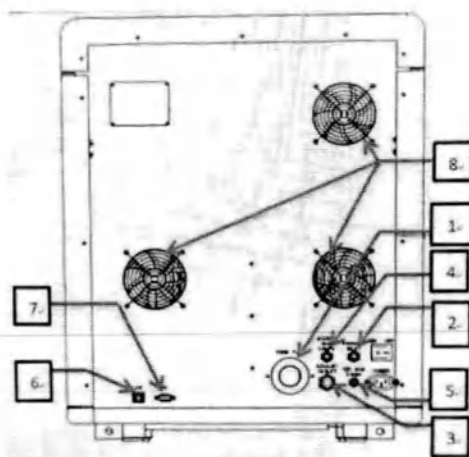


Рисунок 3.3. Масс-спектрометр тройной квадрупольный (вид сзади).

Функции компонентов масс-спектрометра тройного квадрупольного, показанные на рисунке 3.3., перечислены в таблице 3.1.

Таблица 3.1. Функции компонентов масс-спектрометра тройного квадрупольного

№, п/п	Наименование	Деталь	Функция
1	Интерфейс KF40	Фланец KF40	Он соединен с молекулярным насосом через сильфон, чтобы обеспечить вакуум для прибора.
2	Вход отработанного воздуха	Вставной соединитель Ø6 мм	Линейное соединение для подключения подачи вытяжного воздуха.
3	Выпускное отверстие	Вставной соединитель Ø10 мм	Выхлопной газ отводится путем подсоединения полиуретановой трубы Ø10 мм к выхлопной трубе.
4	Вход газа источника ионов	Вставной соединитель Ø6 мм	Подсоедините его к редукционному клапану давления в баллоне с азотом через тефлоновую трубку Ø6 мм, чтобы поднять подачу азота.
5	Вход газа в ячейку столкновения	Вставной соединитель Ø4 мм	Подсоедините редукционный клапан давления в баллоне с азотом через тефлоновую трубку Ø4 мм для подъема подачи азота.
6	Сетевой интерфейс	Сетевой интерфейс RJ45	Подключитесь к сетевому порту внешнего компьютерного устройства, соответствующего стандарту GB4943.1, с помощью сетевого кабеля, который используется для управления масс-спектрометрами, автосемплерами и термостатами колонок, а также для работы программного обеспечения для анализа.
7	Интерфейс ввода/вывода	Сигнальный интерфейс DB 9	Поддержка сигнала TTL для передачи синхронного триггерного сигнала.
8	Охлаждающий вентилятор	Вентилятор охлаждения 24 В	Используется для отвода тепла на задней панели прибора.

Внимание. Охлаждающий вентилятор оснащен сеткой, вовремя любого технического обслуживания масс-спектрометр должен быть отключен.

Прибор используется в области клинической диагностики, поэтому существует биологическая опасность, будьте осторожны.

Расположение микрометров (1) на передней части масс-спектрометра тройного квадрупольного показано на рисунке 3.4.

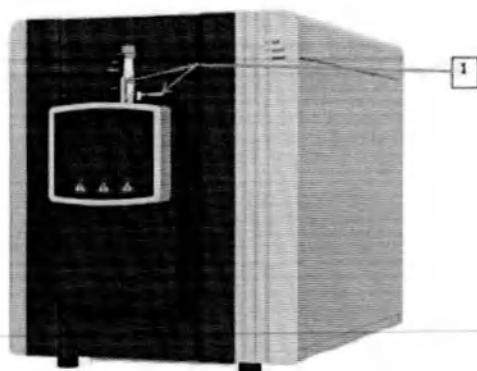


Рисунок 3.4. Масс-спектрометр тройной квадрупольный (микрометры).

Функция микрометра приведена в таблице 3.2.

Таблица 3.2. Функция микрометра

№, п/п	Наименование	Функция
1	Микрометр	Для регулировки положения капилляра для оптимизации параметров образца прибора.

Внимание. Источник ионов имеет функции нагрева и высоковольтной ионизации. При использовании обратите внимание на возможность ожога от высокой температуры и повреждения электрическим током.

3.2. Основные компоненты масс-спектрометра тройного квадрупольного

3.2.1. Источник ионов

Источник ионов расположен на передней панели устройства и содержит датчик ESI и распылительную камеру. Датчик ESI (1) установлен в верхней части камеры распыления (2) и подключен к высоковольтному разъему электрораспылителя (3) и газу распыления для ионизации образца (4). Выход ионизации образца расположен внутри камеры распыления, рядом с конусом для отбора проб вакуумного интерфейса. Камера распыления (2) соединена с нагревательной трубкой газа десольватации (5), а задняя часть камеры распыления соединена с выпускной трубкой для отвода выхлопного газа (6), генерируемого источником ионов. В передней части камеры распыления имеется смотровое окно (7), через которое можно наблюдать за состоянием источника ионов, как показано на рисунке 3.5.

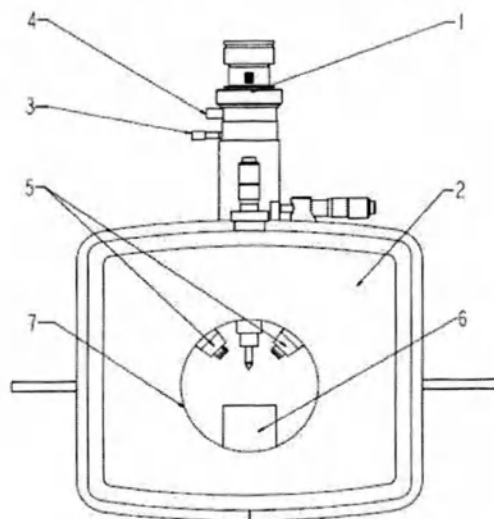


Рисунок 3.5. Структурная схема камеры распыления.

Функции деталей камеры распыления, показанные на рисунке 3.5., перечислены в таблице 3.3.

Таблица 3.3. Функции деталей источника ионов

№, п/п	Наименование	Функция
1	Датчик ESI	Для ионизации проб.
2	Камера распыления	Обеспечивает закрытую камеру и газ десольватации для источника ионов.
3	Электрораспылительные фитинги высокого давления	Обеспечивает высоковольтные электрические соединения для датчиков ESI.
4	Соединитель распыляющего газа	Для образцов, прошедших распыление.
5	Нагревательная трубка газа десольватации	Для десольвентирующих газов.
6	Труба для отвода выхлопного газа	Для выброса газов из источника ионов.
7	Смотровое окно	Для мониторинга состояния источника ионов.

Примечание. ESI – ионизация электроспреем.

3.2.2. Светодиодный индикатор состояния

Светодиодный индикатор состояния в правом верхнем углу передней панели отображает текущее рабочее состояние прибора. Красный индикатор (ERROR) мигает, указывая на то, что определенное напряжение прибора не достигло установленного значения. Желтый индикатор (READY) мигает, указывая на то, что вакуум, потоки газов или температура не достигли установленного значения; желтый индикатор всегда горит, когда вакуум, потоки газов и температура достигли установленного значения. Зеленый индикатор (RUN) мигает, когда прибор выполняет метод; зеленый индикатор всегда горит означает, что прибор включен (рисунок 3.6.).

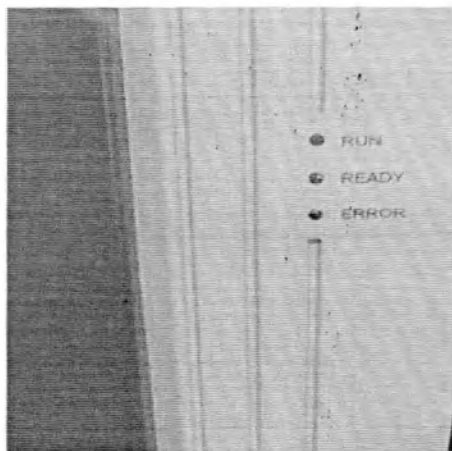


Рисунок 3.6. Светодиодный индикатор состояния на панели масс-спектрометра тройного квадрупольного (крупный план).

3.2.3. Вакуумный порт

Вакуумный порт расположен в передней части вакуумной камеры и на заднем конце ионного источника, который относится к вакууму первой ступени. Вакуумный порт состоит из перегородки и конуса для отбора проб. Перегородка расположена в передней части конуса для отбора проб. Конус для отбора проб имеет функцию нагрева для нагрева входящего газа обратной продувки примерно до 100°C для сушки ионного пучка (рисунок 3.7.).

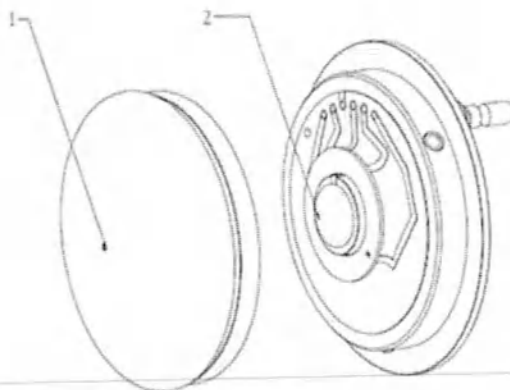


Рисунок 3.7. Вакуумный порт.

Функции деталей вакуумного порта, показанные на рисунке 3.7., перечислены в таблице 3.4.

Таблица 3.4. Функции деталей вакуумного порта

№, п/п	Наименование	Функция
1	Дефлектор	Для извлечения проб.
2	Конус для отбора проб	Для извлечения образца и переноса его в масс-анализатор.

3.2.4. Вакуумный насос

Вакуумный насос размещается снаружи прибора для создания первой ступени вакуума и форвакуума молекулярного насоса и подключается через интерфейс в задней части устройства (рисунок 3.8.). Скорость откачки вакуумного насоса $\geq 50 \text{ м}^3/\text{ч}$.

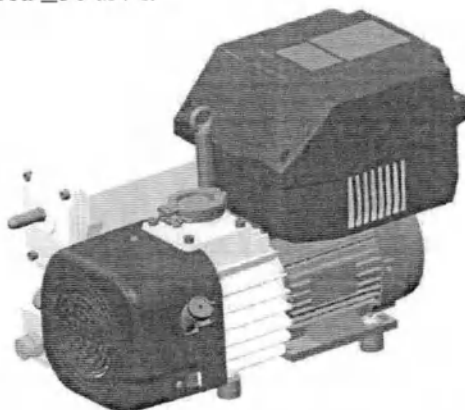


Рисунок 3.8. Вакуумный насос (общий вид).

3.3. Составляющие части ВЭЖХ

3.3.1. Автосемплер с опцией охлаждения

Автосемплер с опцией охлаждения представляет собой высокопроизводительный автодозатор с прочной конструкцией, предназначенный для решения задач современной аналитической лаборатории. Это полный автодозатор с небольшим рабочим пространством. Игла для ввода в автосемплере является подвижной частью. Не открывайте дверцу автосемплера во время его работы.

Стандартная конфигурация автосемплера показана в таблице 3.5.

Таблица 3.5. Стандартная конфигурация автосемплера

ВЭЖХ	УВЭЖХ
15 мкл шприц	15 мкл шприц
500 мкл шприц	250 мкл шприц
1000 мкл буферная трубка	500 мкл буферная трубка
100 мкл пробоотборная петля	20 мкл пробоотборная петля

Примечание. ВЭЖХ – высокоэффективный жидкостной хроматограф;

УВЭЖХ – ультравысокоэффективный жидкостной хроматограф.

Общий вид автосемплера с опцией охлаждения показан на рисунке 3.9.



Рисунок 3.9. Автосемплер с опцией охлаждения (общий вид).

На задней части автосемплера расположены элементы, перечисленные в таблице 3.6.

Таблица 3.6. Элементы автосемплера, расположенные на его задней части

№, п/п	Наименование	Элемент	Функция
1	Сетевой интерфейс	Сетевой интерфейс RJ45	Подключиться к сетевому порту внешнего компьютерного оборудования, соответствующему стандарту GB4943.1, через сетевой кабель для обмена информацией.
2	Интерфейс синхронизации	DB 9	Синхронный запуск при использовании с хостом масс-спектрометра.

Внимание. Прибор используется в области клинической диагностики, поэтому и существует биологическая опасность, будьте осторожны.

3.3.2. Термостат колонок

Для точного контроля температуры термостат колонок оптимизирован для ультравысокоэффективной жидкостной хроматографии за счет принудительной вентиляции и встроенного подогревателя растворителя (рисунок 3.10.).

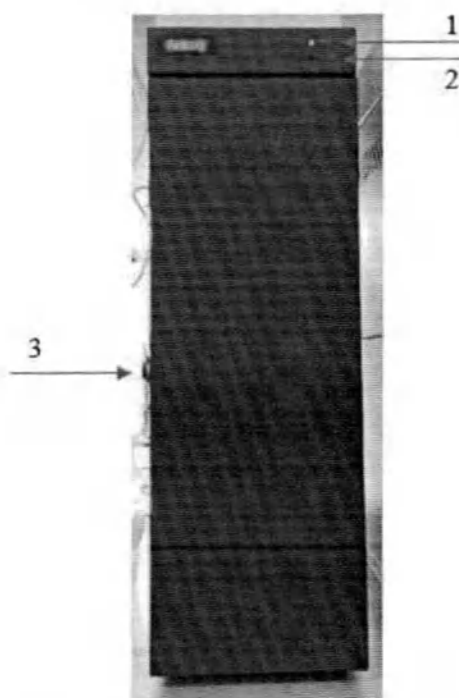


Рисунок 3.10. Термостата колонок (вид спереди).

Функции элементов термостата колонок, показанные на рисунке 3.10., перечислены в таблице 3.7.

Таблица 3.7. Функции элементов термостата колонок, показанные на рисунке 3.10.

№, п/п	Наименование	Функция
1	Индикатор питания	Используется для индикации состояния подключения питания.
2	Индикатор нагрева	Используется для индикации состояния нагрева.
3	Дверная защелка	Для закрытия дверцы.

Примечание. Термостат колонок имеет функцию нагрева, поэтому будьте осторожны, чтобы не обжечься, и обратите внимание на защиту.

На задней части термостата колонок расположены элементы, перечисленные в таблице 3.8.

Таблица 3.8. Элементы термостата колонок, расположенные на его задней части

№, п/п	Наименование	Элемент	Функция
1	Сетевой интерфейс	Сетевой интерфейс RJ45	Подключается к сетевому порту внешнего компьютерного оборудования, соответствующего стандарту GB4943.1, через сетевую кабель, и происходит обмен информацией.
2	Интерфейс синхронизации	DB 9	Зарезервировано для подключения к внешнему компьютерному оборудованию, соответствующему стандарту GB4943.1, через последовательный кабель DB9, для использования в качестве альтернативы, когда невозможно использовать сетевой интерфейс RJ45.

Внимание. Прибор используется в области клинической диагностики, поэтому и существует биологическая опасность, будьте осторожны.

3.3.3. Насос бинарный ультравысокого давления

Насос бинарный ультравысокого давления, предназначенный для работы с растворителями класса УВЭЖХ. Насос представляет собой градиентную систему со встроенным дегазатором и смесителем (рисунки 3.11–3.12).

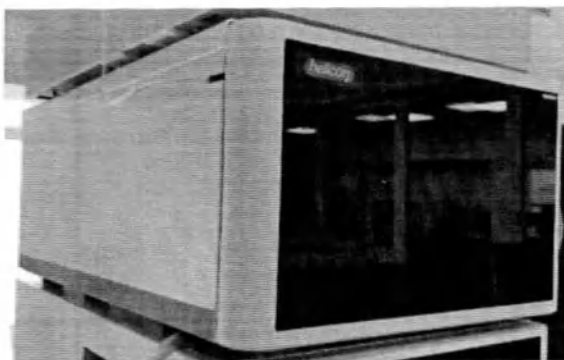


Рисунок 3.11. Насос бинарный ультравысокого давления (вид спереди).

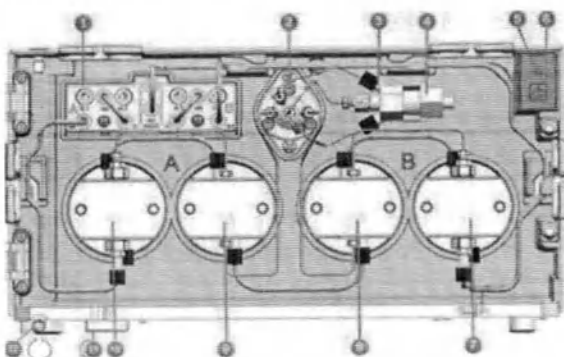


Рисунок 3.12. Насос бинарный ультравысокого давления (передняя часть).

Функции элементов насоса бинарного ультравысокого давления, показанные на рисунке 3.12., показаны в таблице 3.9.

Таблица 3.9. Функции элементов насоса бинарного ультравысокого давления

№, п/п	Наименование	Функция
1	Клапан выбора растворителя/поточный дегазатор/ фитинги для промывки уплотнений	Выбор пути потока растворителя для удаления пузырьков воздуха в подвижной фазе; фитинги для очистки уплотнения соединены с промывочной жидкостью и насосом бинарным ультравысокого давления для подачи промывочной жидкости в насос.
2	Переключающий клапан	Для очистки и удаления отходов из капилляров и переноса подвижной фазы.
3	Блок очистки/заполнения	Слив заливочной жидкости.
4	Выходной фильтр 2 мкм, смеситель на 35 мкл (смеситель на 100 мкл опционально)	Фильтрация и перемешивание компонентов подвижной фазы.
5	Светодиодный индикатор состояния	Отображение рабочего состояния насоса.
6	Кнопка питания	Выключатель питания насоса.
7	Головка главного насоса В	Главный насос бинарный ультравысокого давления В.
8	Головка вспомогательного насоса В	Вспомогательный насос бинарный ультравысокого давления В.
9	Головка вспомогательного насоса А	Вспомогательный насос бинарный ультравысокого давления А.
10	Головка главного насоса А	Главный насос бинарный ультравысокого давления А.
11	Датчик утечки	Устройство мониторинга утечек.
12	Подключение слива/отходов	Отверстие для слива отработанной жидкости.

Соединения (фитинги) для растворителей в насосе бинарном ультравысокого давления показаны на рисунке 3.13.

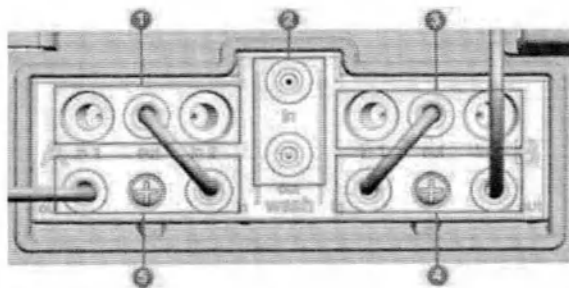


Рисунок 3.13. Соединения (фитинги) для растворителей в насосе бинарном ультравысокого давления.

Функции соединений (фитингов) для растворителей в насосе бинарном ультравысокого давления показаны в таблице 3.10.

Таблица 3.10. Функции соединений (фитингов) для растворителей в насосе бинарном ультравысокого давления

№, п/п	Наименование	Функция
1	Клапан выбора растворителя А	Выбор растворителя А1 или А2.
2	Область интерфейса промывки уплотнений	Вход соединен с раствором для промывки уплотнений, а выход соединен с насосом.
3	Клапан выбора растворителя В	Выбор растворителя В1 или В2.

№, п/п	Наименование	Функция
4	Дегазация насоса В в режиме реального времени	Удаление пузырьков воздуха из подвижной фазы В.
5	Дегазация насоса А в режиме реального времени	Удаление пузырьков воздуха из подвижной фазы А.

На задней части насоса бинарного ультравысокого давления расположены элементы, перечисленные в таблице 3.11.

Таблица 3.11. Функции элементов насоса бинарного ультравысокого давления, расположенные на его задней части

№, п/п	Наименование	Детали	Функция
1	Сетевой интерфейс	Сетевой интерфейс RJ45	Подключитесь к сетевому порту внешнего компьютерного оборудования, соответствующему стандарту GB4943.1, через сетевой кабель для обмена информацией.
2	Интерфейс RS232	DB 9	Зарезервировано, подключено к внешнему компьютерному оборудованию, соответствующему стандарту GB4943.1, через последовательный кабель DB9 для обмена информацией.

Внимание. Прибор используется в области клинической диагностики, поэтому существует биологическая опасность, будьте осторожны.

4. Установка медицинского изделия для диагностики *in vitro*

4.1. Условия установки

4.1.1. Требования к окружающей среде

 **Предупреждение.** Прибор должен быть размещен в выделенном рабочем помещении, поблизости не должно быть вредных, горючих и коррозионно-активных газов, площадь не менее 10 м² и более, ширина двери более 1 м.

Лабораторная чистота: требуется максимальный уровень запыленности 3,5×10⁷ частиц/м³.

В радиусе 30 см вокруг вентиляционного отверстия прибора не должно быть экранирования, чтобы обеспечить нормальную вентиляцию и отвод тепла прибора.

Вытяжное устройство: Лаборатория должна установить стандартный универсальный вытяжной колпак с регулируемой заслонкой, а скорость ветра на выпускном отверстии должна быть больше 5 м/с. Используется для сброса летучих газов растворителя на жидкую фазу.

Выбросы выхлопных газов: требуется 1 вытяжной патрубок (в систему вентиляции лаборатории или окружающую среду) для отвода воздуха из камеры распыления и от вакуумного насоса.

Условия окружающей среды для эксплуатации, хранения и транспортировки прибора приведены ниже:

Условия окружающей среды	Эксплуатация	Хранение и транспортировка
Высота над уровнем моря	менее 2000 м	–
Температура окружающей среды	от 18 °С до 25 °С	от минус 20 °С до 55 °С
Относительная влажность воздуха	не более 60 %	от 5 % до 80 %
Атмосферное давление	–	78,9–106 кПа (592–795 мм рт. ст.)

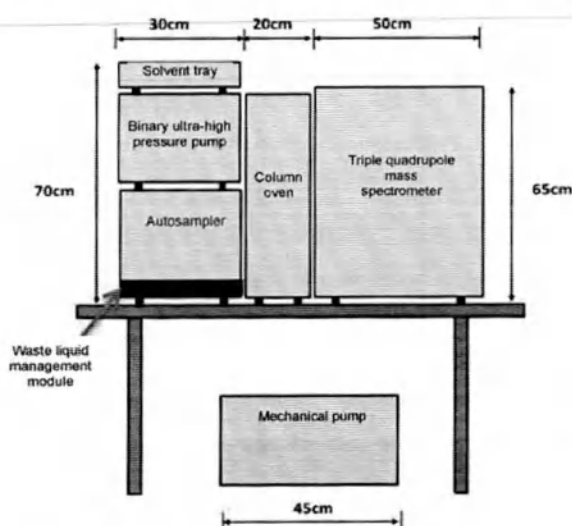
Примечание. Для обеспечения температуры окружающей среды используйте кондиционер с подогревом и охлаждением выше 1,5, для обеспечения относительной влажности воздуха – осушитель во влажных помещениях.

4.1.2. Требования к размещению

После снятия внешней упаковки с прибора необходимо использовать вилочный погрузчик, чтобы установить прибор в плоское и устойчивое положение, при этом не должно быть вибрации.

Характеристики приборного стола: габаритные размеры (длина×ширина) –200 см × 80 см, несущая способность – более 200 кг, площадь опоры должна быть больше, чем у основания прибора; материал стола должен быть негорючим.

Расстояние между стеной и задней частью прибора должно быть не менее 80 см, чтобы один человек мог свободно стоять для удобства его установки и обслуживания, и пространство не менее 0,5 м сбоку для облегчения отсоединения вилки и разбора прибора, как показано на рисунке 4.1.

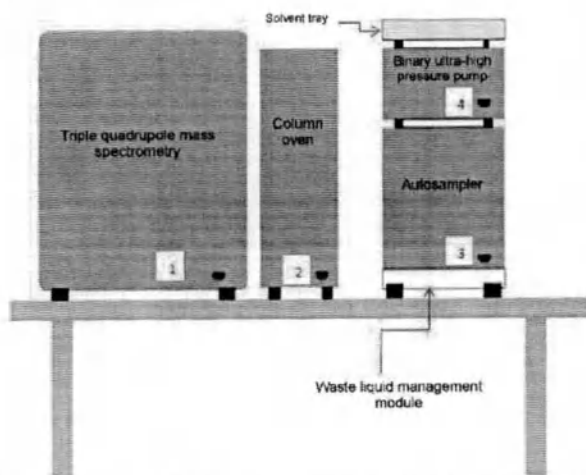


ДЛЯ РИСУНКА 4.1.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Solvent tray	Подставка для растворителей
Binary ultra-high pressure pump	Насос бинарный ультравысокого давления
Autosampler	Автосемплер
Column oven	Термостат колонок
Triple quadrupole mass spectrometer	Масс-спектрометр тройной квадрупольный
Waste liquid management module	Модуль для слива отработанной жидкости
Mechanical pump	Вакуумный насос
cm	сантиметров

Рисунок 4.1. Схема установки Системы HELICON® Inspero 5200.

4.1.3. Требования к питанию

Вход питания масс-спектрометра расположен на задней панели прибора. Убедитесь, что розетка находится на расстоянии не более 1 метра от этого входа. Система должна быть оснащена независимым удлинителем, 3 обычными метрическими вилками с тремя отверстиями, пропускной способностью ≥ 2200 Вт (220 В×10 А), а количество разъемов должно быть ≥ 3 . Информация о питании Системы HELICON® Inspero 5200 показана на рисунке 4.2.



ДЛЯ РИСУНКА 4.2.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
1 – Triple quadrupole mass spectrometry	1 – Масс-спектрометр тройной квадрупольный
2 – Column oven	2 – Термостат колонок
3 – Autosampler	3 – Автосемплер
4 – Binary ultra-high pressure pump	4 – Насос бинарный ультравысокого давления
Solvent tray	Подставка для растворителей
Waste liquid management module	Модуль обработки отработанной жидкости

Рисунок 4.2. Схема подключения источника питания к Системе HELICON® Inspero 5200.

Требования к входной мощности компонентов Системы HELICON® Inspero 5200 указаны в таблице 4.1.

Таблица 4.1. Требования к входной мощности компонентов Системы HELICON® Inspero 5200

№, п/п	Инструкции по подключению
1	Трехжильный интерфейс питания, требования к входной мощности: 220 В $\pm 10\%$, 50 Гц ± 1 Гц, 3 А
2	Трехжильный интерфейс питания, требования к входной мощности: 220 В $\pm 10\%$, 50 Гц ± 1 Гц, 2 А
3	Трехжильный интерфейс питания, требования к входной мощности: 220 В $\pm 10\%$, 50 Гц ± 1 Гц, 1 А
4	Трехжильный интерфейс питания, требования к входной мощности: 220 В $\pm 10\%$, 50 Гц ± 1 Гц, 2 А

Примечание. 1 – Масс-спектрометр тройной квадрупольный; 2 – Термостат колонок;
3 – Автосемплер; 4 – Насос бинарный ультравысокого давления.

Требования к питанию и частоте каждого Системы HELICON® Inspero 5200 указаны в таблице 4.2.

Таблица 4.2. Требования к питанию для каждого модуля Системы HELICON® Inspero 5200

Требование	Масс-спектрометр	УВЭЖХ	Насос бинарный ультравысокого давления	Компьютер рабочей станции
к напряжению	220 В $\pm 10\%$			
к частоте	50 Гц ± 1 Гц			
Нормальная рабочая мощность	0,5 кВт×А	0,3 кВт×А	1,5 кВт×А	0,1 кВт×А

Примечание. УВЭЖХ – ультравысокоэффективный жидкостной хроматограф.

Конфигурация питания:

- 1) Оснащен не менее чем тремя независимыми источниками питания 220 В, максимальный потребляемый ток ≥ 10 А, 50 Гц, при нагрузке источника питания защитного заземления 6 кВт×А×ч, переменное напряжение между нейтралью и линией РЕ не превышает 5 В;
- 2) Заземление РЕ блока питания должно быть надежным для обеспечения нормальной работы прибора и исключения поражения человека электрическим током;
- 3) Для обеспечения стабильного питания систему рекомендуется оборудовать однофазным стабилизатором напряжения 220 В переменного тока мощностью 15 кВт×А.

4.1.4. Проверка и техническое обслуживание защиты от перегрева

Вся защита от перегрева должна проверяться каждые 12 месяцев, чтобы убедиться, что защита от перегрева работает нормально и обеспечивает безопасность прибора. При необходимости проведения проверки защиты от перегрева и технического обслуживания обратитесь к уполномоченному представителю производителя.

4.1.5. Проверка и обслуживание защиты программного обеспечения

Когда прибор выключен, сначала отключите цепь устройства измерения температуры, затем подключите цепь и откройте интерфейс предупреждения программного обеспечения, чтобы проверить, есть ли предупреждение о неисправности нагрева. Если есть предупреждение, защита от перегрева программного обеспечения в норме, в противном случае программная защита от перегрева не работает, и необходимо обратиться к уполномоченному представителю производителя для обслуживания.

4.1.6. Требования к источнику воздуха

- 1) Подготовьте генератор азота или резервуар с жидким азотом как часть системы подачи газа для источника ионов (чистота $>95,0\%$) и соответствующий разъем для выхода газа (подключение к трубке Ø6 мм);
- 2) Подготовьте баллон с высокочистым азотом (чистота $>99,999\%$) в качестве газа для столкновения и соответствующий редуктор азота для баллона (выходное давление 0–1 МПа, подключение к трубке Ø4 мм);
- 3) Убедитесь, что расстояние между баллоном с азотом и прибором не превышает 300 см;
- 4) Для установки потока газа необходимо убедиться, что трубка потока газа не ослаблена и не повреждена; переключатель редуктор азота газового баллона можно включить после установки (таблица 4.3.).

Таблица 4.3. Требования к подаче воздуха

Тип газа	Газ	Требования к качеству газа	Способ подключения	Давление подачи	Максимальный поток
Распыляющий газ	Азот	>95,0 %, безмасляная сушка	Трубка из ПТФЭ Ø6 мм	0,6 МПа	2 л/мин
Газ десольватации					15 л/мин
Газ обратной продувки		>99,999 %, безмасляная сушка		0,2 МПа	5 л/мин
Газ в ячейке столкновений	Сухой воздух/азот	Безмасляная сушка	Входная трубка Ø6 мм из ПТФЭ, выходная трубка из ППУ Ø10 мм	0,1 МПа	1 мл/мин

Примечание. ПТФЭ – политетрафторэтилен;
ППУ – пенополиуретан.

4.1.7. Требования к выбросам выхлопных газов

Прибор имеет две выхлопные трубы:

- 1) Выхлопная труба вакуумного насоса должна быть соединена с отводной трубкой, находящейся на высоте более 10 см от земли и выведенной в вентиляцию;
- 2) Выхлопная труба источника ионов должна быть соединена с отводной трубкой Ø10 мм.

Пользователь должен предусмотреть выпускное отверстие, ведущее в систему вентиляции лаборатории или на улицу.

4.1.8. Требования к сетевому подключению

Компьютер и хост масс-спектрометра соединены сетевым кабелем.

Если компьютер хочет управлять другим оборудованием, отличным от хоста масс-спектрометра, через сетевой порт, например: насосом бинарным ультравысокого давления, автосемплером, термостатом колонки, можно добавить сетевой коммутатор для подключения к другому оборудованию.

Рекомендуется, чтобы компьютер был подключен к сети «Интернет», который можно использовать для удаленного обслуживания и обновления основной программы микропрограммы масс-спектрометра и программного обеспечения Системы HELICON® Inspeto 5200.

4.1.9. Требования к компьютеру и принтеру

Рекомендуемая конфигурация компьютера:

- Операционная система: Microsoft Windows 7 (включительно) или выше;
- Минимальные требования к памяти: 4 ГБ;
- Минимальные требования к ЦП: Intel(R) Core(TM) Core i5;
- Минимальный объем дискового пространства: 512 ГБ;
- Размер экрана: 21 дюйм (включительно) или больше;
- Минимальное разрешение экрана: 1920×1080.

Если необходимо распечатать отчет с данными анализа, подготовьте принтер. Возможно использование лазерного, струйного или матричного принтера.

4.1.10. Требования к окружающей среде для электромагнитной совместимости

Пользователь несет ответственность за обеспечение электромагнитной совместимости оборудования, чтобы оборудование можно было использовать в обычном режиме.

Использование устройства в сухой среде, особенно в присутствии искусственных материалов (например, искусственных тканей, ковров), может вызвать повреждающие электростатические разряды, что приведет к ошибочным результатам (таблица 4.4.).

Таблица 4.4. Требования по помехоустойчивости для оборудования

Порт	Элементы испытания	Основные стандарты ЭМС	Тестовое значение	Критерий производительности
Корпус	Электростатический разряд (ESD)	GB/T 17626.2	Воздушный разряд: 2 кВ, 4к В, 8 кВ Контактный разряд: 2 кВ, 4 кВ	В
	Излучаемые электромагнитные	GB/T 17626.3	3 В/м, 80 МГц – 2.0 ГГц, 80 %АМ	А

Порт	Элементы испытания	Основные стандарты ЭМС	Тестовое значение	Критерий производительности
	поля			
	Магнитное поле номинальной промышленной частоты	GB/T 17626.8	3 А/м, 50/60 Гц	А
Мощность переменного тока	Провал напряжения	GB/T 17626.11	1 цикл 0 %	В
			5/6 цикл 40 %	С
			25/30 цикл 70 %	С
	Прерывание напряжения	GB/T 17626.11	5 %, продолжительность: 250/300 циклов	С
	Пакет импульса	GB/T 17626.4	1кВ (5/50 нс. 5 кГц)	В
	Всплеск	GB/T 17626.5	Линия-земля: 2кВ/линия-линия: 1 кВ	В
	Радиочастотная проводимость	GB/T 17626.6	3 В, 150 кГц – 80 МГц, 80 % АМ	А
Источник постоянного тока	Пакет импульса	GB/T 17626.4	1кВ (5/50 нс. 5 кГц)	НП
	Всплеск	GB/T 17626.5	Линия-земля: 2кВ/линия-земля: 1 кВ	НП
	Радиочастотная проводимость	GB/T 17626.6	3 В, 150 кГц – 80 МГц, 80 % АМ	НП
Сигнал ввода/вывода	Пакет импульса	GB/T 17626.4	0,5 кВ (5/50 нс. 5 кГц)	НП
	Всплеск	GB/T 17626.5	отсутствуют	НП
	Радиочастотная проводимость	GB/T 17626.6	3 В, 150 кГц – 80 МГц, 80 % АМ	НП
Сигнал ввода/вывода к основному питанию	Пакет импульса	GB/T 17626.4	1кВ (5/50 нс. 5 кГц)	НП
	Всплеск	GB/T 17626.5	отсутствуют	НП
	Радиочастотная проводимость	GB/T 17626.6	3 В, 150 кГц – 80 МГц, 80 % АМ	НП

Примечание. НП – не применимо;

А – Испытание применяется только к потенциально чувствительному к магнитным полям оборудованию. Значение помех ЭЛТ-дисплея может превышать 1 А/м;

В – Только для кабелей длиннее 3 м;

С – Не подходит для входных портов, предназначенных для подключения к батареям или перезаряжаемым батареям, которые удаляются или отсоединяются от устройства при подзарядке. Оборудование с входным портом питания постоянного тока (использующее адаптер питания переменного/постоянного тока) должно быть испытано на входном порту переменного тока адаптера питания переменного/постоянного тока, указанного изготовителем. Если не указано иное, следует использовать стандартный адаптер питания переменного/постоянного тока. Это испытание применяется к портам ввода питания постоянного тока, предназначенным для постоянного подключения к междугородным линиям;

Д – «5/6 циклов» означает «5 циклов для испытания на частоте 50 Гц» и «6 циклов для испытания на частоте 60 Гц».

Не используйте Систему HELICON® Inspero 5200 рядом с источниками сильного излучения (например, неэкранированными источниками радиочастот), иначе это может помешать ее нормальной работе.

4.1.11. Требования к запуску

Система HELICON® Inspero 5200 разработана и протестирована в соответствии с требованиями к оборудованию класса А в GB4824. Требования к выбросам для Системы HELICON® Inspero 5200 приведены в таблице 4.5.

Таблица 4.5. Требования к выбросам для Системы HELICON® Inspero 5200

Испытание на выброс	Соответствие
Радиочастотное излучение GB 4824	Группа I
Радиочастотное излучение GB 4824	Класс А

Внимание. Перед использованием прибора рекомендуется оценить окружающую среду для электромагнитной совместимости.

4.2. Этапы установки

4.2.1. Установка газовой линии

В этом разделе описано подключение газового баллона к приборной газовой системе. Если в лаборатории есть линия азота, то также можно подключить ее к газовой системе прибора, выполнив *следующие* действия:

Шаг 1. Установите редуктор азотный для баллона на выпускной клапан газового баллона, как показано на рисунке 4.3.

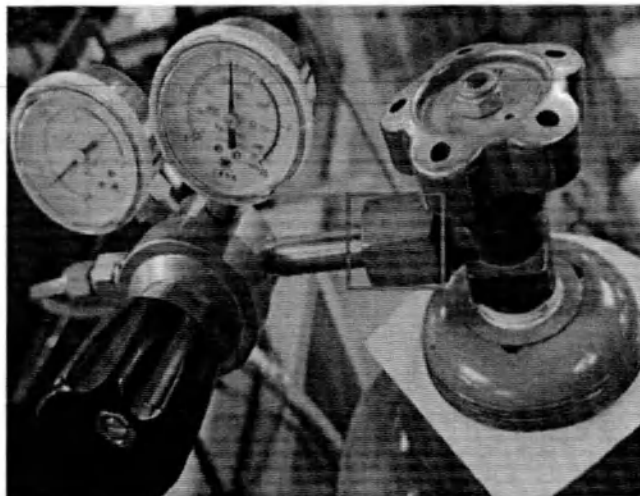


Рисунок 4.3. Установка редуктора.

Шаг 2. Вставьте втулку в отверстие фторопластовой трубки Ø6 мм, как показано на рисунке 4.4., и соедините ее с патрубком на выходе редуктора, как показано на рисунке 4.5. Подсоедините другой конец фторопластовой трубки с впускным отверстием для азота (Исходный газ (N₂)) на задней стороне прибора и отрегулируйте выходное давление редуктора до 0,2 МПа.

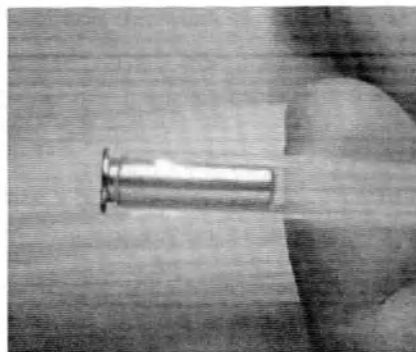


Рисунок 4.4. Установка втулки в отверстие фторопластовой трубки Ø6 мм.

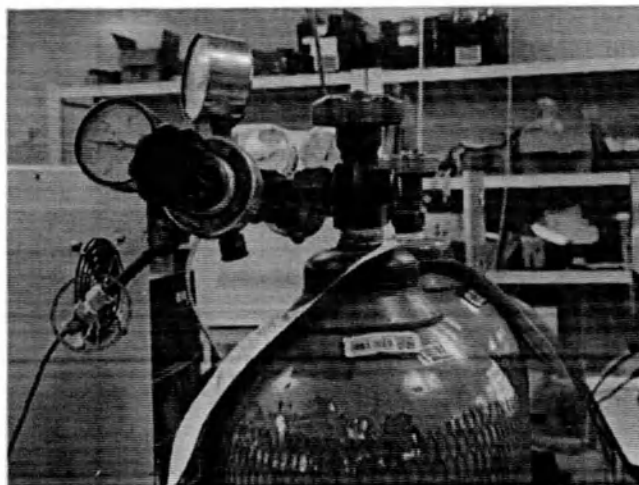


Рисунок 4.5. Соединение фторопластовой трубки Ø6 мм с редуктором азотным для баллона.

Шаг 3. Подсоедините линию подачи газа ионного источника. Фторопластовую трубку Ø6 мм, идущую от генератора азота или резервуара с жидким азотом, через быстросъемный Т-коннектор разделите на две линии. Одну линию вставьте до упора непосредственно во входной штуцер для подачи азота Source Gas (Исходный газ) N₂), отрегулируйте давление на выходе до 0,6 МПа; другую – в выходной штуцер для подачи азота (выходное отверстие для выхлопных газов) в нижнем правом углу задней части масс-спектрометра. Для подключения масс-спектрометра к системе вентиляции лаборатории используйте полиуретановую трубку Ø10 мм (как показано на рисунке 4.6.).

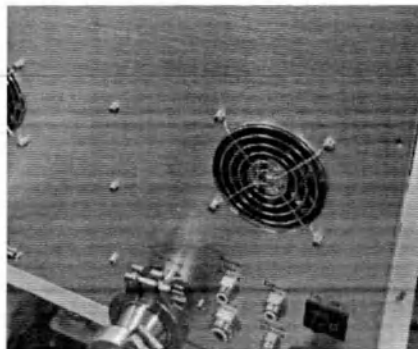


Рисунок 4.6. Штуцеры схемы газового контура на задней панели масс-спектрометра.

4.2.2. Установка ВЭЖХ

Шаг 1. Распакуйте модули жидкостного хроматографа и осторожно перенесите их на лабораторный стол. Рекомендуется размещать их с левой стороны масс-спектрометра, как показано на рисунке 4.7.

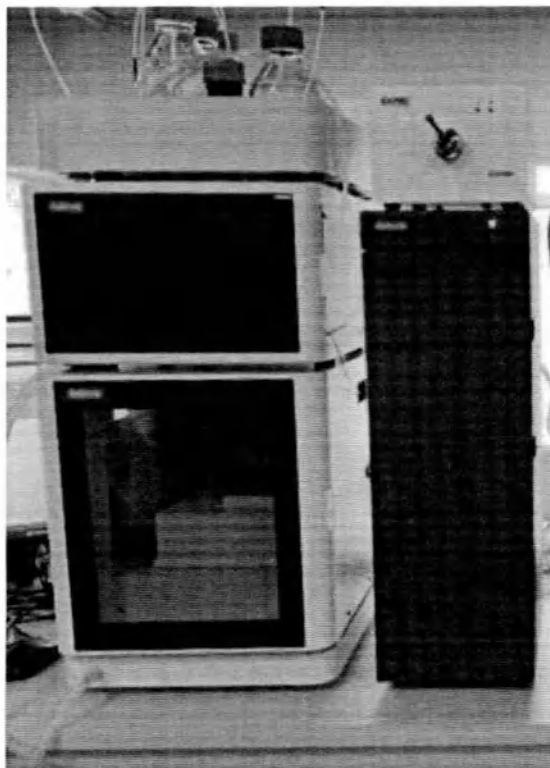


Рисунок 4.7. Общий вид модуля жидкостного хроматографа.

Шаг 2. Подготовьте емкости с крышками: объемом 500–1000 мл для подвижной фазы, объемом 250–1000 мл для промывки поршней насосов смесью изопропиловый спирт:сверхчистая вода = 20:80 (об./об.) (если нет изопропанола, его можно заменить метанолом). Все используемые растворители должны быть чистоты «Для хроматографии» или выше. На каждый капилляр для подачи растворителя, пропущенный через отверстие в крышке емкости, наденьте фильтр для растворителей входной, состоящий из головки и тулки, как показано на рисунке 4.8. Готовую емкость установите на подставку для растворителей.

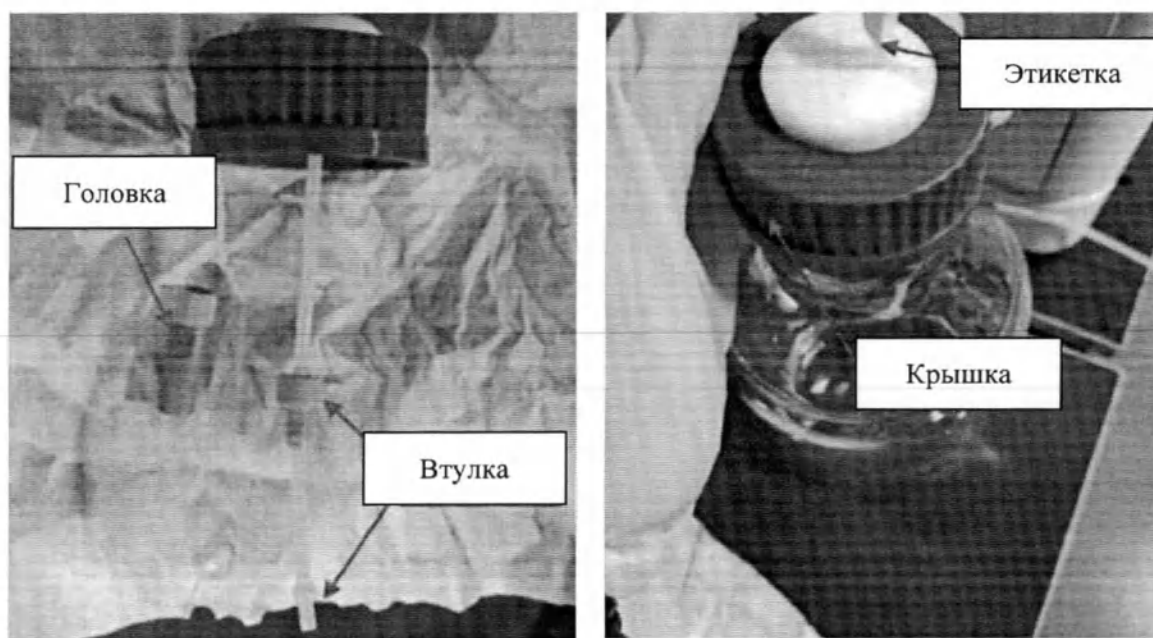


Рисунок 4.8. Установка емкости для растворителя с трубкой подачи растворителя.

Шаг 3. Подготовьте четыре емкости для растворителя как описано в шаге 2. Свободный конец трубки подачи растворителя подсоедините к впускным отверстиям дегазатора насосов А и В, как показано на рисунке 4.9.

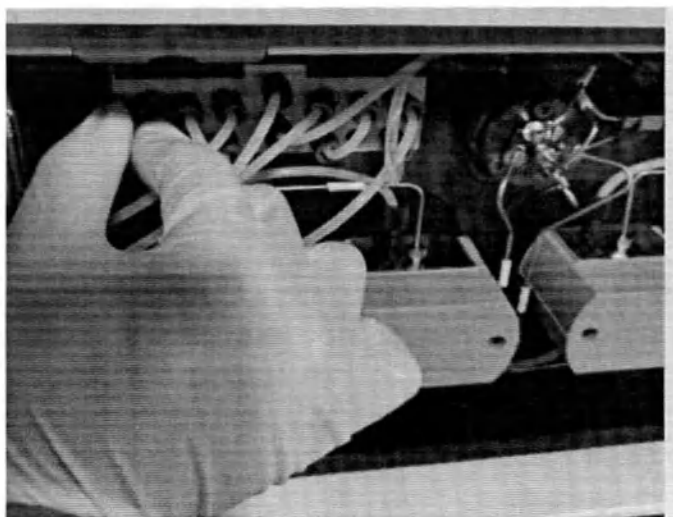


Рисунок 4.9. Соединение трубки подачи растворителя к насосу бинарному ультравысокого давления.

Шаг 4. Соедините пути потоков насосов А и В через тройник со смесителем с помощью стальных трубок, затем подключите выходящую из смесителя трубку к встроенному фильтру насоса бинарного ультравысокого давления. Затем подключите другой конец фильтра к внутреннему шестиходовому клапану ввода через отверстие в правой стенке автосемплера, как показано на рисунке 4.10 (положение 1). Если максимальное рабочее давление ниже 35 МПа, то используйте трубку из полиэфирэфиркетона (РЕЕК), в противном случае используйте стальную трубку.

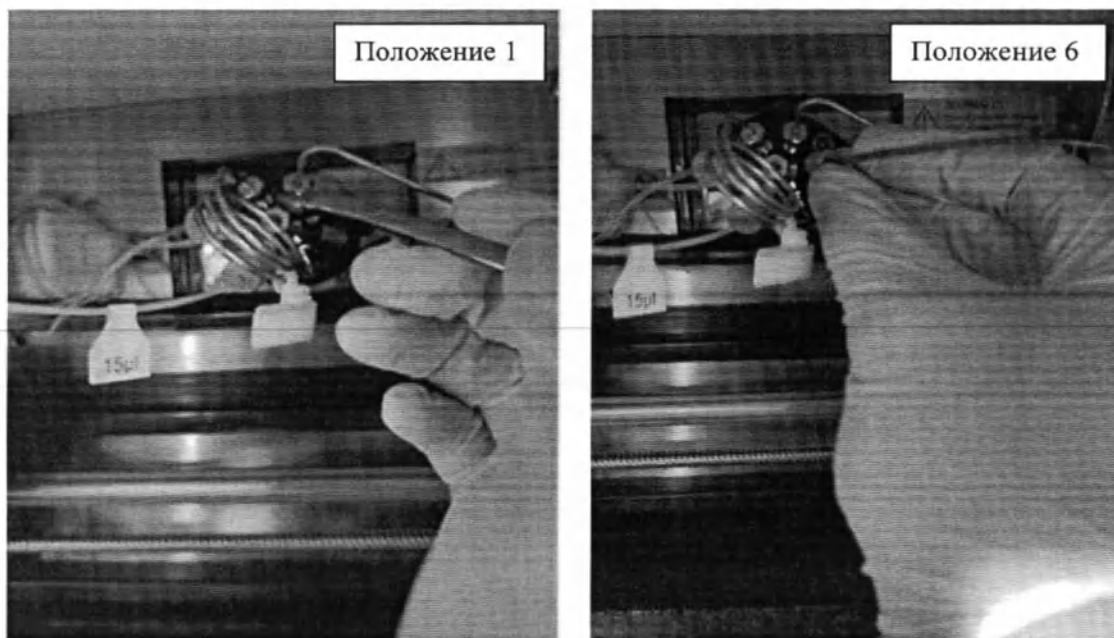


Рисунок 4.10. Соединение трубок с автосемплером.

Шаг 5. Подсоедините трубку подачи раствора для промывки иглы к соответствующему положению, как показано на рисунке ниже, а затем вставьте другой конец трубки во флакон для промывки игл как показано на рисунке 4.11.

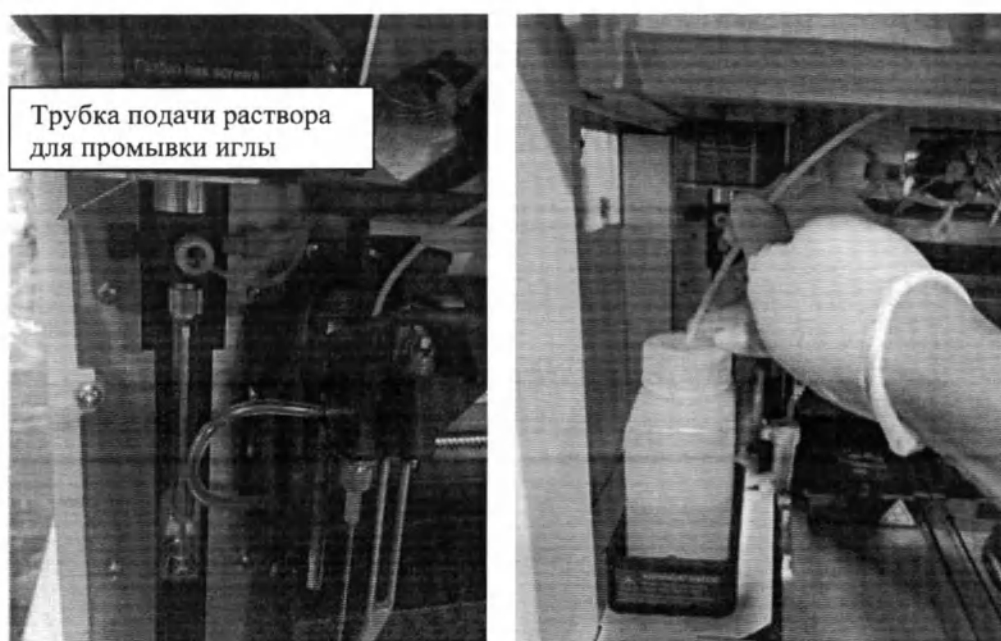


Рисунок 4.11. Соединение трубки подачи раствора для промывки иглы.

Шаг 6. Подсоедините один конец трубки к входному шестиходовому клапану (рисунок 4.10, положение 6), другой – вставьте в термостат колонки через отверстие в левой стенке и соедините с хроматографической колонкой. Другой конец хроматографической колонки подключите к источнику ионов, как показано на рисунке 4.12.

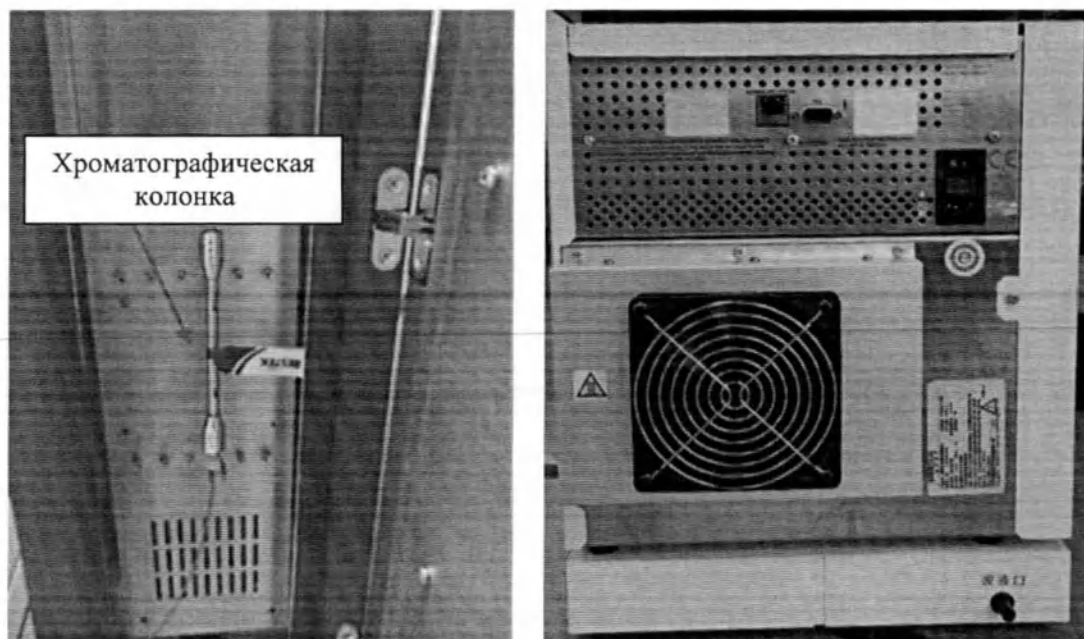


Рисунок 4.12. Соединение трубки с хроматографической колонкой.

Шаг 7. Присоедините сливную трубку к модулю для слива отработанной жидкости, а другой ее конец вставьте в пластиковую емкость для отходов (10 л), как показано на рисунке 4.13.

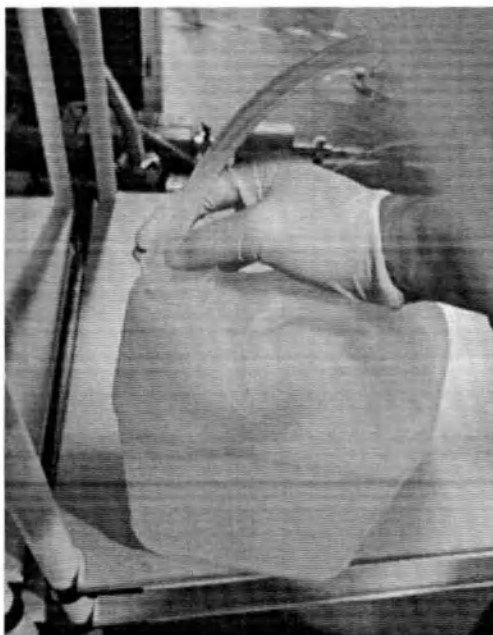


Рисунок 4.13. Соединение трубки слива отработанной жидкости и пластиковой емкости для отходов (10 л).

Шаг 8. Используйте кабели Ethernet для подключения термостата колонок, насоса бинарного ультра-высокого давления, автосемплера с опцией охлаждения, масс-спектрометра тройного квадрупольного и компьютера к 8-портовому высокоскоростному сетевому коммутатору.

В то же время подключите линию питания, подключите кабель I/O к порту ввода-вывода автосемплера и подключите другой конец к порту ввода-вывода в левом нижнем углу масс-спектрометра, как показано на рисунке 4.14.

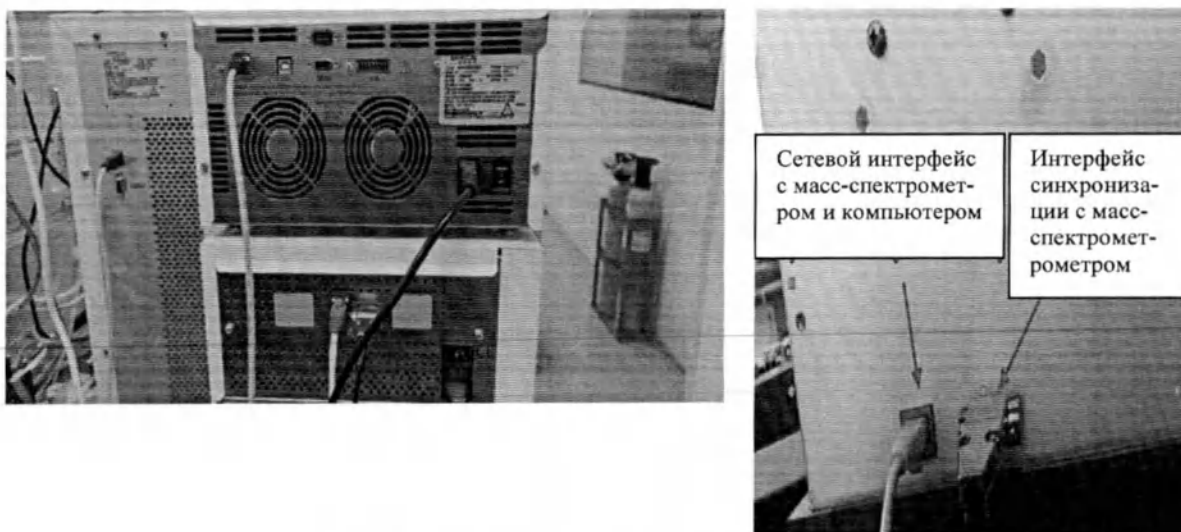


Рисунок 4.14. Подключение кабеля питания и кабеля I/O.

4.2.3. Установка вакуумного насоса

Шаг 1. При транспортировке внутри вакуумного насоса нет масла. Масло для вакуумного насоса, поставляемое с Системой, добавляется через специальное отверстие для заливки масла. При первом запуске уровень масла в насосе должен быть немного выше отметки MAX, как показано на рисунке 4.15.

Примечание. Количество масла для насоса составляет около 1,3–1,5 л.



Рисунок 4.15. Уровень масла в вакуумном насосе.

Шаг 2. Подсоедините вакуумную линию между вакуумным насосом и масс-спектрометром. Вакуумный насос подключен к выпускному отверстию на задней панели масс-спектрометра через металлический фланец, как показано на рисунке 4.16.

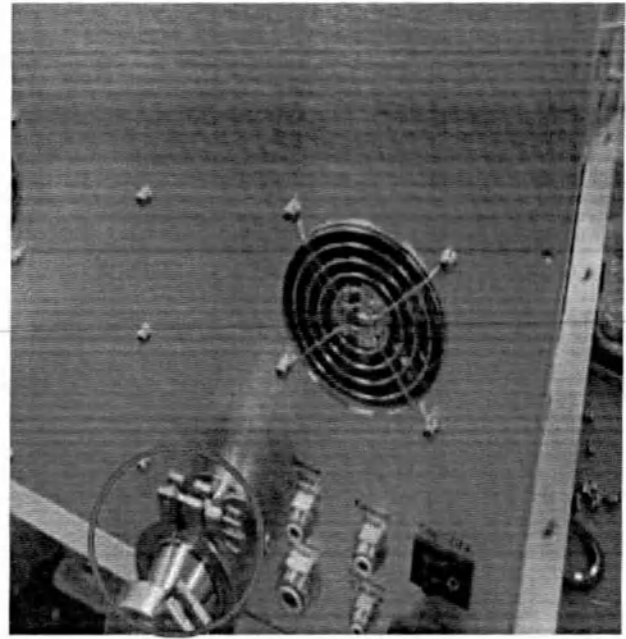
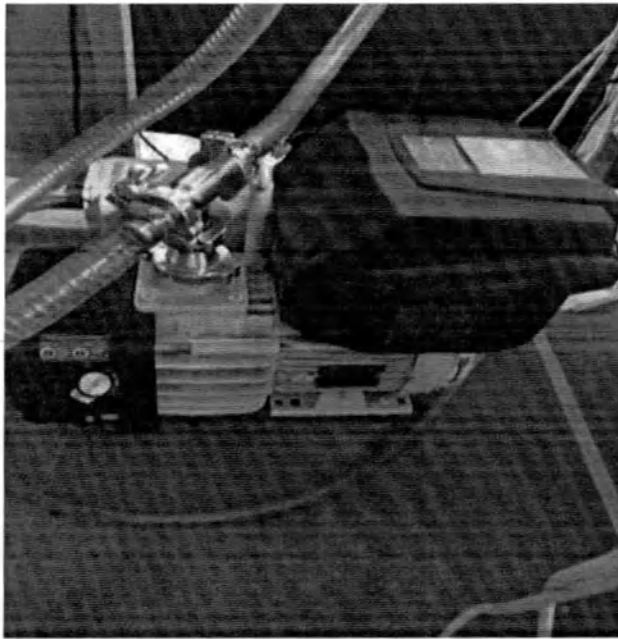


Рисунок 4.16. Схема соединения труб вакуумного насоса.

Шаг 3. Подсоедините и закрепите выхлопную трубу вакуумного насоса к вентиляционному отверстию, как показано на рисунке 4.17.

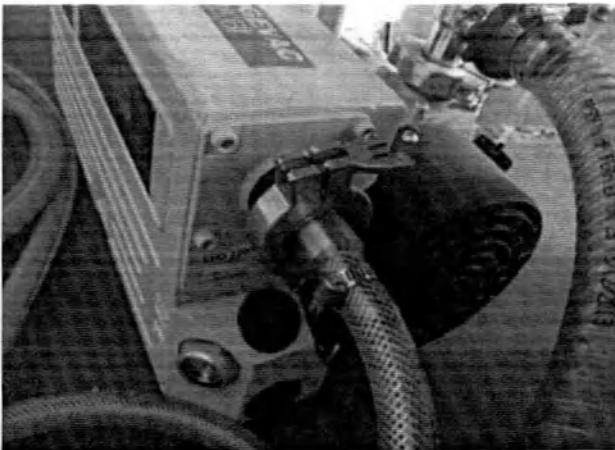


Рисунок 4.17. Схема подключения выхлопной трубы вакуумного насоса.

Шаг 4. Подключите шнур питания вакуумного насоса к розетке (220 В, 50 Гц, максимальный потребляемый ток: 12 А).

Предупреждение. При подключении вакуумного насоса нельзя использовать одну розетку совместно с другим электрооборудованием.

Всегда держите выключатель вакуумного насоса в положении ВЫКЛ (О) перед подключением питания.

4.2.4. Монтаж электрокомпонентов

В этом разделе описывается установка электрических компонентов блока питания и сетевого кабеля прибора. Следует разделять электропитание компьютерного оборудования и прибора.

Шаг 1. Подключите стабилизатор напряжения к сети электропитания в соответствии с его Руководством по эксплуатации, после этого к нему подключите сетевой фильтр со внутренним заземлением (выдерживаемое значение тока фильтра ≥ 30 А).

Шаг 2. Убедившись, что переключатель прибора выключен, подключите шнур питания прибора к сетевому фильтру (Шаг 1).

Шаг 3. Подключите один конец сетевого кабеля к Ethernet интерфейсу прибора, а другой конец – через 8-портовый высокоскоростной сетевой коммутатор к персональному компьютеру (ПК).

5. Ежедневная работа медицинского изделия для диагностики *in vitro*

5.1. Установка программного обеспечения

Включите персональный компьютер (ПК), вставьте USB-носитель с программным обеспечением Системы HELICON® Inpero 5200 и установите операционное программное обеспечение и операционную среду в соответствии с инструкциями по установке на USB-носителе. После установки измените IP-адрес ПК на 172.29.4.101, маску подсети на 255.255.0.0 и шлюз по умолчанию на 172.29.4.101. Если IP-адрес конфликтует с другими устройствами в сети во время установки или если приобретено несколько Систем HELICON® Inpero 5200, инженер-установщик переназначит IP-адрес.



Примечание. При повседневном использовании не нажимайте кнопку «Сбросить вакуум», не отключайте основной источник питания прибора и источник газообразного азота.

5.2. Подготовка перед использованием

В нормальных условиях питание прибора должно быть включено, вакуумная система должна работать нормально, газ обратной продувки должен подаваться нормально, а вакуумный интерфейс должен нагреваться.

Примечание. Вещества с риском инфицирования должны быть защищены в соответствии со стандартами классификации опасности для инфекционных веществ.

5.3. Функции программного обеспечения

Основная функция	Второстепенная функция
Модуль управления хроматографией	Управление потоком насоса бинарного ультравысокого давления, включая градиентный режим работы; очистка насоса бинарного ультравысокого давления.
	Контроль температуры держателя для образцов в автосемплере, перемещение положения держателя для образцов и контроль температуры термостата колонок промывка иглы для отбора проб.
	Поддержка сброса ошибок для насосов бинарных ультравысокого давления, автосемплеров и термостатов колонок.
Модуль управления масс-спектрометрией	Управление параметрами: напряжение, температура и скорость потока в масс-спектрометре, управление сканированием масс-спектрометра (поддержка функции получения масс-спектра).
	Калибровка оси масс поддерживает настройку разрешения и создание отчетов о калибровке. Модуль управления вакуумом поддерживает включение вакуума, выгрузку вакуумных функций и режим ожидания и восстановления масс-спектрометра.
Модуль проекта	Функция создания и импорта проекта.
	Хроматографические методы: поддержка создания, хранения и импорт градиентных методов насоса бинарного ультравысокого давления, сохранение и импорт параметров ввода автосемплера, параметров отбора проб, объема ввода, объема промывки, процедур промывки игл и параметров переключения автоматических переключающих клапанов, сохранение и импорт температурных параметров термостата колонок.
	Метод масс-спектрометрии: поддержка сохранения и импорта функции редактирования сегментов временных рядов масс-спектрометра.
Модуль мониторинга	Модуль последовательности: создание, сохранение, импорт и объединение с жидкостным хроматографом для запуска сбора данных.
	Отслеживание информации о приборе в режиме реального времени и отображение ее на интерфейсе.
Модуль сигнала тревоги	Запись информации о тревоге во время работы прибора.
Модуль журнала	Запись информации журнала операций во время использования программного обеспечения.
Пользовательский модуль	Выполнение входа пользователя, управление правами на использование файлов, создание пользователя, пароля.
	Модификация кода, регистрация прибора, модификация пользовательской

Основная функция	Второстепенная функция
	информации, функции электронной подписи.
Пакетный модуль	Количественный анализ собранных данных в пакетах.
Количественный модуль	Создание и сохранение методов количественного анализа, расчет количественных кривых, сохранение методов поиска пиков и сглаживания.
Качественный модуль	Идентификация вещества по масс-спектру происходит в спектральной библиотеке, интегрирование и вычисление площади пика.
Модуль отчетности	Печать составных отчетов на основе пакетных расчетов.

5.4. Настройки программного обеспечения при запуске

Дополнительные настройки программного обеспечения при запуске *не требуются*.

5.5. Проверка перед использованием

Перед использованием Системы необходимо проверить *следующие* условия:

1. Соответствие условий окружающей среды в лаборатории требованиям к условиям эксплуатации прибора;
2. Подключение азота к прибору. Необходимо убедиться, что азота достаточно для непрерывной работы масс-спектрометра (более одного баллона (40 л), рекомендуется использовать генератор азота);
3. Отсутствие изгибов и заломов на выхлопной трубе;
4. Подключение персонального компьютера к прибору;
5. Наличие места в пластиковой емкости (10 л) для сбора отработанной жидкости;
6. Установление крышки источника ионов для избежания ожогов, вызванных высокой температурой источника ионов из-за длительной работы.

5.5.1. Вход пользователя

После установки программного обеспечения дважды щелкните его значок  на рабочем столе персонального компьютера. При входе в программное обеспечение появляется страница входа пользователя. При первом использовании учетная запись системы по умолчанию: Администратор, а пароль по умолчанию: Администратор; нажмите кнопку «Войти» (рисунок 5.1.).



Рисунок 5.1. Интерфейс входа в систему.

ДЛЯ РИСУНКА 5.1.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Expec Technology	Технология «Экспек»
Smarter Tech Greener World	Умнее техника, зеленее мир
Inner	Внутренний
Login	Регистрационное имя пользователя

5.5.2. Регистрация программного обеспечения

После входа в систему сначала зарегистрируйте программное обеспечение (в противном случае будет отсутствовать возможность запуска анализа серии образцов). Для получения регистрационного кода пользователю необходимо обратиться к уполномоченному представителю производителя в Российской Федерации (РФ).

Процедура регистрации выглядит *следующим* образом:

Нажмите «Пользователь», чтобы войти в интерфейс регистрации программного обеспечения. Если он не зарегистрирован, появится всплывающее окно. Введите регистрационный код и нажмите «ОК». Статус успешной регистрации сохраняется 90 дней. По истечении срока действия необходимо пройти повторную регистрацию», как показано на рисунках 5.2.1–5.2.2.

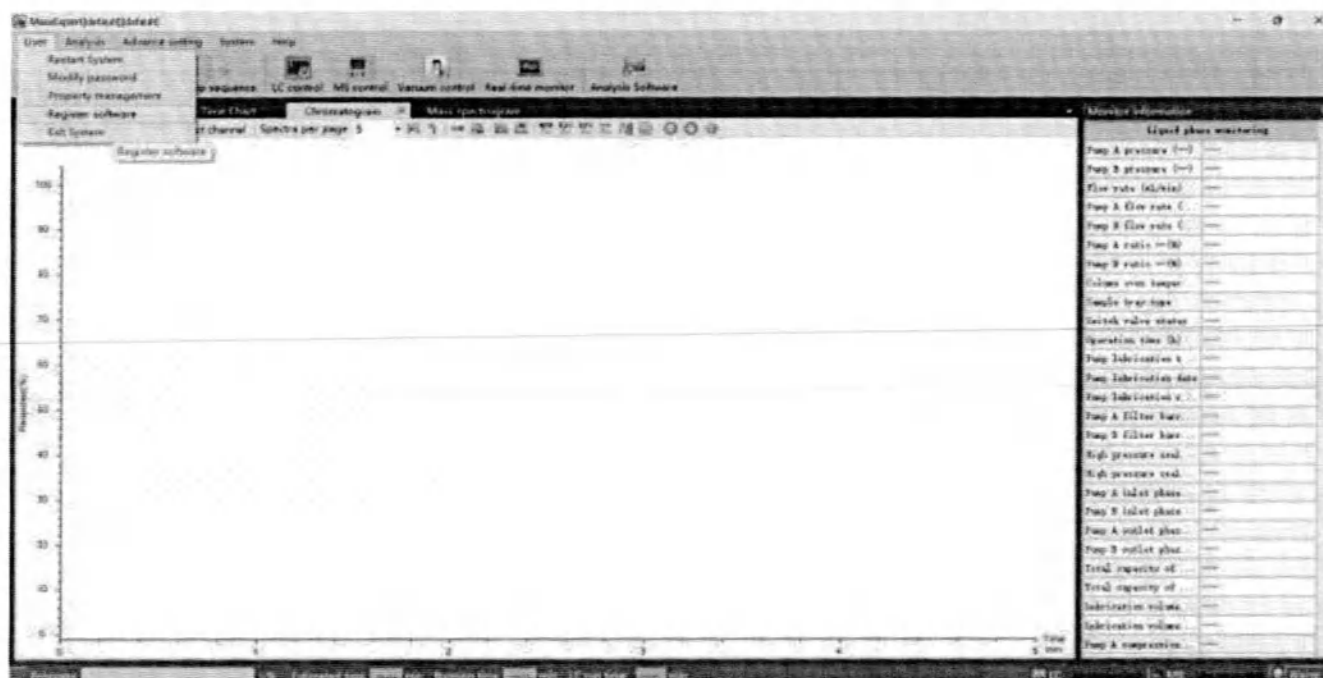


Рисунок 5.2.1. Интерфейс регистрации программного обеспечения (общий вид).



Рисунок 5.2.2. Интерфейс регистрации программного обеспечения (введение регистрационного кода).

ДЛЯ РИСУНКА 5.2.1.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
MassExpert (default) (default)	MassExpert («МассЭксперт») (по умолчанию)
User	Пользователь
Restart System	Повторный запуск системы
Modify password	Изменить пароль
Property management	Управление собственностью
Register software	Регистрировать программное обеспечение
Exit System	Выход из системы
Analysis	Анализ
Advance setting	Дополнительная настройка
System	Система
Help	Помощь
Setup sequence	Последовательность настройки
LC control	Управление жидкостным хроматографом
MS control	Управление масс-спектрометром
Vacuum control	Управление вакуумом

ДЛЯ РИСУНКА 5.2.1.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Real-time monitor	Монитор реального времени
Analysis software	Программное обеспечение для анализа
Time Chart	Карта времени
Chromatogram	Хроматограмма
Mass spectrogram	Масс-спектрограмма
Select channel	Выбрать канал
Spectra per gage	Количество измеряемых спектров
Response (%)	Отклик (%)
Time, min	Время, минут
Progress	Прогресс
Estimated time, min	Расчетное время, мин
Running time, min	Текущее время, мин
LC run time, min	Время работы жидкостного хроматографа
LC	Жидкостной хроматограф
MS	Масс-спектрометр
Alarm	Тревога
Monitor information	Информация монитора
Liquid phase monitoring	Мониторинг жидкой фазы
Unconnected	Не подключен
Pump A pressure	Давление насоса А
Pump B pressure	Давление насоса В
Flow rate (ml/min)	Скорость потока (мл/мин)
Pump A flow rate	Скорость потока насоса А
Pump B flow rate	Скорость потока насоса В
Pump A ratio	Соотношение насоса А
Pump B ratio	Соотношение насоса В
Column oven temperature	Температура термостата колонок
Sample tray type	Тип держателя для образцов
Switch valve status	Статус включения клапана
Operation time	Время работы
Pump lubrication time	Время смазки насоса
Pump lubrication date	Дата смазки насоса
Pump lubrication	Смазка насоса
Pump A filter	Фильтр насоса А
Pump B filter	Фильтр насоса В
High pressure seal	Уплотнение высокого давления
Pump A inlet phase	Входная фаза насоса А
Pump B inlet phase	Входная фаза насоса В
Pump A outlet phase	Выходная фаза насоса А
Pump B outlet phase	Выходная фаза насоса В
Total capacity of ...	Общая производительность...
Lubrication volume	Объем смазки
Pump A progression	Ход насоса А

ДЛЯ РИСУНКА 5.2.2.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Registration information	Информация о регистрации
Enter registration code	Ввести регистрационный код
Current registration code information	Информация о текущем регистрационном коде
Remaining valid days: 0	Осталось действительных дней: 0
Instrument ID:	Идентификационный номер инструмента:
Registration time: 2022/10/27 16:56:20	Время регистрации: 27.10.2022 16:56:20
Last used time: 2022/12/14 10:26:50	Время последнего использования: 14.12.2022 10:26:50
Register	Регистрировать
Cancel	Отменить

5.5.3. Изменение пароля пользователя

Нажмите «Пользователь» в главном интерфейсе программного обеспечения – появится кнопка «Смена пароля», нажмите ее, чтобы отобразить всплывающее окно смены пароля. В появившихся полях введите текущее имя пользователя, правильный текущий пароль, новый пароль и подтверждение нового пароля, после чего нажмите «ОК», как показано на рисунках 5.3.1.–5.3.2.).

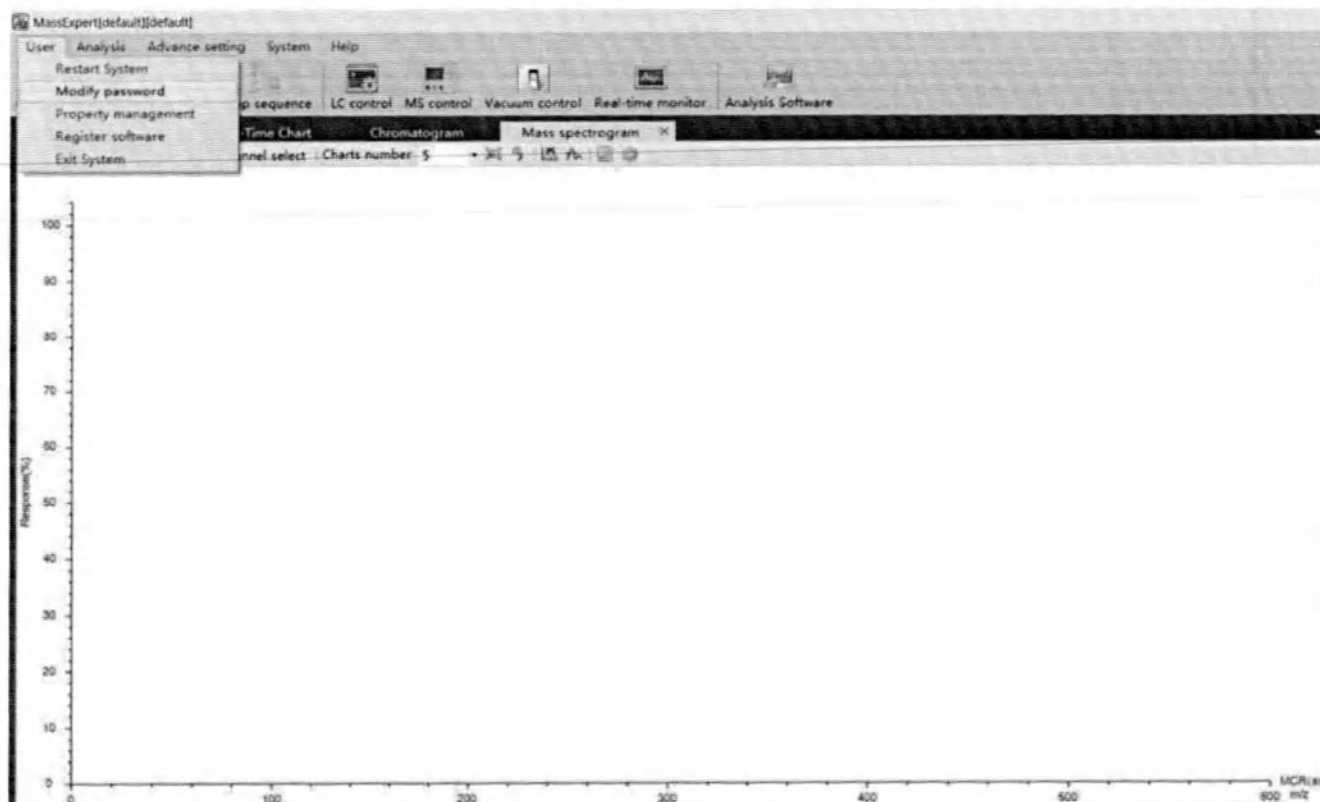


Рисунок 5.3.1. Изменение пароля пользователя (общий вид).



Рисунок 5.3.2. Изменение пароля пользователя (установление нового пароля).

ДЛЯ РИСУНКА 5.3.1.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
MassExpert (default) (default)	MassExpert («МассЭксперт») (по умолчанию)
User	Пользователь
Restart System	Повторный запуск системы
Modify password	Изменить пароль

ДЛЯ РИСУНКА 5.3.1.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Property management	Управление собственностью
Register software	Регистрировать программное обеспечение
Exit System	Выход из системы
Analysis	Анализ
Advance setting	Дополнительная настройка
System	Система
Help	Помощь
Setup sequence	Последовательность настройки
LC control	Управление жидкостным хроматографом
MS control	Управление масс-спектрометром
Vacuum control	Управление вакуумом
Real-time monitor	Монитор реального времени
Analysis software	Программное обеспечение для анализа
Time Chart	Карта времени
Chromatogram	Хроматограмма
Mass spectrogram	Масс-спектрограмма
Response (%)	Отклик (%)
MCR (array) m/z	MCR (матрица) масса/заряд
ДЛЯ РИСУНКА 5.3.2.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Modify password	Изменить пароль
Current user:	Текущий пользователь:
Inner	Внутренний
Original password	Первоначальный пароль
New password	Новый пароль
Please enter the new password again	Введите новый пароль еще раз
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

5.5.4. Изменение информации о пользователе

Возможно изменение имени пользователя и группы, как показано на рисунках 5.4.1–5.4.2.

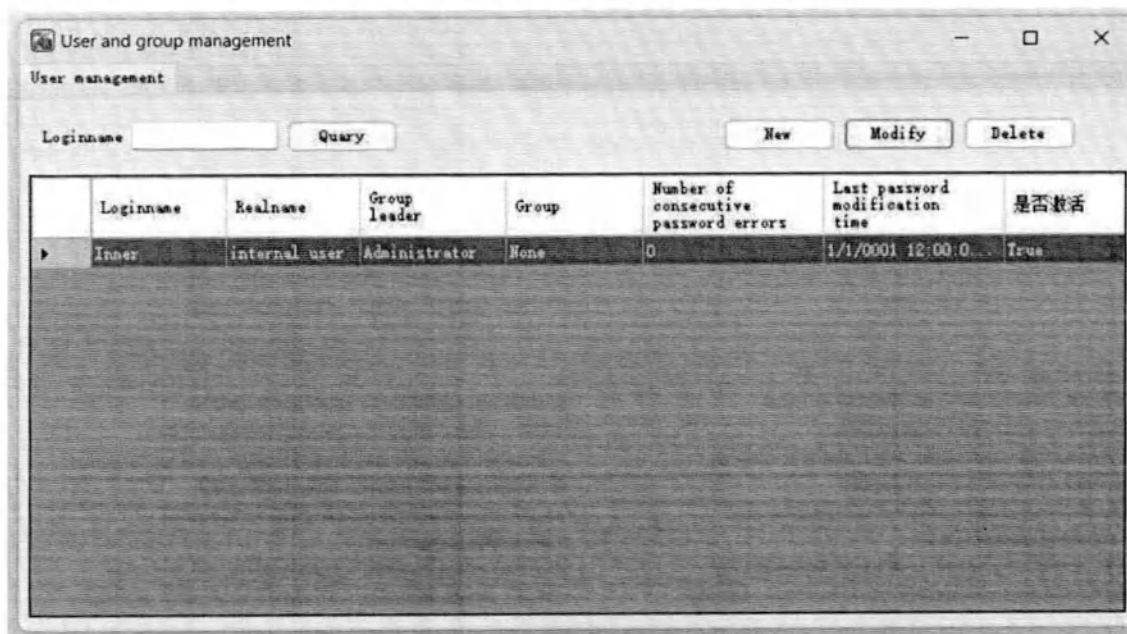
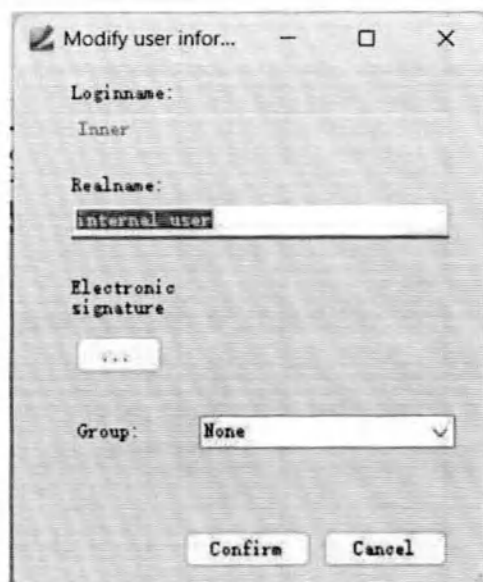


Рисунок 5.4.1. Изменение информации о пользователе.

ДЛЯ РИСУНКА 5.4.1.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
User and group management	Управление пользователем и группой
User management	Управление пользователем
Login name	Регистрационное имя пользователя
Query	Запрос
New	Новый
Modify	Изменить

ДЛЯ РИСУНКА 5.4.1.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Delete	Удалить
Real name	Реальное имя
Group leader	Руководитель группы
Group	Группа
Number of consecutive password errors	Количество последовательных ошибок в пароле
Last password modification time	Время последнего изменения пароля
Inner	Внутренний
Internal user	Внутренний пользователь
Administrator	Администратор
None	Нет
True	Верно



ДЛЯ РИСУНКА 5.4.2.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Modify user information	Информация об изменении пользователя
Login name	Регистрационное имя пользователя
Inner	Внутренний
Real name	Реальное имя
Internal user	Внутренний пользователь
Electronic signature	Электронная подпись
Group	Группа
None	Нет
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

Рисунок 5.4.2. Изменение информации.

5.5.5. Управление правами

Полномочия пользователя программного обеспечения имеют три уровня: супер-администратор (Администратор), обычный администратор, пользователь. Супер-администраторы создают учетные записи обычных администраторов, а обычные администраторы создают учетные записи пользователей.

Пользователь с правами администратора может использовать все функции, кроме расширенных и внутренних.

Пользователь должен использовать учетную запись супер-администратора для создания учетной записи обычного администратора с полными правами. Пароль учетной записи супер-администратора нельзя восстановить после того, как количество попыток ввода превышает установленное количество раз, при этом учетная запись супер-администратора может помочь другим пользователям сбросить пароль.

Нажмите «Пользователь» в главном интерфейсе программного обеспечения, появится кнопка «Управление разрешениями» и всплывающее окно «Управление пользователями». Щелкните левой кнопкой мыши, чтобы выбрать существующую учетную запись, и нажмите «Сбросить пароль».

5.5.6. Управление разрешениями

Для создания учетной записи пользователя заполните соответствующие поля (учетная запись, пароль, имя), как показано на рисунке 5.5.

ДЛЯ РИСУНКА 5.5.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Add user	Добавить пользователя
Login name	Регистрационное имя пользователя
Password	Пароль
Real name	Реальное имя
Signature picture	Изображение подписи
Group	Группа
None	Нет
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

Рисунок 5.5. Создание учетной записи пользователя.

Создание группы показано на рисунке 5.6.

Рисунок 5.6. Создание группы.

ДЛЯ РИСУНКА 5.6.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
User and group management	Управление пользователем и группой
User management	Управление пользователем
Group management	Управление группой
Group name	Наименование группы
Query	Запрос
New	Новый
Modify	Изменить
Delete	Удалить
Group name	Наименование группы
Group leader	Руководитель группы
Description	Описание
Administrator	Администратор
User (Control)	Пользователь (Управление)
Analysis (Control)	Анализ (Управление)
System (Control)	Система (Управление)
Help (Control)	Помощь (Управление)

ДЛЯ РИСУНКА 5.6.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Sample batch sheet (Analysis)	Перечень образцов серии (Анализ)
Qualitative (Analysis)	Качественный (Анализ)
Quantitative (Analysis)	Количественный (Анализ)
Spectrum Library Management (Analysis)	Управление библиотекой спектров (Анализ)
Chart Management (Analysis)	Управление картой (Анализ)
Help (Analysis)	Помощь (Анализ)

Введите имя и описание группы и проверьте разрешения, которые имеет группа. Необходимо отметить, что группы, созданные супер-администратором, являются группами обычных администраторов, каждый из которых может создать собственную группу пользователей, если он имеет на это разрешение (в противном случае управление пользователями невозможно).

2. Назначение разрешений (рисунок 5.7.)



Рисунок 5.7. Назначение разрешений.

ДЛЯ РИСУНКА 5.7.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
User and group management	Управление пользователем и группой
User management	Управление пользователем
Login name	Регистрационное имя пользователя
Query	Запрос
New	Новый
Modify	Изменить
Delete	Удалить
Login name	Регистрационное имя пользователя
Real name	Реальное имя
Group leader	Руководитель группы
Group	Группа
Number of consecutive password errors	Количество последовательных ошибок в пароле
Last password modification time	Время последнего изменения пароля
Inner	Внутренний
Internal user	Внутренний пользователь
Administrator	Администратор
None	Нет
True	Верно
Modify user information	Информация об изменении пользователя
Login name	Регистрационное имя пользователя
Inner	Внутренний
Real name	Реальное имя
Super admin	Супер-администратор
Electronic signature	Электронная подпись

ДЛЯ РИСУНКА 5.7.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Group	Группа
None	Нет
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

Выберите пользователя, которому будут назначены разрешения и нажмите «Изменить», далее выберите разрешения группы, которые необходимо назначить.

5.5.7. Конфигурация опций системы

Нажмите на строку системного меню, далее нажмите «Дополнительные опции» и откройте интерфейс, как показано на рисунке 5.8.

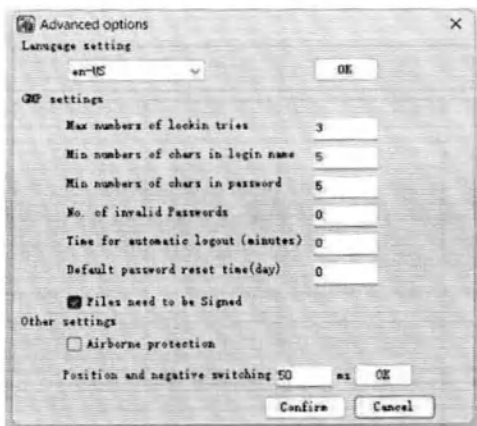


Рисунок 5.8.

Изменение спецификации пароля.

ДЛЯ РИСУНКА 5.8.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Advanced options	Дополнительные опции
Language setting	Настройка языка
En-US	Английский язык (США)
OK	Подтверждение
Max numbers of locking tries	Максимальное количество попыток блокировки
Min number of chars in login name	Минимальное количество знаков в регистрационном имени пользователя
Min numbers of chars in password	Минимальное количество знаков в пароле
No. of invalid passwords	Количество недействительных паролей
Time for automatic logout (minutes)	Время автоматического выхода из системы (минут)
Default password reset time (day)	Заданное по умолчанию время сброса пароля (дней)
Files need to be signed	Файлы, требующие подписания
Other settings	Другие настройки
Airborne protection	Защита от частиц, взвешенных в воздухе
Position and negative switching, ms	Положение и отрицательное включение, мсек
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

Сложность пароля – это количество различных типов символов, необходимых для установки пароля:

111 – сложность 1;

Aa11 сложность 2;

Aaa@11 сложность 3;

Если 0, без ограничений.

Количество попыток ввода пароля можно выбрать до 5 раз, чтобы избежать блокировки учетной записи после трехкратного ввода неправильного пароля.

Если программное обеспечение заблокировано по ошибке, оно перейдет в состояние экранной заставки, и появится возможность войти в него после ввода текущего пароля учетной записи пользователя.

Если значение распознавания электронной подписи включено, необходимо поставить галочку в селекторе файлов во внутренней отладке.

Его цель состоит в том, что последовательности, методы и файлы настройки, созданные пользователями нижнего уровня, могли быть использованы только после их одобрения пользователем верхнего уровня. Интерфейс аутентификации находится в меню аутентификации электронной подписи строки системного меню, как показано на рисунке 5.9.

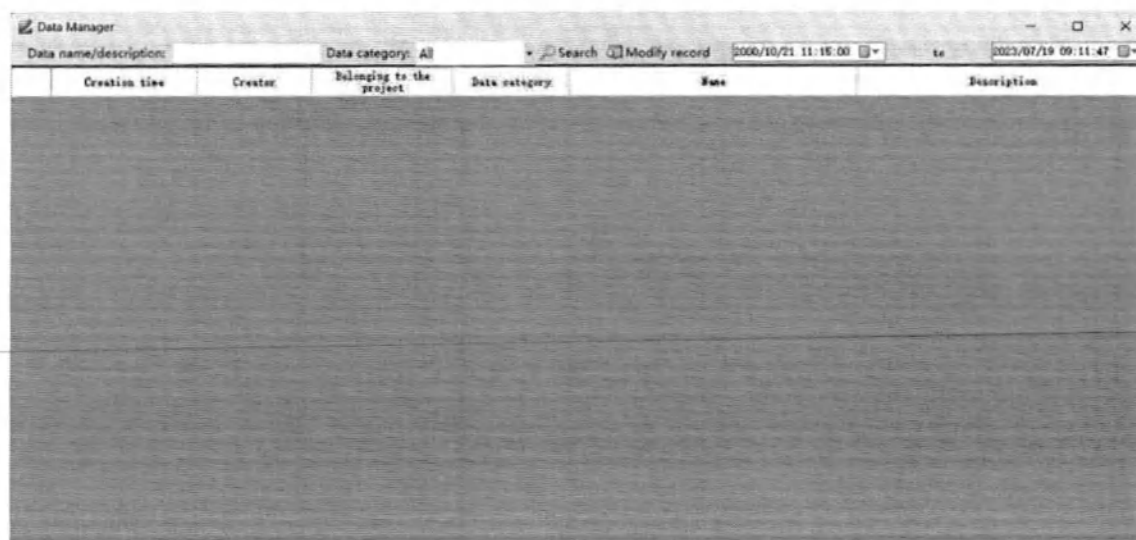


Рисунок 5.9. Электронная подпись.

ДЛЯ РИСУНКА 5.9.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Data Manager	Менеджер данных
Data name/ description	Наименование данных/ описание
Data category: All	Категория данных: Все
Search	Поиск
Modify record... to...	Изменить запись... на...
Creation time	Время создания
Creator	Автор
Belonging to the project	Принадлежность к проекту
Data category	Категория данных
Name	Наименование
Description	Описание

Пользователь верхнего уровня может видеть файл, созданный пользователем нижнего уровня, а пользователь нижнего уровня может использовать данный файл после его утверждения.

Управление правами доступа к файлам показано на рисунке 5.10.

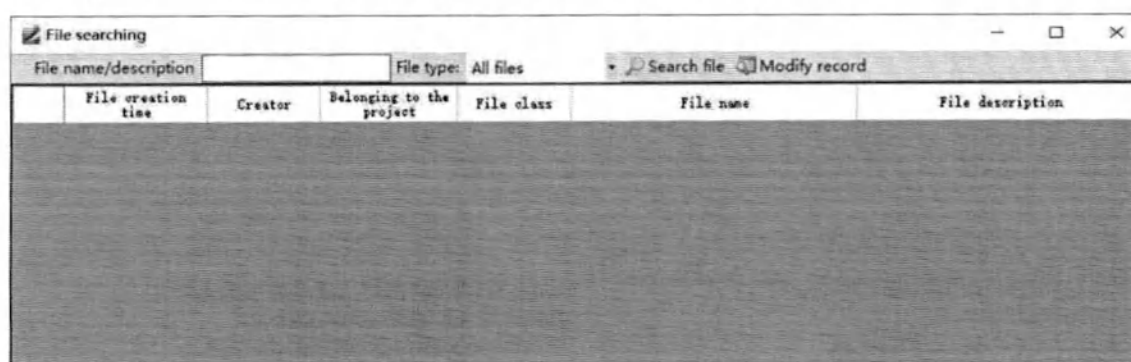


Рисунок 5.10. Управление правами доступа к файлам.

ДЛЯ РИСУНКА 5.10.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File searching	Поиск файла
File name/ description	Наименование файла/ описание
File type: all files	Тип файла: Все файлы
Search file	Поиск файла
Modify record	Изменить запись
File creation time	Время создания
Creator	Автор
Belonging to the project	Принадлежность к проекту
File class	Категория файла
File name	Наименование файла
File description	Описание файла

5.6. Подготовка реагентов

Все стандартные растворы готовятся из стандартных материалов, а стандартные образцы используются в день приготовления. Исходные стандартные растворы чаще всего хранятся в закрытой мерной посуде темного стекла, с указанием молекулярной формулы, концентрации, растворителя, даты приготовления и персонала, выполнившего процедуру приготовления данного раствора. При разбавлении стандартного раствора используют метод последовательных разбавлений (чаще всего используется 10-кратное разбавление для каждого шага).

Ниже приведена процедура приготовления стандартного раствора на примере раствора для настройки масс-спектрометра:

1. Приготовление растворителя: отмерьте равные объемы метанола и сверхчистой воды мерным цилиндром, тщательно перемешайте его перед использованием. Все используемые растворители должны быть чистоты «Для хроматографии» или выше;
2. Разбавьте исходный калибровочный раствор (100 мкг/мл) приготовленным растворителем последовательно до рабочего калибровочного раствора (10 нг/мл) и тщательно перемешайте каждый из них перед использованием.

5.7. Запуск прибора

1. Включите выключатель питания вакуумного насоса;
2. Включите выключатель питания основного блока на задней панели масс-спектрометра;
3. Включите компьютер и дважды щелкните значок программного обеспечения для сбора данных на



рабочем столе, введите регистрационный код программного обеспечения прибора;

4. Щелкните значок «Управление вакуумом» в главном интерфейсе , нажмите на вкладку

«Дополнительно» , когда вакуум камеры столкновений находится в диапазоне 2–3 Торр, нажмите кнопку «Начать вакуум», индикатор состояния вакуума станет зеленым, а на индикаторе выполнения отобразится «Запуск молекулярного насоса».

Предупреждение. Не разрешается включать молекулярный насос без включения вакуумного насоса. При запуске молекулярного насоса появится соответствующее предупреждение. Обязательно убедитесь, что вакуумный насос работает, иначе молекулярный насос будет поврежден.

Весь процесс занимает 1–2 часа. Когда скорость молекулярного насоса стабильна на уровне 1000 Гц, а вакуум в камере ячейки столкновений достигает $1,0 \times 10^{-5}$ Торр, нажмите кнопку «Возобновить» и приступайте к работе.

После выключения прибора на длительное время и повторного включения рекомендуется включить на ночь, чтобы удалить остатки водяного пара внутри (рисунок 5.11.).



Рисунок 5.11.
Интерфейс управления вакуумом.

ДЛЯ РИСУНКА 5.11.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Vacuum control	Управление вакуумом
Automatic operation	Автоматическая работа
Standby	Режим готовности
Recovery	Возврат к заданному значению
Automatic start	Автоматический пуск
Automatic stop	Автоматическая остановка
Cancel	Отменить
Advanced	Дополнительный
Vacuum system	Вакуумная система
Gas control:	Управление газом:
Gas on/Gas off	Газ включен/газ выключен
Temperature control: Start heating/Stop heating	Управление температурой/Пуск нагрева/Остановка нагрева
Vacuum state:	Состояние вакуума:
Loading/Unloading	Загрузка/Выгрузка
Vacuum pressure monitor	Монитор давления вакуума
Molecular pump current, A	Ток молекулярного насоса, А
Molecular pump speed, Hz	Скорость молекулярного насоса, Гц
CID cell, Torr	Ячейка CID (диссоциации, вызванной столкновениями), мм рт. ст.
Analyzer Chamber, Torr	Камера анализатора, мм рт. ст.

5. Включите выключатель питания каждого модуля жидкостного хроматографа.

5.8. Модуль мониторинга

Интерфейс модуля мониторинга показан на рисунке 5.12.

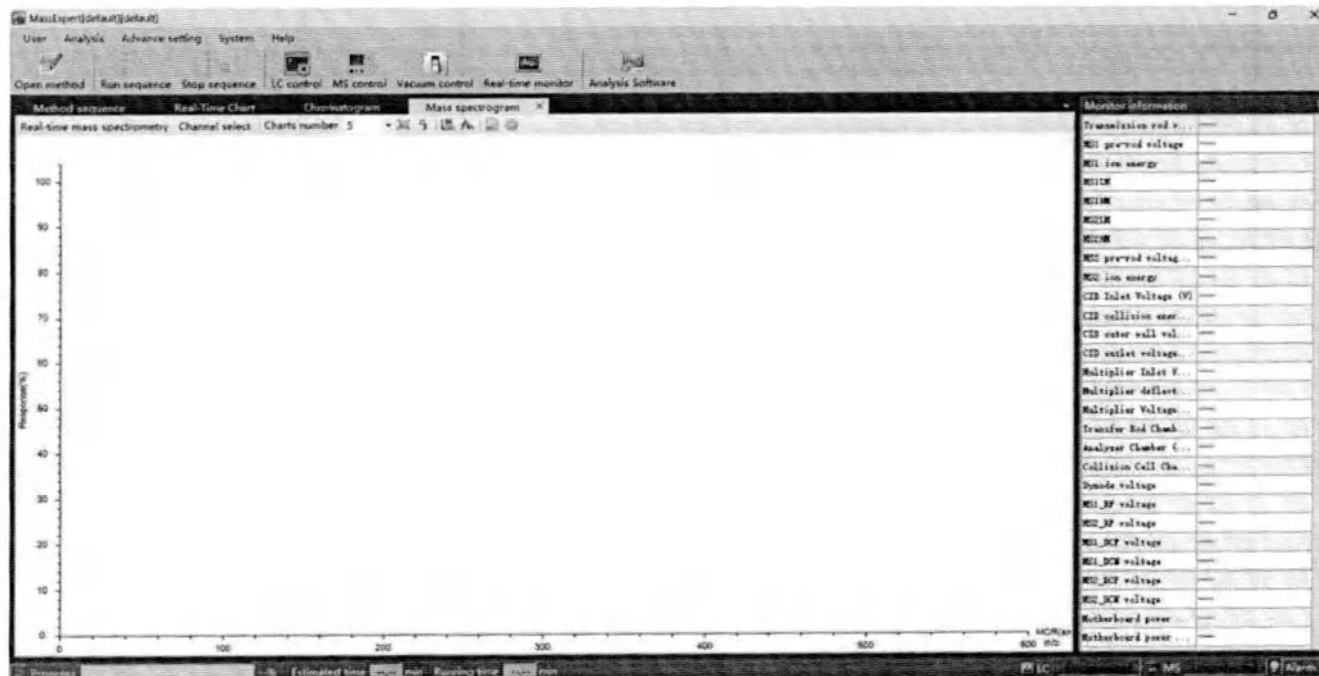


Рисунок 5.12. Интерфейс модуля мониторинга.

ДЛЯ РИСУНКА 5.12.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
MassExpert (default) (default)	MassExpert («МассЭксперт») (по умолчанию)
User	Пользователь
Analysis	Анализ
Advance setting	Дополнительная настройка
System	Система
Help	Помощь

ДЛЯ РИСУНКА 5.12.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Open method	Открыть метод
Run sequence	Запуск последовательности
Stop sequence	Остановка последовательности
LC control	Управление жидкостным хроматографом
MS control	Управление масс-спектрометром
Vacuum control	Управление вакуумом
Real-time monitor	Монитор реального времени
Analysis software	Программное обеспечение для анализа
Method sequence	Последовательность метода
Real-time Chart	Карта в реальном времени
Chromatogram	Хроматограмма
Mass spectrogram	Массо-спектрограмма
Real-time mass spectrometry	Масс-спектрометрия в реальном времени
Channel select	Выбранный канал
Charts number	Количество карт
Response (%)	Отклик (%)
MCR (array) m/z	MCR (матрица) масса-заряд
Progress	Прогресс
Estimated time, min	Расчетное время, мин
Running time, min	Текущее время, мин
LC run time, min	Время работы жидкостного хроматографа
LC	Жидкостной хроматограф
MS	Масс-спектрометр
Unconnected	Не подключен
Alarm	Тревога
Monitor information	Информация монитора
Transmission rod v...	Напряжение на трансмиссионном стержне
MS1 pre-rod voltage	Напряжение перед стержнем MS1
MS1 ion energy	Энергия ионов MS1
MS1LM	Модуль масс-спектрометрии 1 с низким разрешением
MS1HM	Модуль масс-спектрометрии 1 с высоким разрешением
MS2LM	Модуль масс-спектрометрии 2 с низким разрешением
MS2HM	Модуль масс-спектрометрии 2 с высоким разрешением
MS2 pre-rod voltage	Напряжение перед стержнем MS2
MS2 ion energy	Энергия ионов MS2
CID Inlet Voltage (V)	Напряжение на входе в ячейку диссоциации, вызванное столкновением (CID) (В)
CID collision energy	Энергия столкновений в ячейке CID
CID outer wall voltage	Напряжение на наружной стенке ячейки CID
CID outlet voltage	Напряжение на выходе ячейки CID
Multiplier Inlet V...	Напряжение на входе умножителя
Multiplier deflection...	Отклонение умножителя
Multiplier Voltage	Напряжение умножителя
Transfer Rod Chamber	Камера трансмиссионного стержня
Analyzer Chamber	Камера анализатора
Collision Cell Chamber	Камера ячейки столкновений
Dynode voltage	Напряжение динода
MS1 RF voltage	Напряжение MS1 RF
MS2 RF voltage	Напряжение MS2 RF
MS1 DCP voltage	Напряжение MS1 DCP
MS1 DCN voltage	Напряжение MS1 DCN
MS2 DCP voltage	Напряжение MS2 DCP
MS2 DCN voltage	Напряжение MS2 DCN
Motherboard power...	Питание материнской платы

Когда программное обеспечение открыто, информация мониторинга параметров напряжения, температуры, расхода и давления прибора будет отображаться по умолчанию, также будет отображаться скорость потока и соответствующий мониторинг жидкостного хроматографа (рисунок 5.13.):

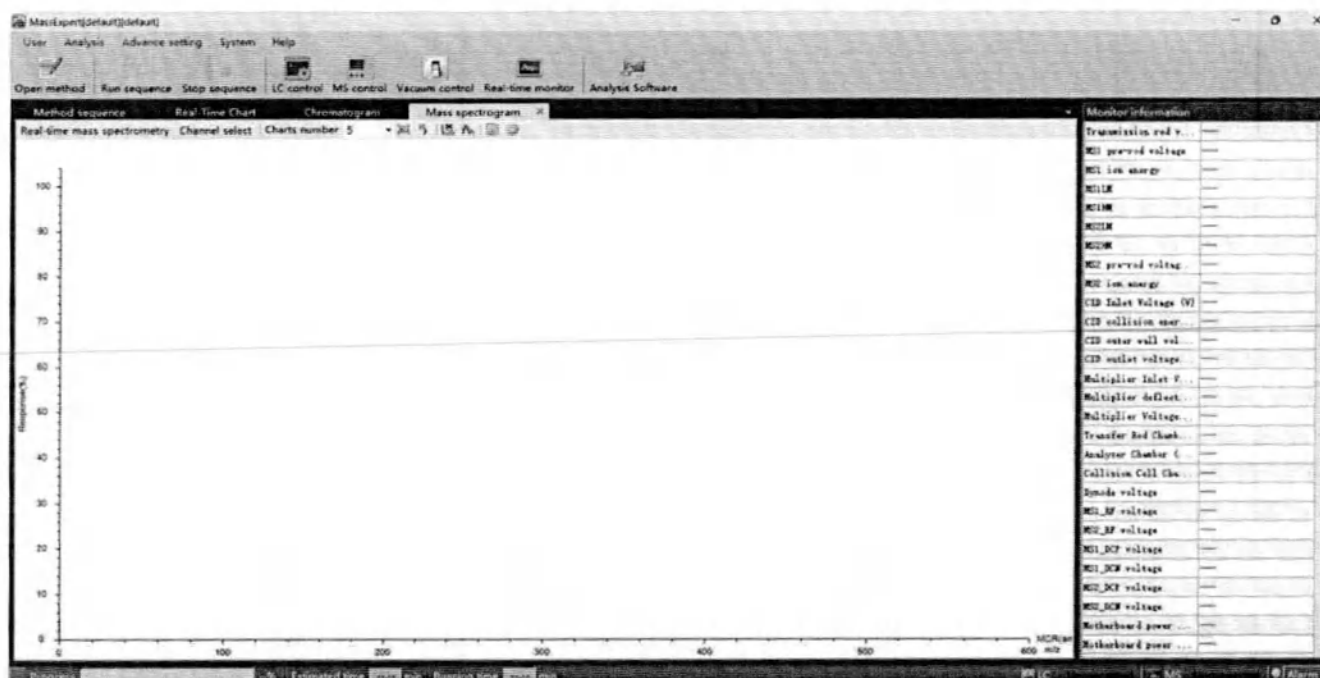


Рисунок 5.13. Интерфейс мониторинга в реальном времени.

ДЛЯ РИСУНКА 5.13.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
MassExpert (default) (default)	MassExpert («МассЭксперт») (по умолчанию)
User	Пользователь
Analysis	Анализ
Advance setting	Дополнительная настройка
System	Система
Help	Помощь
Open method	Открыть метод
Run sequence	Запуск последовательности
Stop sequence	Остановка последовательности
LC control	Управление жидкостным хроматографом
MS control	Управление масс-спектрометром
Vacuum control	Управление вакуумом
Real-time monitor	Монитор реального времени
Analysis software	Программное обеспечение для анализа
Method sequence	Последовательность метода
Real-time Chart	Карта в реальном времени
Chromatogram	Хроматограмма
Mass spectrogram	Масс-спектрограмма
Real-time mass spectrometry	Масс-спектрометрия в реальном времени
Channel select	Выбранный канал
Charts number	Количество карт
Response (%)	Отклик (%)
MCR (array) m/z	MCR (матрица) масса-заряд
Progress	Прогресс
Estimated time, min	Расчетное время, мин
Running time, min	Текущее время, мин
LC run time, min	Время работы жидкостного хроматографа
LC	Жидкостной хроматограф
MS	Масс-спектрометр
Unconnected	Не подключен
Alarm	Тревога
Monitor information	Информация монитора
Transmission rod v...	Напряжение на трансмиссионном стержне
MS1 pre-rod voltage	Напряжение перед стержнем MS1
MS1 ion energy	Энергия ионов MS1
MS1LM	Модуль масс-спектрометрии 1 с низким разрешением
MS1HM	Модуль масс-спектрометрии 1 с высоким разрешением
MS2LM	Модуль масс-спектрометрии 2 с низким разрешением
MS2HM	Модуль масс-спектрометрии 2 с высоким разрешением

ДЛЯ РИСУНКА 5.13.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
MS2 pre-rod voltage	Напряжение перед стержнем MS2
MS2 ion energy	Энергия ионов MS2
CID Inlet Voltage (V)	Напряжение на входе в ячейку диссоциации, вызванное столкновением (CID) (В)
CID collision energy	Энергия столкновений в ячейке CID
CID outer wall voltage	Напряжение на наружной стенке ячейки CID
CID outlet voltage	Напряжение на выходе ячейки CID
Multiplier Inlet V...	Напряжение на входе умножителя
Multiplier deflection...	Отклонение умножителя
Multiplier Voltage	Напряжение умножителя
Transfer Rod Chamber	Камера трансмиссионного стержня
Analyzer Chamber	Камера анализатора
Collision Cell Chamber	Камера ячейки столкновений
Dynode voltage	Напряжение динода
MS1 RF voltage	Напряжение MS1 RF
MS2 RF voltage	Напряжение MS2 RF
MS1 DCP voltage	Напряжение MS1 DCP
MS1 DCN voltage	Напряжение MS1 DCN
MS2 DCP voltage	Напряжение MS2 DCP
MS2 DCN voltage	Напряжение MS2 DCN
Motherboard power...	Питание материнской платы

При нажатии кнопки мониторинга в реальном времени появится его всплывающий интерфейс, отображающий график изменений в работе насоса бинарного ультравысокого давления в режиме реального времени или изменений температурных параметров масс-спектрометра.

5.9. Модуль сигнала тревоги

Нажав кнопку сигнала тревоги в строке системного меню, можно открыть интерфейс сигнала тревоги, как показано на рисунках 5.14–5.15.



Рисунок 5.14. Интерфейс текущего сигнала тревоги.

ДЛЯ РИСУНКА 5.14.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Query Alarm	Запрос сигнала тревоги
Current alarm	Текущий сигнал тревоги
History alarm	История сигнала тревоги
Alarm code	Код сигнала тревоги
Alarm name	Наименование сигнала тревоги
Alarm source	Источник сигнала тревоги
Alarm grade	Класс сигнала тревоги
Alarm first time	Первый сигнал тревоги
Alarm refresh time	Время обновления сигнала тревоги
Alarm description	Описание сигнала тревоги
Refresh	Обновить

Рисунок 5.15. Интерфейс истории сигнала тревоги.

ДЛЯ РИСУНКА 5.15.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Query Alarm	Запрос сигнала тревоги
Current alarm	Текущий сигнал тревоги
History alarm	История сигнала тревоги
Alarm scale	Масштаб сигнала тревоги
Alarm source	Источник сигнала тревоги
The first time alarm for	Первый сигнал тревоги
Query	Запрос
Code	Код
Name	Наименование
Source	Источник
Alarm grade	Класс сигнала тревоги
Alarm first time	Первый сигнал тревоги
Alarm refresh time	Время обновления сигнала тревоги
Alarm remove time	Время прекращения сигнала тревоги
Alarm description	Описание сигнала тревоги

Интерфейс текущего сигнала тревоги отображает текущие тревоги. После того, как сигнал тревоги будет сброшен, он не будет отображаться в этом интерфейсе. В интерфейсе истории сигналов тревоги можно выбрать время первого сигнала тревоги, затем заполнить период времени и нажать кнопку запроса, чтобы запросить все сигналы тревоги за период времени.

5.10. Запуск метода

5.10.1. Создание и импорт проекта

1. В главном интерфейсе программного обеспечения в верхней строке меню в «Анализ» выберите «Новый проект» – в данном окне введите «Имя файла» и «Описание проекта» (интерфейс дисплея показан на рисунке ниже). Также можно нажать «Открыть проект», чтобы импортировать пользователя перед сохраненным элементом, как показано на рисунке 5.16.

Рисунок 5.16. Новый интерфейс проекта.

ДЛЯ РИСУНКА 5.16.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
New project	Новый проект
File name	Наименование файла
Project description	Описание проекта
From selected items	Из выбранных элементов
Copy method files	Копировать файлы метода
Copy tune files	Копировать файлы настройки
Copy quantitative files	Копировать количественные файлы
Copy qualitative files	Копировать качественные файлы
File creation time	Время создания файла
Creator	Автор
Belonging to the project	Принадлежность к проекту
File class	Класс файла
File name	Наименование файла
File description	Описание файла
Whether to review	Подлежит ли рассмотрению
Reviewer	Рецензент
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

2. Выбрав «Информация о проекте» в верхней строке меню основного интерфейса программного обеспечения в «Анализ», можно узнать всю информацию о проекте текущего программного обеспечения.

5.10.2. Создание и импорт последовательности

1. Выбрав «Новая последовательность» в главном интерфейсе программного обеспечения в верхней строке меню в «Анализ» и введя «Имя файла» и «Причина модификации», можно также нажать «Открыть последовательность», чтобы импортировать ранее сохраненную в «Пользователь» последовательность, как показано на рисунках 5.17.1–5.17.3.

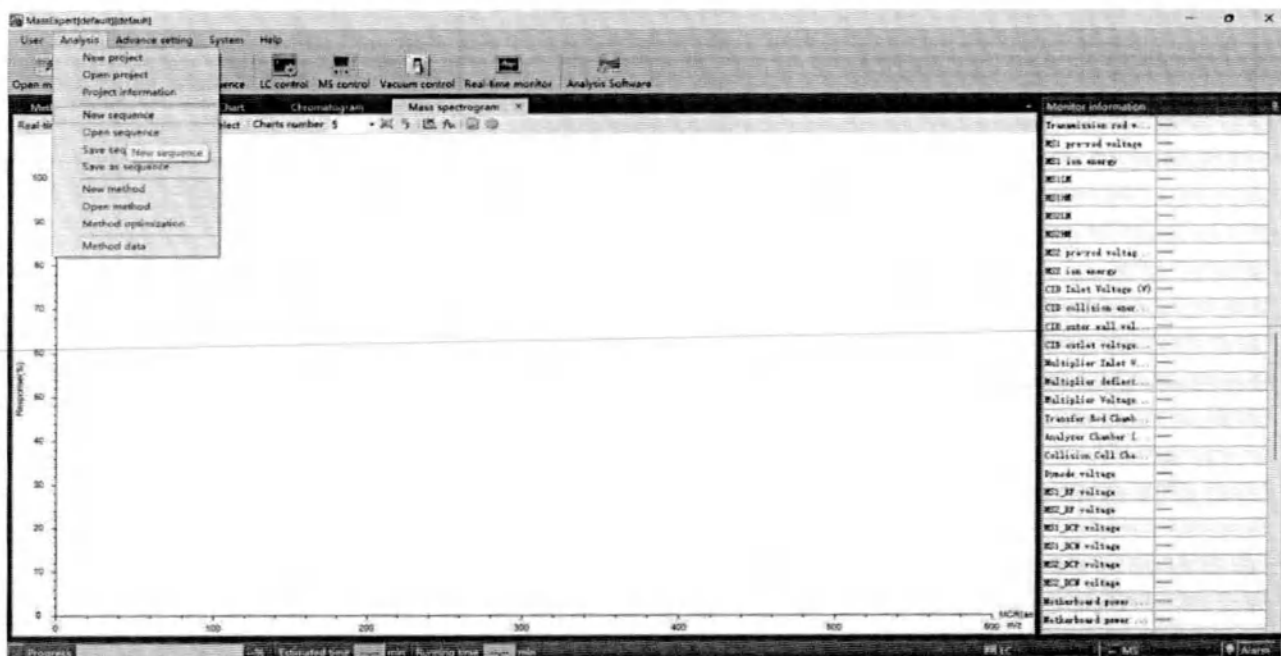


Рисунок 5.17.1. Интерфейс новой последовательности (в строке меню в «Анализ»).

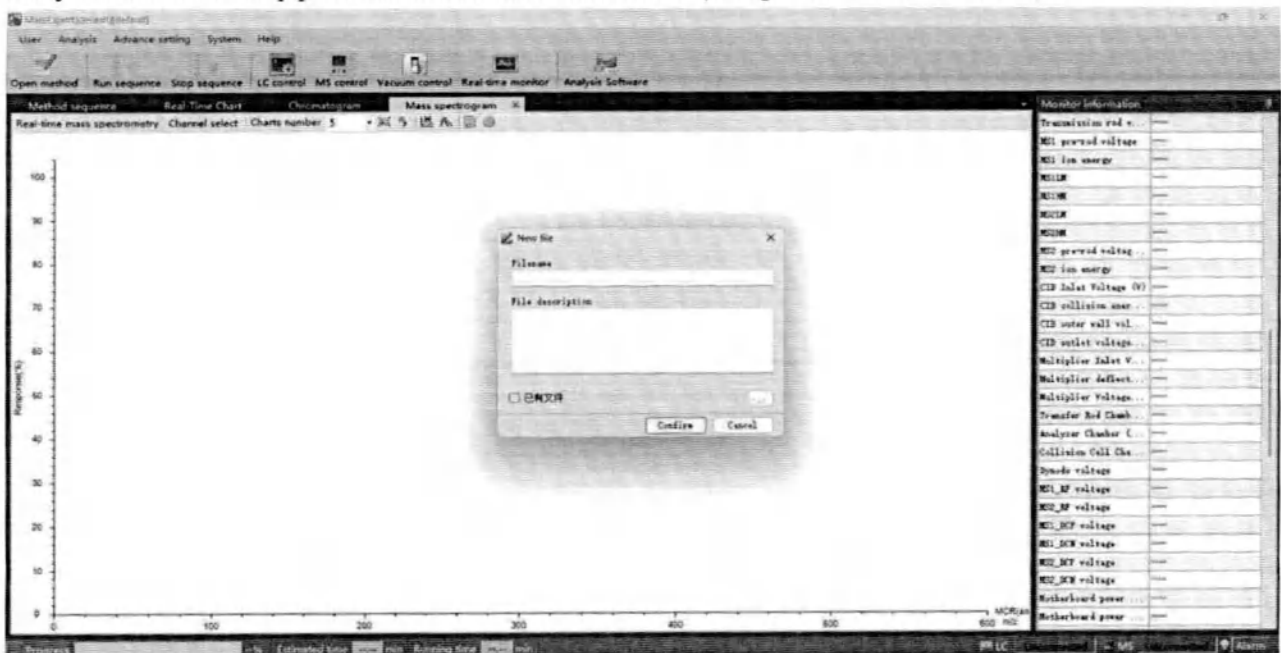


Рисунок 5.17.2. Интерфейс новой последовательности (новый файл).

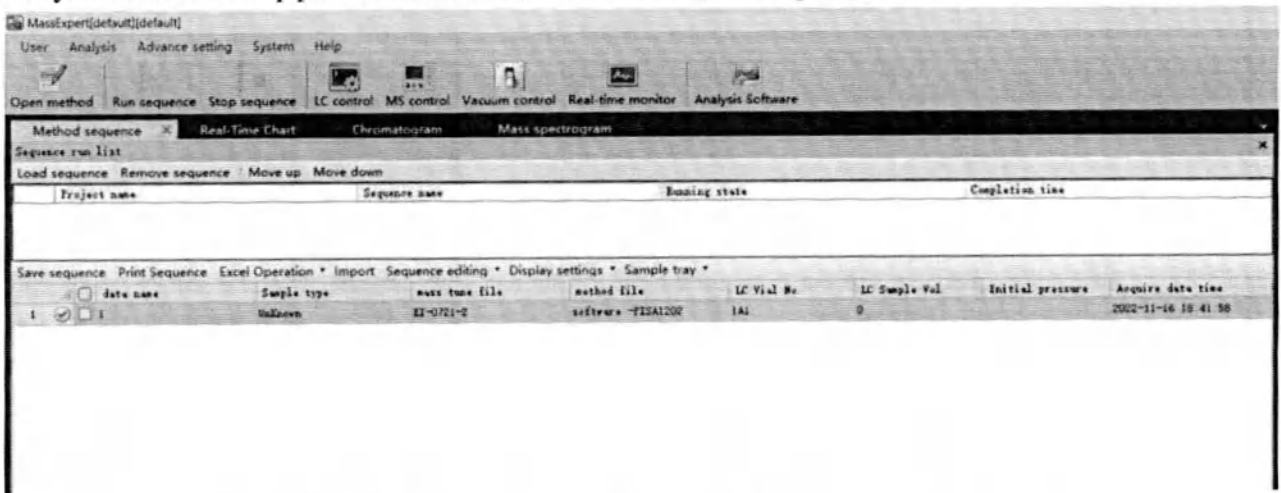


Рисунок 5.17.3. Интерфейс новой последовательности (метод последовательности).

ДЛЯ РИСУНКА 5.17.1.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
MassExpert (default) (default)	MassExpert («МассЭксперт») (по умолчанию)
User	Пользователь
Analysis	Анализ
New project	Новый проект
Open project	Открытый проект
New sequence	Новая последовательность
Open sequence	Открыть последовательность
Save sequence	Сохранить
New method	Новый метод
Open method	Открыть метод
Method optimization	Оптимизация метода
Method data	Данные метода
Advance setting	Дополнительная настройка
System	Система
Help	Помощь
Run sequence	Запуск последовательности
Stop sequence	Остановка последовательности
LC control	Управление жидкостным хроматографом
MS control	Управление масс-спектрометром
Vacuum control	Управление вакуумом
Real-time monitor	Монитор реального времени
Analysis software	Программное обеспечение для анализа
Method sequence	Последовательность метода
Real-time Chart	Карта в реальном времени
Chromatogram	Хроматограмма
Mass spectrogram	Масс-спектрограмма
Real-time mass spectrometry	Масс-спектрометрия в реальном времени
Channel select	Выбрать канал
Charts number	Количество карт
Response (%)	Отклик (%)
MCR (array) m/z	MCR (матрица) масса-заряд
Progress	Прогресс
Estimated time, min	Расчетное время, мин
Running time, min	Текущее время, мин
LC	Жидкостной хроматограф
MS	Масс-спектрометр
Unconnected	Не подключен
Alarm	Тревога
Monitor information	Информация монитора
Transmission rod v...	Напряжение на трансмиссионном стержне
MS1 pre-rod voltage	Напряжение перед стержнем MS1
MS1 ion energy	Энергия ионов MS1
MS1LM	Модуль масс-спектрометрии 1 с низким разрешением
MS1HM	Модуль масс-спектрометрии 1 с высоким разрешением
MS2LM	Модуль масс-спектрометрии 2 с низким разрешением
MS2HM	Модуль масс-спектрометрии 2 с высоким разрешением
MS2 pre-rod voltage	Напряжение перед стержнем MS2
MS2 ion energy	Энергия ионов MS2
CID Inlet Voltage (V)	Напряжение на входе в ячейку диссоциации, вызванное столкновением (CID) (В)
CID collision energy	Энергия столкновений в ячейке CID
CID outer wall voltage	Напряжение на наружной стенке ячейки CID
CID outlet voltage	Напряжение на выходе ячейки CID
Multiplier Inlet V...	Напряжение на входе умножителя
Multiplier deflection...	Отклонение умножителя
Multiplier Voltage	Напряжение умножителя
Transfer Rod Chamber	Камера трансмиссионного стержня
Analyzer Chamber	Камера анализатора
Collision Cell Chamber	Камера ячейки столкновений
Dynode voltage	Напряжение динода
MS1 RF voltage	Напряжение MS1 RF
MS2 RF voltage	Напряжение MS2 RF
MS1 DCP voltage	Напряжение MS1 DCP
MS1 DCN voltage	Напряжение MS1 DCN
MS2 DCP voltage	Напряжение MS2 DCP
MS2 DCN voltage	Напряжение MS2 DCN
Motherboard power...	Питание материнской платы

ДЛЯ РИСУНКА 5.17.2.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
MassExpert (default) (default)	MassExpert («МассЭксперт») (по умолчанию)
User	Пользователь
Analysis	Анализ
Advance setting	Дополнительная настройка
System	Система
Help	Помощь
Open method	Открыть метод
Run sequence	Запуск последовательности
Stop sequence	Остановка последовательности
LC control	Управление жидкостным хроматографом
MS control	Управление масс-спектрометром
Vacuum control	Управление вакуумом
Real-time monitor	Монитор реального времени
Analysis software	Программное обеспечение для анализа
Method sequence	Последовательность метода
Real-time Chart	Карта в реальном времени
Chromatogram	Хроматограмма
Mass spectrogram	Масс-спектрограмма
Real-time mass spectrometry	Масс-спектрометрия в реальном времени
Channel select	Выбранный канал
Charts number	Количество карт
Response (%)	Отклик (%)
MCR (air) m/z	MCR (матрица) масса-заряд
Progress	Прогресс
Estimated time, min	Расчетное время, мин
Running time, min	Текущее время, мин
LC	Жидкостной хроматограф
MS	Масс-спектрометр
Unconnected	Не подключен
Alarm	Тревога
Monitor information	Информация монитора
Transmission rod v...	Напряжение на трансмиссионном стержне
MS1 pre-rod voltage	Напряжение перед стержнем MS1
MS1 ion energy	Энергия ионов MS1
MS1LM	Модуль масс-спектрометрии 1 с низким разрешением
MS1HM	Модуль масс-спектрометрии 1 с высоким разрешением
MS2LM	Модуль масс-спектрометрии 2 с низким разрешением
MS2HM	Модуль масс-спектрометрии 2 с высоким разрешением
MS2 pre-rod voltage	Напряжение перед стержнем MS2
MS2 ion energy	Энергия ионов MS2
CID Inlet Voltage (V)	Напряжение на входе в ячейку диссоциации, вызванное столкновением (CID) (В)
CID collision energy	Энергия столкновений в ячейке CID
CID outer wall voltage	Напряжение на наружной стенке ячейки CID
CID outlet voltage	Напряжение на выходе ячейки CID
Multiplier Inlet V...	Напряжение на входе умножителя
Multiplier deflection...	Отклонение умножителя
Multiplier Voltage	Напряжение умножителя
Transfer Rod Chamber	Камера трансмиссионного стержня
Analyzer Chamber	Камера анализатора
Collision Cell Chamber	Камера ячейки столкновений
Dynode voltage	Напряжение динода
MS1 RF voltage	Напряжение MS1 RF
MS2 RF voltage	Напряжение MS2 RF
MS1 DCP voltage	Напряжение MS1 DCP
MS1 DCN voltage	Напряжение MS1 DCN
MS2 DCP voltage	Напряжение MS2 DCP
MS2 DCN voltage	Напряжение MS2 DCN
Motherboard power...	Питание материнской платы
New file	Новый файл
Filename	Наименование файла
File description	Описание файла
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

ДЛЯ РИСУНКА 5.17.3.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
MassExpert (default) (default)	MassExpert («МассЭксперт») (по умолчанию)
User	Пользователь
Analysis	Анализ
Advance setting	Дополнительная настройка
System	Система
Help	Помощь
Open method	Открыть метод
Run sequence	Запуск последовательности
Stop sequence	Остановка последовательности
LC control	Управление жидкостным хроматографом
MS control	Управление масс-спектрометром
Vacuum control	Управление вакуумом
Real-time monitor	Монитор реального времени
Analysis software	Программное обеспечение для анализа
Method sequence	Последовательность метода
Real-time Chart	Карта в реальном времени
Chromatogram	Хроматограмма
Mass spectrogram	Масс-спектрограмма
Sequence run list	Список выполнения последовательности
Load sequence	Загрузить последовательность
Remove sequence	Удалить последовательность
Move up	Двигаться вверх
Move down	Двигаться вниз
Project name	Наименование проекта
Sequence name	Наименование последовательности
Running state	Состояние выполнения
Completion time	Время завершения
Save sequence	Сохранить последовательность
Print sequence	Распечатать последовательность
Excel operation	Операция в формате Excel
Import sequence editing	Импортировать редактирование последовательности
Display settings	Отобразить настройки
Sample tray	Держатель для образцов
Data name	Наименование данных
Sample type – Unknown	Тип образца – Неизвестен
Mass tune file – EI0721-2	Файл настройки массы – EI0721-2
Method file – Software – PISA1202	Файл метода – Программное обеспечение – PISA1202
LC Vial No. – 1A1	Номер виалы для жидкостного хроматографа – 1A1
LC sample vol. – 0	Объем образца для жидкостного хроматографа – 0
Initial pressure	Начальное давление
Acquire data time – 2022-11-16 16:41:58	Время получения данных – 2022-11-16 16:41:58

2. Выбрав «Пользовательские» в «Параметры отображения», можно настроить таблицу последовательности во всплывающем диалоговом окне (дополнительные элементы настройки показаны на рисунке ниже), конфигурация выглядит *следующим* образом:

- 1) Имя данных: Введите имя файла данных, сохраненного при сборе данных при анализе образца (имя данных должно быть другим, иначе оно будет перезаписано);
- 2) Папка данных: Введите папку, в которой сохраняются файлы данных (все папки сохраняются во вторичном каталоге папки данных в текущем проекте; если значение не введено, они сохраняются непосредственно в папке данных);
- 3) Примечания: Введите текстовое описание для каждого образца, его можно оставить пустым;
- 4) Имя образца: Введите имя каждого образца, имя образца может быть таким же или может быть оставлено пустым;
- 5) Тип образца: Укажите тип образца (образец, контрольный образец, калибровка или контроль качества). По умолчанию используется «Образец»; если это стандартный образец, выберите «Калибровка»; если это образец для контроля качества, выберите «Контроль качества»;
- 6) Файлы настройки: Вызов разных файлов настройки для разных семплов;
- 7) Файл метода: Выберите метод сбора данных для анализа образца, включая методы LC («ЖХ») и MS (МС);
- 8) Номер виалы: Выберите местоположение виалы;
- 9) Объем ввода: Установите объем ввода образца;
- 10) Начальное давление: Начальное давление жидкой фазы в момент начала сбора данных, в барах;

- 11) Время сбора: После запуска образца время окончания сбора будет автоматически отображаться в интерфейсе (рисунок 5.18.).

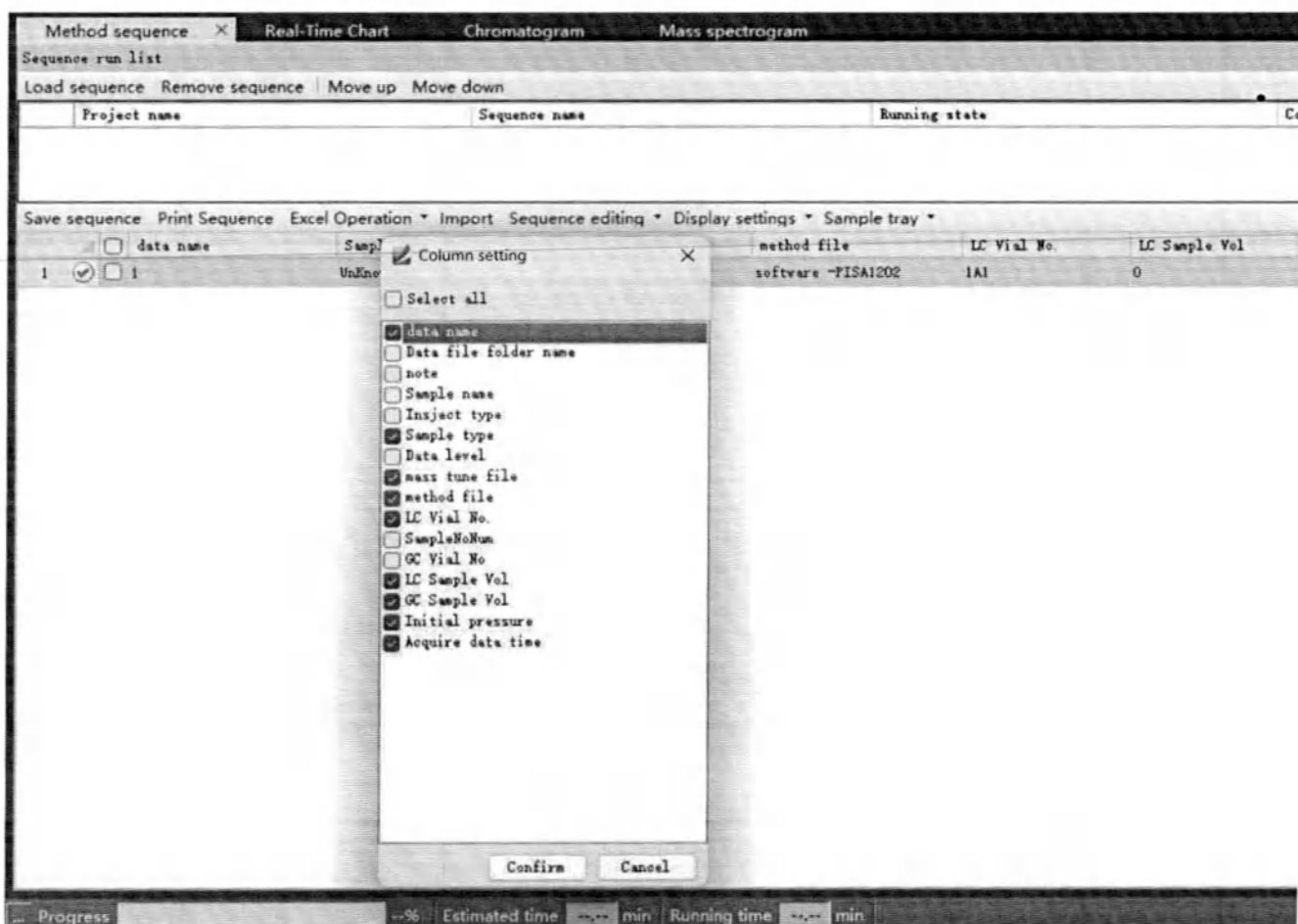


Рисунок 5.18. Интерфейс настраиваемых параметров.

ДЛЯ РИСУНКА 5.18.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Method sequence	Последовательность метода
Real-time Chart	Карта в реальном времени
Chromatogram	Хроматограмма
Mass spectrogram	Масс-спектрограмма
Sequence run list	Список выполнения последовательности
Load sequence	Загрузить последовательность
Remove sequence	Удалить последовательность
Move up	Двигаться вверх
Move down	Двигаться вниз
Project name	Наименование проекта
Sequence name	Наименование последовательности
Running state	Состояние выполнения
Completion time	Время завершения
Save sequence	Сохранить последовательность
Print sequence	Распечатать последовательность
Excel operation	Операция в формате Excel
Import sequence editing	Импортировать редактирование последовательности
Display settings	Отобразить настройки
Sample tray	Держатель для образцов
Data name	Наименование данных
Sample type – Unknown	Тип образца – Неизвестен
Mass tune file – EI0721-2	Файл настройки массы – EI0721-2
Method file – Software – PISA1202	Файл метода – Программное обеспечение – PISA1202
LC Vial No. – 1A1	Номер вials для жидкостного хроматографа – 1A1
LC sample vol. – 0	Объем образца для жидкостного хроматографа – 0
Initial pressure	Начальное давление
Acquire data time – 2022-11-16 16:41:58	Время получения данных – 2022-11-16 16:41:58
Progress	Прогресс

ДЛЯ РИСУНКА 5.18.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Estimated time, min	Расчетное время, мин
Running time, min	Текущее время, мин
Column setting	Параметры колонки
Select all	Выбрать все
Data name	Наименование данных
Data file folder name	Наименование папки с файлом данных
Note	Примечание
Sample name	Наименование образца
Inject type	Тип ввода
Sample type	Тип образца
Data level	Уровень данных
Mass tune file	Файл настройки массы
Method file	Файл метода
LC vial No.	Номер виалы для жидкостного хроматографа
Sample No Num	Номер образца
GC vial No.	Номер виалы для газового хроматографа
LC sample vol.	Объем образца для жидкостного хроматографа
GC sample vol.	Объем образца для газового хроматографа
Initial pressure	Начальное давление
Acquire data time	Время получения данных
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

3. В раскрывающемся меню «Редактирование последовательности» выберите «Добавить», установите количество добавляемых образцов или отметьте «Новый из библиотеки методов», войдите в библиотеку методов, выберите последовательность для экспорта, нажмите , экспортируйте информацию о последовательности в библиотеку методов. При этом можно выполнять операции Copy («Копировать»), Add («Добавить»), Insert («Вставить») и Delete («Удалить») в текущей последовательности, как показано на рисунках 5.19.1–5.19.2.

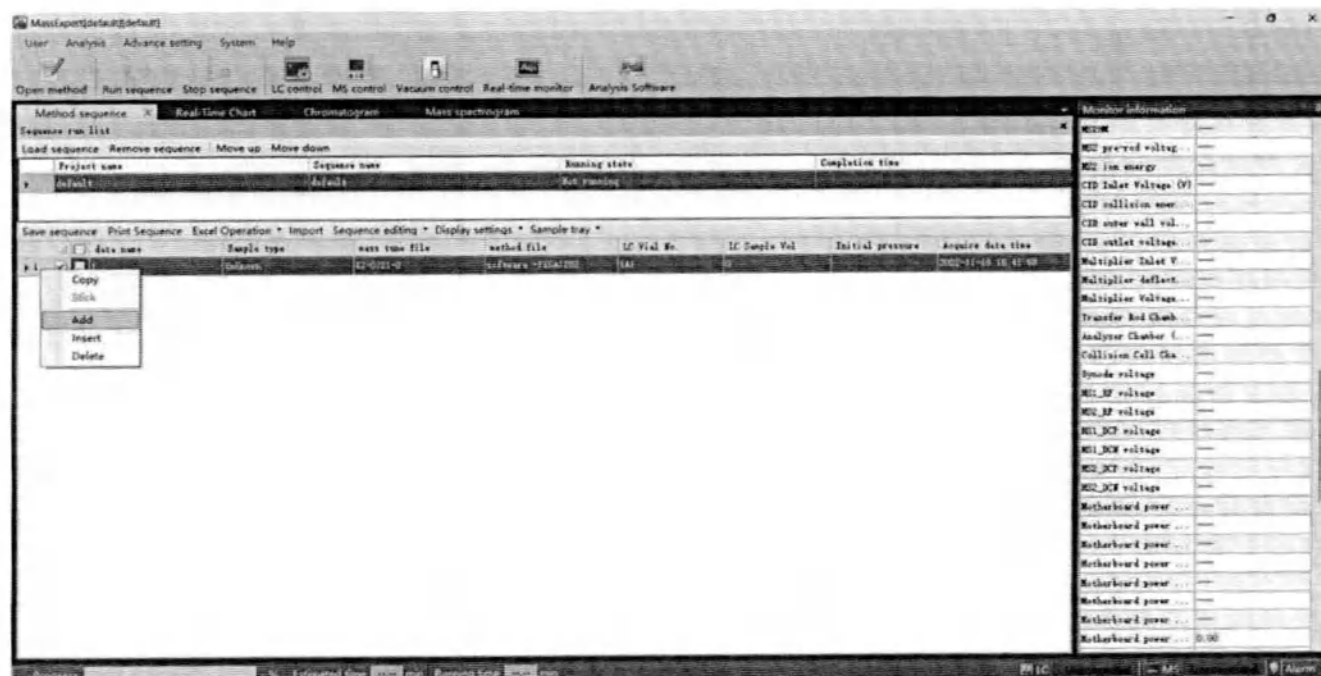


Рисунок 5.19.1. Интерфейс добавления образца (общий вид).

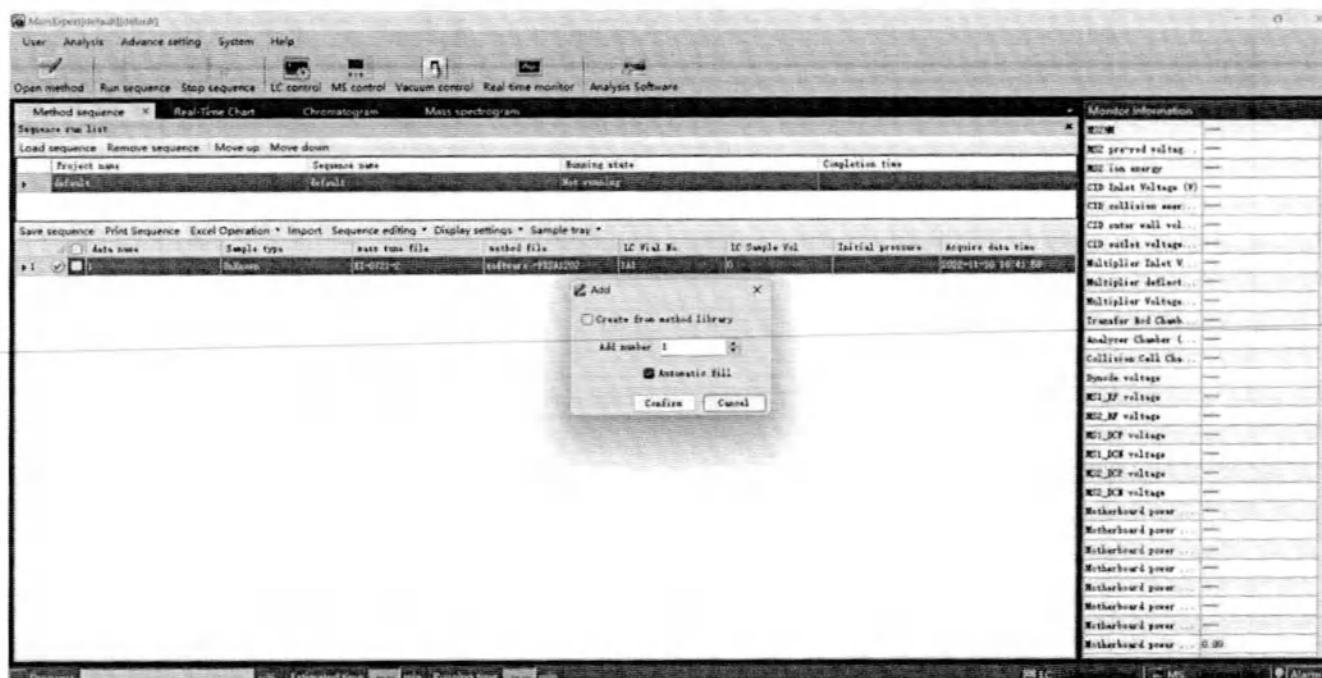


Рисунок 5.19.2. Интерфейс добавления образца (выбор «Добавить»).

ДЛЯ РИСУНКА 5.19.1.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
MassExpert (default) (default)	MassExpert («МассЭксперт») (по умолчанию)
User	Пользователь
Analysis	Анализ
Advance setting	Дополнительная настройка
System	Система
Help	Помощь
Open method	Открыть метод
Run sequence	Запуск последовательности
Stop sequence	Остановка последовательности
LC control	Управление жидкостным хроматографом
MS control	Управление масс-спектрометром
Vacuum control	Управление вакуумом
Real-time monitor	Монитор реального времени
Analysis software	Программное обеспечение для анализа
Method sequence	Последовательность метода
Real-time Chart	Карта в реальном времени
Chromatogram	Хроматограмма
Mass spectrogram	Масс-спектрограмма
Sequence run list	Список выполнения последовательности
Load sequence	Загрузить последовательность
Remove sequence	Удалить последовательность
Move up	Двигаться вверх
Move down	Двигаться вниз
Project name	Наименование проекта
Default	По умолчанию
Sequence name	Наименование последовательности
Running state	Состояние выполнения
Not running	Не выполняется
Completion time	Время завершения
Save sequence	Сохранить последовательность
Print sequence	Распечатать последовательность
Excel operation	Операция в формате Excel
Import sequence editing	Импортировать редактирование последовательности
Display settings	Отобразить настройки
Sample tray	Держатель для образцов
Data name	Наименование данных
Copy	Копировать
Stick	Приклеить
Add	Добавить
Insert	Вставить

Delete	Удалить
Sample type – Unknown	Тип образца – Неизвестен
Mass tune file – EI0721-2	Файл настройки массы – EI0721-2
Method file – Software – PISA1202	Файл метода – Программное обеспечение – PISA1202
LC Vial No. – 1A1	Номер вials для жидкостного хроматографа – 1A1
LC sample vol. – 0	Объем образца для жидкостного хроматографа – 0
Initial pressure	Начальное давление
Acquire data time – 2022-11-16 16:41:58	Время получения данных – 2022-11-16 16:41:58
Progress	Прогресс
Estimated time, min	Расчетное время, мин
Running time, min	Текущее время, мин
LC	Жидкостной хроматограф
MS	Масс-спектрометр
Unconnected	Не подключен
Alarm	Тревога
Monitor information	Информация монитора
MS2HM	Модуль масс-спектрометрии 2 с высоким разрешением
MS2 pre-rod voltage	Напряжение перед стержнем MS2
MS2 ion energy	Энергия ионов MS2
CID Inlet Voltage (V)	Напряжение на входе в ячейку диссоциации, вызванное столкновением (CID) (В)
CID collision energy	Энергия столкновений в ячейке CID
CID outer wall voltage	Напряжение на наружной стенке ячейки CID
CID outlet voltage	Напряжение на выходе ячейки CID
Multiplier Inlet V...	Напряжение на входе умножителя
Multiplier deflection...	Отклонение умножителя
Multiplier Voltage	Напряжение умножителя
Transfer Rod Chamber	Камера трансмиссионного стержня
Analyzer Chamber	Камера анализатора
Collision Cell Chamber	Камера ячейки столкновений
Dynode voltage	Напряжение динода
MS1 RF voltage	Напряжение MS1 RF
MS2 RF voltage	Напряжение MS2 RF
MS1 DCP voltage	Напряжение MS1 DCP
MS1 DCN voltage	Напряжение MS1 DCN
MS2 DCP voltage	Напряжение MS2 DCP
MS2 DCN voltage	Напряжение MS2 DCN
Motherboard power...	Питание материнской платы
ДЛЯ РИСУНКА 5.19.2.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
MassExpert (default) (default)	MassExpert («МассЭксперт») (по умолчанию)
User	Пользователь
Analysis	Анализ
Advance setting	Дополнительная настройка
System	Система
Help	Помощь
Open method	Открыть метод
Run sequence	Запуск последовательности
Stop sequence	Остановка последовательности
LC control	Управление жидкостным хроматографом
MS control	Управление масс-спектрометром
Vacuum control	Управление вакуумом
Real-time monitor	Монитор реального времени
Analysis software	Программное обеспечение для анализа
Method sequence	Последовательность метода
Real-time Chart	Карта в реальном времени
Chromatogram	Хроматограмма
Mass spectrogram	Масс-спектрограмма
Sequence run list	Список выполнения последовательности
Load sequence	Загрузить последовательность
Remove sequence	Удалить последовательность
Move up	Двигаться вверх
Move down	Двигаться вниз
Project name	Наименование проекта
Default	По умолчанию
Sequence name	Наименование последовательности
Running state	Состояние выполнения
Not running	Не выполняется
Completion time	Время завершения

Save sequence	Сохранить последовательность
Print sequence	Распечатать последовательность
Excel operation	Операция в формате Excel
Import sequence editing	Импортировать редактирование последовательности
Display settings	Отобразить настройки
Sample tray	Держатель для образцов
Data name	Наименование данных
Sample type – Unknown	Тип образца – Неизвестен
Mass tune file – EI0721-2	Файл настройки массы – EI0721-2
Method file – Software – PISA1202	Файл метода – Программное обеспечение – PISA1202
LC Vial No. – 1A1	Номер виалы для жидкостного хроматографа – 1A1
LC sample vol. – 0	Объем образца для жидкостного хроматографа – 0
Initial pressure	Начальное давление
Acquire data time – 2022-11-16 16:41:58	Время получения данных – 2022-11-16 16:41:58
Progress	Прогресс
Estimated time, min	Расчетное время, мин
Running time, min	Текущее время, мин
LC	Жидкостной хроматограф
MS	Масс-спектрометр
Unconnected	Не подключен
Alarm	Тревога
Monitor information	Информация монитора
MS2HM	Модуль масс-спектрометрии 2 с высоким разрешением
MS2 pre-rod voltage	Напряжение перед стержнем MS2
MS2 ion energy	Энергия ионов MS2
CID Inlet Voltage (V)	Напряжение на входе в ячейку диссоциации, вызванное столкновением (CID) (В)
CID collision energy	Энергия столкновений в ячейке CID
CID outer wall voltage	Напряжение на наружной стенке ячейки CID
CID outlet voltage	Напряжение на выходе ячейки CID
Multiplier Inlet V...	Напряжение на входе умножителя
Multiplier deflection...	Отклонение умножителя
Multiplier Voltage	Напряжение умножителя
Transfer Rod Chamber	Камера трансмиссионного стержня
Analyzer Chamber	Камера анализатора
Collision Cell Chamber	Камера ячейки столкновений
Dynode voltage	Напряжение динода
MS1 RF voltage	Напряжение MS1 RF
MS2 RF voltage	Напряжение MS2 RF
MS1 DCP voltage	Напряжение MS1 DCP
MS1 DCN voltage	Напряжение MS1 DCN
MS2 DCP voltage	Напряжение MS2 DCP
MS2 DCN voltage	Напряжение MS2 DCN
Motherboard power...	Питание материнской платы
Add	Добавить
Create from method library	Создать из библиотеки методов
Add number	Добавить номер
Automatic fill	Автоматическое заполнение
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

4. Выберите «Показать держатель для образцов» в раскрывающемся списке «Держатель для образцов», выберите доступные лунки держателя для образцов, выньте держатель для образцов и поместите виалы с образцами в данные лунки (48 лунок), затем ровно поместите держатель в штатив для держателей образцов, после чего закройте дверцу автосемплера.

Примечание. 1. Перед запуском последовательности убедитесь, что размер держателя для образцов в программном обеспечении составляет 48 лунок. 2. Убедитесь, что держатель ровно установлен на штатив для держателей образцов (все четыре угла помещены в штатив для держателей).

5.10.3. Редактирование метода LC («ЖХ»)

В строке меню в верхней части основного интерфейса программного обеспечения в разделе «Анализ» выберите «Новый метод», чтобы войти в интерфейс редактирования метода. Откройте страницу LC («ЖХ»), щелкните значок насоса бинарного ультравысокого давления и установите метод градиента в правом окне, как показано на рисунках 5.20–5.21.

Настройки подвижной фазы: выберите порт подвижной фазы, используемый насосами А/В, и

пользователь может настроить имя подвижной фазы.

Ограничение давления: установите диапазон давления во время работы, после превышения предела прибор автоматически остановит текущий метод.

Условие запуска: если настройка времени уравнивания включена, система будет автоматически уравниваться перед каждым вводом (чтобы привести систему в соответствие с начальным потоком метода), и пользователь может определить время уравнивания.

Редактирование градиента: установите условия градиентного элюирования (время, скорость потока, соотношение A/B).

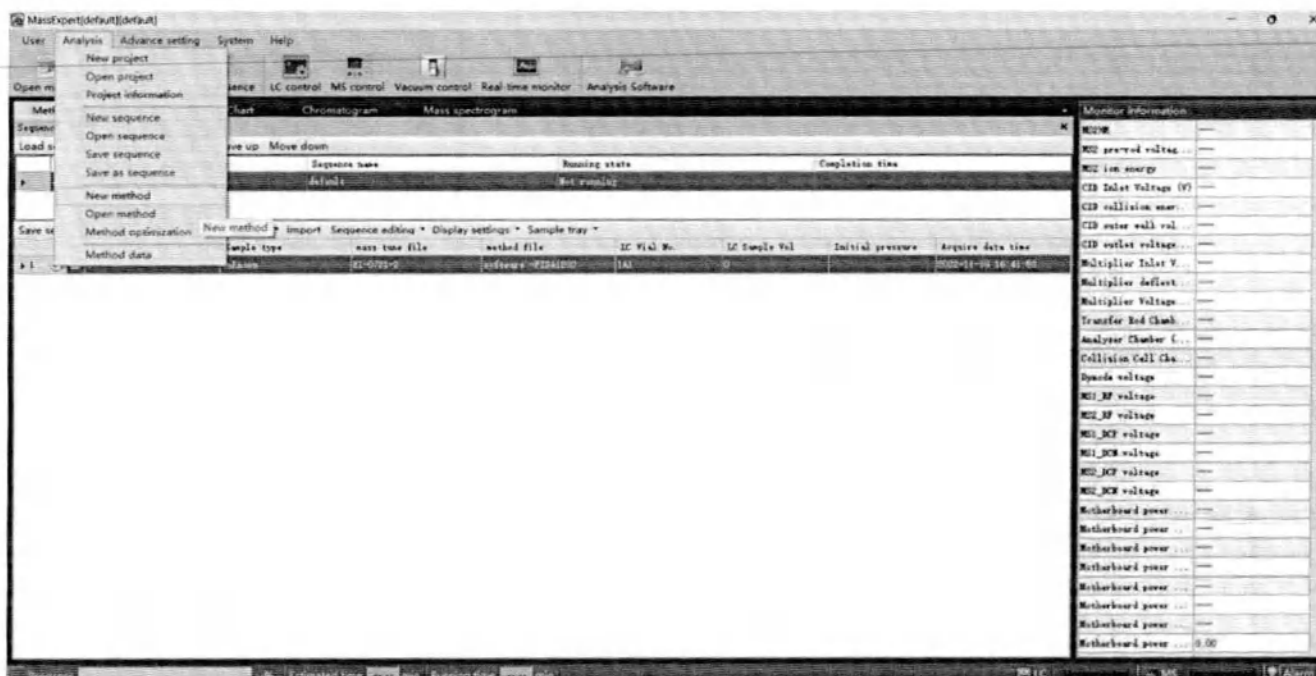


Рисунок 5.20. Интерфейс нового метода.

ДЛЯ РИСУНКА 5.20.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
MassExpert (default) (default)	MassExpert («МассЭксперт») (по умолчанию)
User	Пользователь
Analysis	Анализ
New project	Новый проект
Open project	Открытый проект
Project information	Информация о проекте
New sequence	Новая последовательность
Open sequence	Открытая последовательность
Save sequence	Сохранить последовательность
Save as sequence	Сохранить как последовательность
New method	Новый метод
Open method	Открыть метод
Method optimization	Оптимизация метода
Method data	Данные метода
Advance setting	Дополнительная настройка
System	Система
Help	Помощь
Run sequence	Запуск последовательности
Stop sequence	Остановка последовательности
LC control	Управление жидкостным хроматографом
MS control	Управление масс-спектрометром
Vacuum control	Управление вакуумом
Real-time monitor	Монитор реального времени
Analysis software	Программное обеспечение для анализа
Method sequence	Последовательность метода
Real-time Chart	Карта в реальном времени
Chromatogram	Хроматограмма
Mass spectrogram	Масс-спектрограмма
Sequence run list	Список выполнения последовательности
Load sequence	Загрузить последовательность

ДЛЯ РИСУНКА 5.20.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Remove sequence	Удалить последовательность
Move up	Двигаться вверх
Move down	Двигаться вниз
Project name	Наименование проекта
Default	По умолчанию
Sequence name	Наименование последовательности
Running state	Состояние выполнения
Not running	Не выполняется
Completion time	Время завершения
Save sequence	Сохранить последовательность
Print sequence	Распечатать последовательность
Excel operation	Операция в формате Excel
Import sequence editing	Импортировать редактирование последовательности
Display settings	Отобразить настройки
Sample tray	Держатель для образцов
Data name	Наименование данных
Sample type – Unknown	Тип образца – Неизвестен
Mass tune file – EI0721-2	Файл настройки массы – EI0721-2
Method file – Software -PISA1202	Файл метода – Программное обеспечение – PISA1202
LC Vial No. – 1A1	Номер вials для жидкостного хроматографа – 1A1
LC sample vol. – 0	Объем образца для жидкостного хроматографа – 0
Initial pressure	Начальное давление
Acquire data time – 2022-11-16 16:41:58	Время получения данных - 2022-11-16 16:41:58
Progress	Прогресс
Estimated time, min	Расчетное время, мин
Running time, min	Текущее время, мин
LC	Жидкостной хроматограф
MS	Масс-спектрометр
Unconnected	Не подключен
Alarm	Тревога
Monitor information	Информация монитора
MS2HM	Модуль масс-спектрометрии 2 с высоким разрешением
MS2 pre-rod voltage	Напряжение перед стержнем MS2
MS2 ion energy	Энергия ионов MS2
CID Inlet Voltage (V)	Напряжение на входе в ячейку диссоциации, вызванное столкновением (CID) (В)
CID collision energy	Энергия столкновений в ячейке CID
CID outer wall voltage	Напряжение на наружной стенке ячейки CID
CID outlet voltage	Напряжение на выходе ячейки CID
Multiplier Inlet V...	Напряжение на входе умножителя
Multiplier deflection...	Отклонение умножителя
Multiplier Voltage	Напряжение умножителя
Transfer Rod Chamber	Камера трансмиссионного стержня
Analyzer Chamber	Камера анализатора
Collision Cell Chamber	Камера ячейки столкновений
Dynode voltage	Напряжение динода
MS1 RF voltage	Напряжение MS1 RF
MS2 RF voltage	Напряжение MS2 RF
MS1 DCP voltage	Напряжение MS1 DCP
MS1 DCN voltage	Напряжение MS1 DCN
MS2 DCP voltage	Напряжение MS2 DCP
MS2 DCN voltage	Напряжение MS2 DCN
Motherboard power...	Питание материнской платы

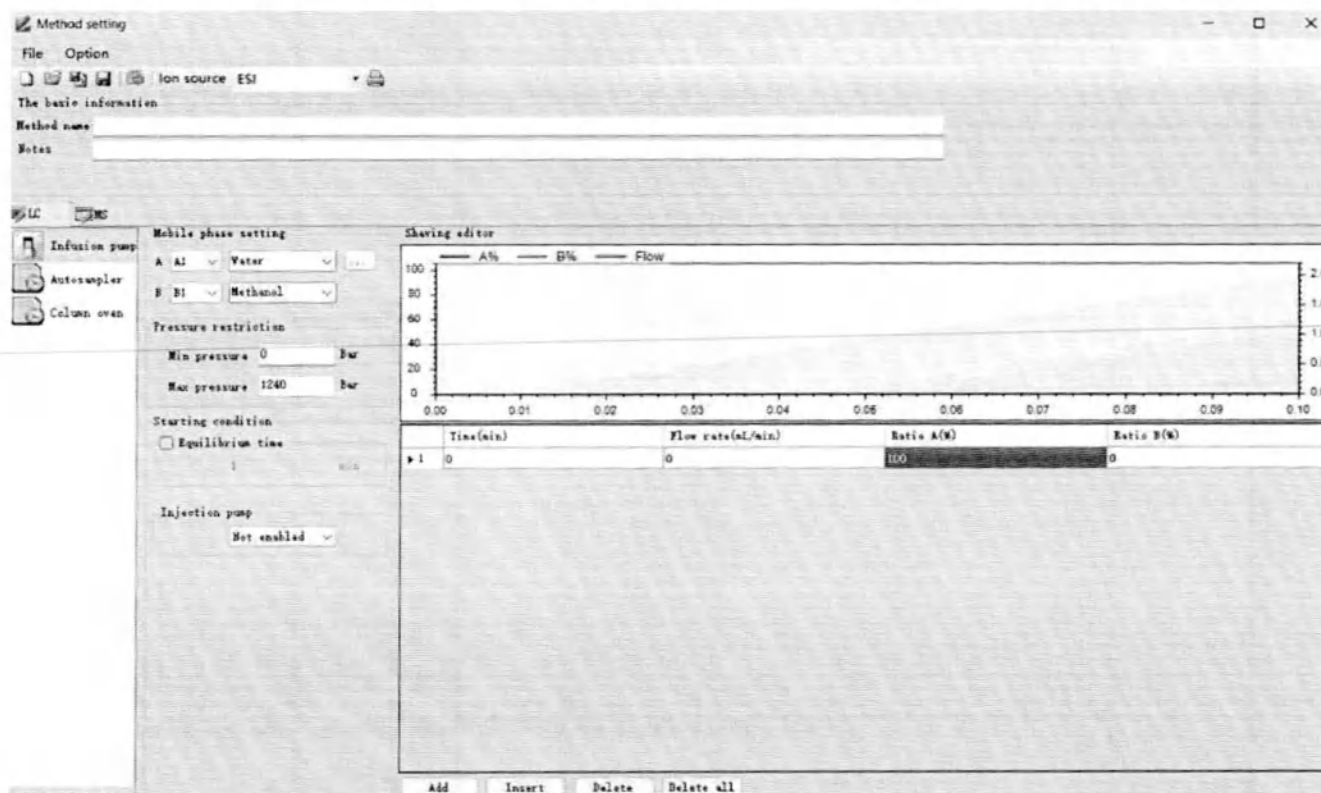


Рисунок 5.21. Интерфейс редактирования настроек насоса бинарного ультравысокого давления.

ДЛЯ РИСУНКА 5.21.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Method setting	Настройка метода
File	Файл
Option	Опция
Ion source ESI	Источник ионов ESI
The basic information	Основная информация
Method name	Наименование метода
Notes	Примечания
LC	Жидкостной хроматограф
MS	Масс-спектрометр
Infusion pump	Инфузионный насос
Autosampler	Автосемплер
Column oven	Термостат колонок
Mobile phase setting	Настройка мобильной фазы
A A1 Water	A A1 Вода
B B1 Methanol	B B1 Метанол
Pressure restriction	Ограничение давления
Min pressure 0 Bar	Минимальное давление 0 Бар
Max pressure 1240 Bar	Максимальное давление 0 Бар
Starting condition	Начальное состояние
Equilibrium time	Время равновесия
Injection pump	Инжекционный насос
Not enabled	Не приведен в действие
Shaving editor	Редактор ограничения максимума
Flow	Поток
Time (min)	Время (минут)
Flow rate (ml/min)	Скорость потока (мл/мин)
Ratio A (%)	Соотношение A (%)
Ratio B (%)	Соотношение B (%)
Add	Добавить
Insert	Вставить
Delete	Удалить
Delete all	Удалить все

- Щелкните значок автосемплера, чтобы установить метод автосемплера в правом окне, как показано на рисунке 5.22.

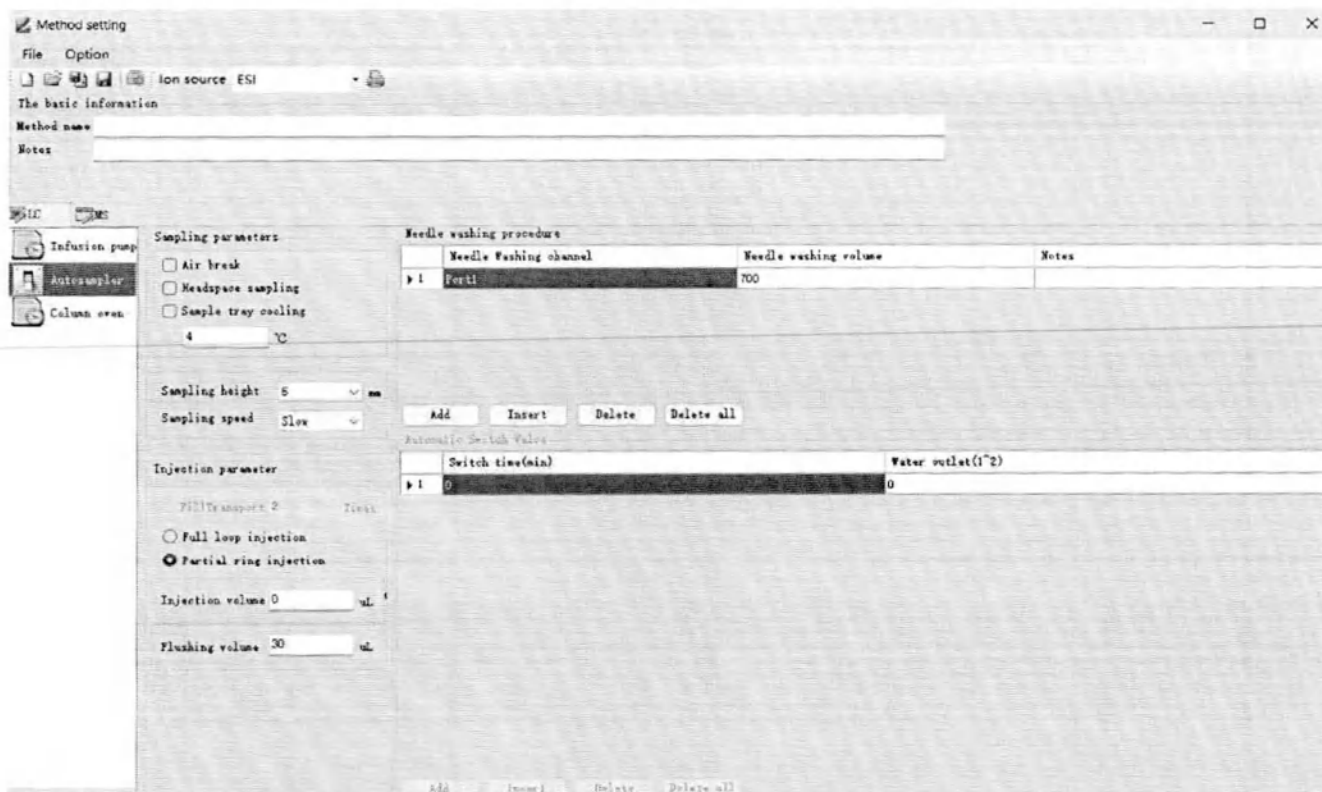


Рисунок 5.22. Интерфейс редактирования настроек автосемплера.

ДЛЯ РИСУНКА 5.22.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Method setting	Настройка метода
File	Файл
Option	Опция
Ion source ESI	Источник ионов ESI
The basic information	Основная информация
Method name	Наименование метода
Notes	Примечания
LC	Жидкостной хроматограф
MS	Масс-спектрометр
Infusion pump	Инфузионный насос
Autosampler	Автосемплер
Column oven	Термостат колонок
Sampling parameters	Параметры отбора образцов
Air break	Разрыв в воздухе
Headspace sampling	Отбор образцов из паровой фазы
Sample tray cooling 4°C	Охлаждение держателя для отбора образцов до 4°C
Sampling height 5 mm	Высота отбора образцов 5 мм
Sampling speed- Slow	Скорость отбора образцов – Низкая
Injection parameter	Параметр ввода
Fill Transport 2 times	Заполнение транспорта 2 раза
Full loop injection	Ввод с полным заполнением петли
Partial ring injection	Ввод с частичным заполнением кольца
Injection volume 0 µL	Объем ввода 0 мкл
Flushing volume 30 µL	Объем промывки 30 мкл
Needle washing procedure	Процедура промывки иглы
Needle washing channel	Канал промывки иглы
Port 1	Порт 1
Needle washing volume	Объем промывки иглы
Notes	Примечания
Switch time (min)	Время включения (мин)
Water outlet (1-2)	Выпускное отверстие для воды (1-2)
Add	Добавить
Insert	Вставить
Delete	Удалить
Delete all	Удалить все

Параметры ввода

Воздушная изоляция: изолирует раствор образца от промывочной жидкости для предотвращения переноса образца и перекрестного загрязнения.

Отбор проб в свободном пространстве: отбор проб под давлением путем пропускания воздуха через верхнюю часть виалы, подходит для вязких проб.

Охлаждение держателей для образцов: для проб, которые нестабильны при комнатной температуре или при высокой температуре. Эту функцию можно выбрать, если автосемплер оснащен опцией охлаждения, а самая низкая температура достигает 4°C (опционально).

Высота отбора проб: расстояние между иглой для отбора проб и дном виалы для отбора проб, по умолчанию составляет 5 мм, при низком уровне жидкости необходимо уменьшить высоту отбора проб.

Скорость отбора проб: скорость отбора проб шприцем, скорость по умолчанию нормальная, при всасывании вязких образцов скорость отбора проб можно отрегулировать на медленную.

Режим ввода: существует три режима ввода: полное заполнение петли, частичное заполнение петли и ввод микролитров образца.

В режиме ввода полное заполнение петли объем ввода равен объему петли и точность самая высокая. Объем ввода в режиме частичного заполнения петли должен составлять $\leq 50\%$ объема петли, но не менее 1 мкл. Режим ввода микролитров не приводит к потере образца и имеет наихудшую точность, поэтому не применяется в стандартной конфигурации УВЭЖХ (объем петли 20 мкл, иглы 15 мкл).

Объем промывки: объем раствора для промывки. Перед анализом образцов несколько раз выполняется промывка иглы для удаления предыдущего образца или других растворов в игле. По умолчанию объем промывки составляет 30 мкл.

Процедура мытья иглы: объем раствора, необходимый для мытья иглы, по умолчанию составляет 700 мкл. Можно задать название раствора для мытья иглы.

Автоматическое переключение клапана: переключение различных подвижных фаз в установленные моменты времени можно выполнить с помощью клапанов.

Щелкните значок термостата колонок, чтобы задать метод термостата колонок в правом окне, как показано на рисунке ниже. При необходимости установите флажок «Использовать контроль температуры колонки». Рекомендуется, чтобы температура термостата колонок не превышала 90°C (чаще всего устанавливают значение 40°C). Тип (наименование) хроматографической колонки можно редактировать самостоятельно (рисунок 5.23.).

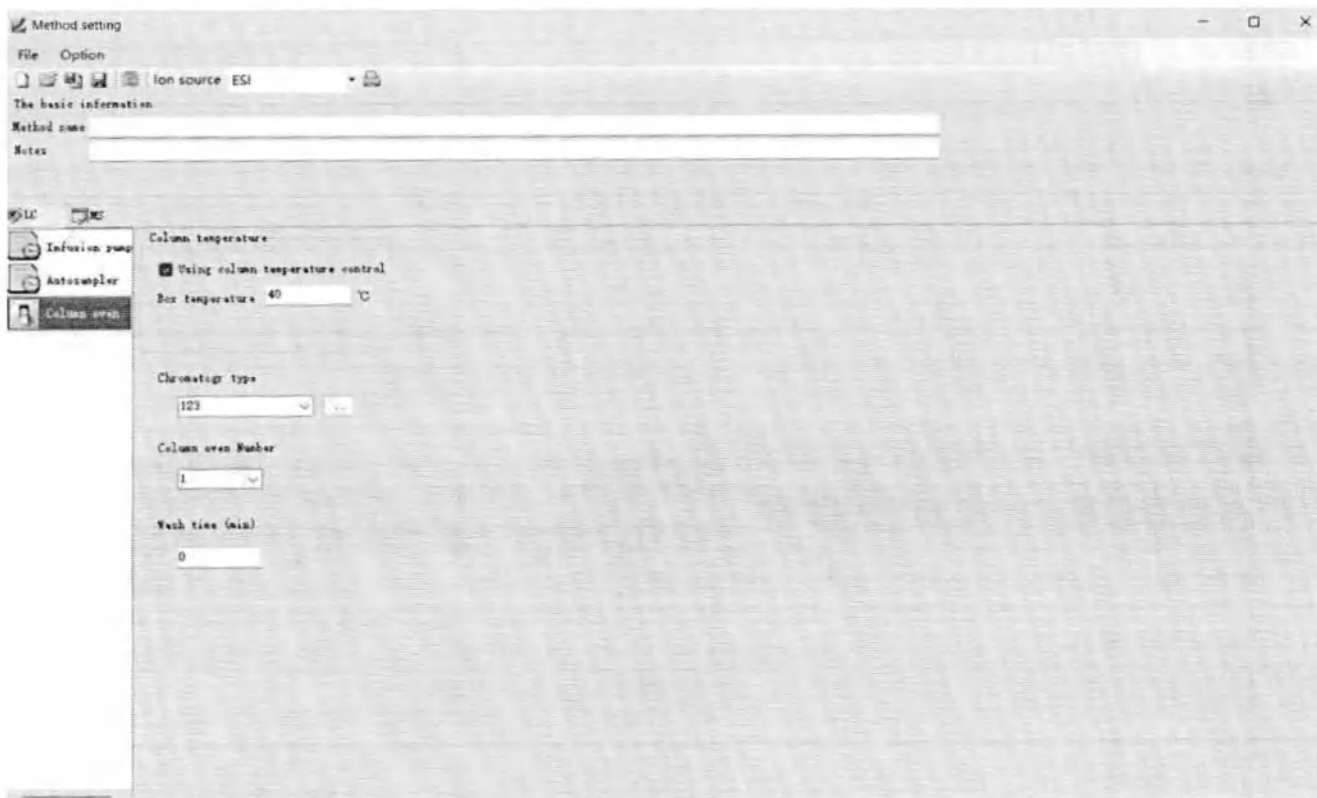


Рисунок 5.23. Интерфейс редактирования настроек термостата колонок.

ДЛЯ РИСУНКА 5.23.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Method setting	Настройка метода
File	Файл
Option	Опция
Ion source ESI	Источник ионов ESI
The basic information	Основная информация
Method name	Наименование метода
Notes	Примечания
LC	Жидкостной хроматограф
MS	Масс-спектрометр
Infusion pump	Инфузионный насос
Autosampler	Автосемплер
Column oven	Термостат колонок
Sampling parameters	Параметры отбора образцов
Air break	Разрыв в воздухе
Headspace sampling	Отбор образцов из паровой фазы
Sample tray cooling 4°C	Охлаждение держателя для отбора образцов до 4°C
Sampling height 5 mm	Высота отбора образцов 5 мм
Sampling speed- Slow	Скорость отбора образцов – Низкая
Injection parameter	Параметр ввода
Fill Transport 2 times	Заполнение транспорта 2 раза
Full loop injection	Ввод с полным заполнением петли
Partial ring injection	Ввод с частичным заполнением кольца
Injection volume 0 uL	Объем ввода 0 мкл
Flushing volume 30 uL	Объем промывки 30 мкл
Needle washing procedure	Процедура промывки иглы
Needle washing channel	Канал промывки иглы
Port 1	Порт 1
Needle washing volume	Объем промывки иглы
Notes	Примечания
Switch time (min)	Время включения (мин)
Water outlet (1-2)	Выпускное отверстие для воды (1-2)
Add	Добавить
Insert	Вставить
Delete	Удалить
Delete all	Удалить все

5.10.4. Редактирование метода MS («МС»)

- 1) В строке меню в верхней части основного интерфейса программы в разделе «Анализ» выберите «Новый метод», войдите в интерфейс редактирования метода, нажмите , откройте страницу MS («МС»), нажмите «Добавить фрагмент», появится окно, показанное на рисунке 5.24. Масс-спектрометр поддерживает сканирование в *следующих* режимах: полное сканирование (MS1/MS2 Scan), сканирование выбранных ионов (MS1/MS2 SIM), сканирование ионов-предшественников (Precursor ion), сканирование ионов-продуктов (Product ion), сканирование нейтральных потерь (Neutral Loss), мониторинг множественных реакций (MRM) (рисунок 5.24.).

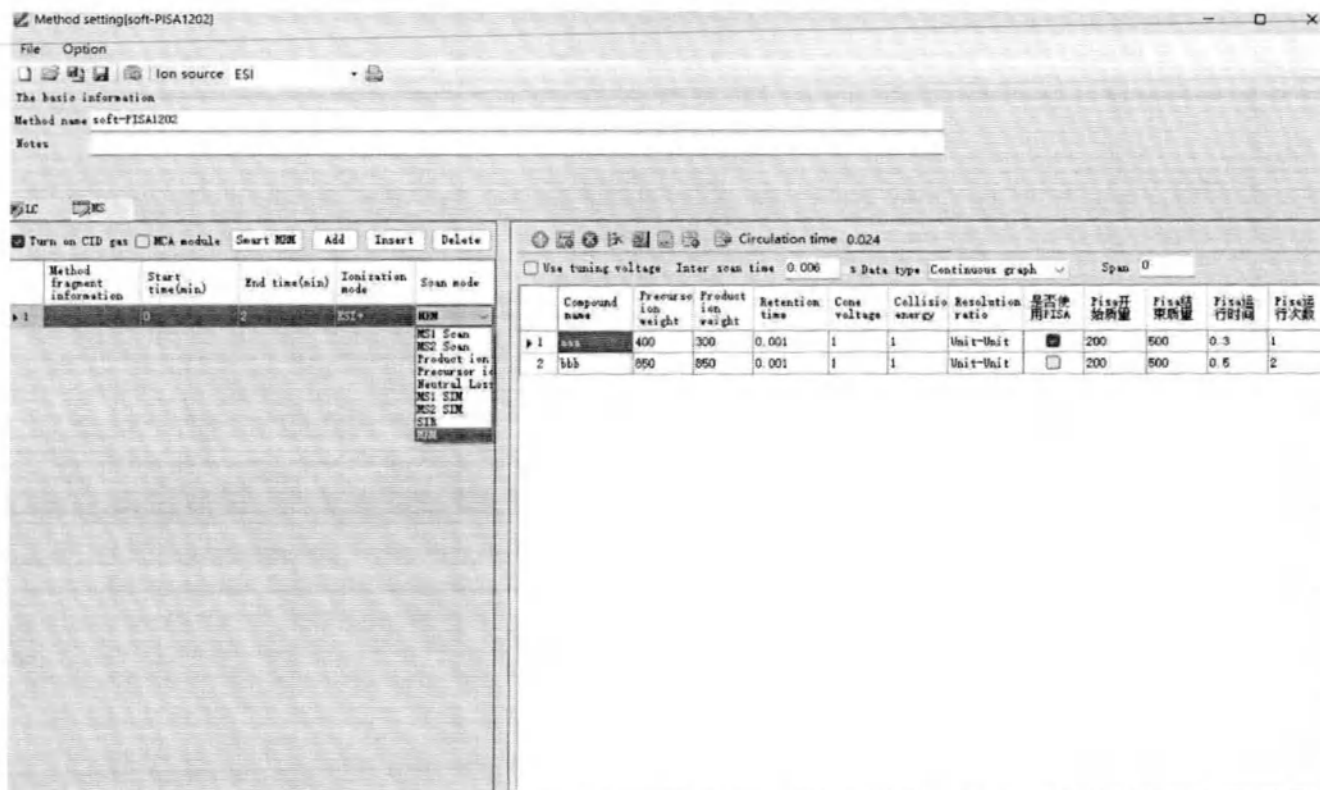


Рисунок 5.24. Интерфейс редактирования режима сканирования метода MS («МС»).

ДЛЯ РИСУНКА 5.24.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Method setting (soft-PISA1202)	Настройка метода (программное обеспечение-PISA1202)
File	Файл
Option	Опция
Ion source ESI	Источник ионов ESI
The basic information	Основная информация
Method name soft-PISA1202	Наименование метода - программное обеспечение-PISA1202
Notes	Примечания
LC	Жидкостная хроматография
MS	Масс-спектрометрия
Turn on CID gas	Включить газ CID
MCA module	Модуль MCA
Smart MEM	Смарт- MEM
Add	Добавить
Insert	Вставить
Delete	Удалить
Method fragment information	Информация о фрагменте метода
Start time (min)	Время начала (минут)
End time (min)	Время окончания (минут)
Ionization mode ESI+	Режим ионизации ESI+
Scan mode MFM	Режим сканирования MFM
MS1 Scan	Скан MS1
MS2 Scan	Скан MS2
Product ion	Ион-продукт
Precursor ion	Ион-предшественник
Neutral loss	Потеря нейтральных

ДЛЯ РИСУНКА 5.24.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
MS1 SIM	MS1 SIM
MS2 SIM	MS2 SIM
STR	STR
MRM	MRM (Мониторинг множественных реакций)
Circulation time 0.024	Время циркуляции 0,024
Use tuning voltage	Использовать напряжение настройки
Inter scan time 0.006 s	Время между сканированиями 0,006 сек
Data type – Continuous graph	Тип данных – Непрерывный график
Span 0	Диапазон измерения 0
Compound name	Наименование химического соединения
Precursor ion weight	Масса иона-предшественника
Product ion weight	Масса иона-продукта
Retention time	Время удержания
Cone voltage	Напряжение на конусе
Collision energy	Энергия столкновений
Resolution ratio – Unit-Unit	Соотношение разрешений – единица-единица

- 2) Создайте метод масс-спектрометрии на примере режима сканирования MRM. Для добавления фрагмента нажмите «Добавить фрагмент» и выберите режим сканирования MRM. Интерфейс данного режима показан на рисунке 5.25:

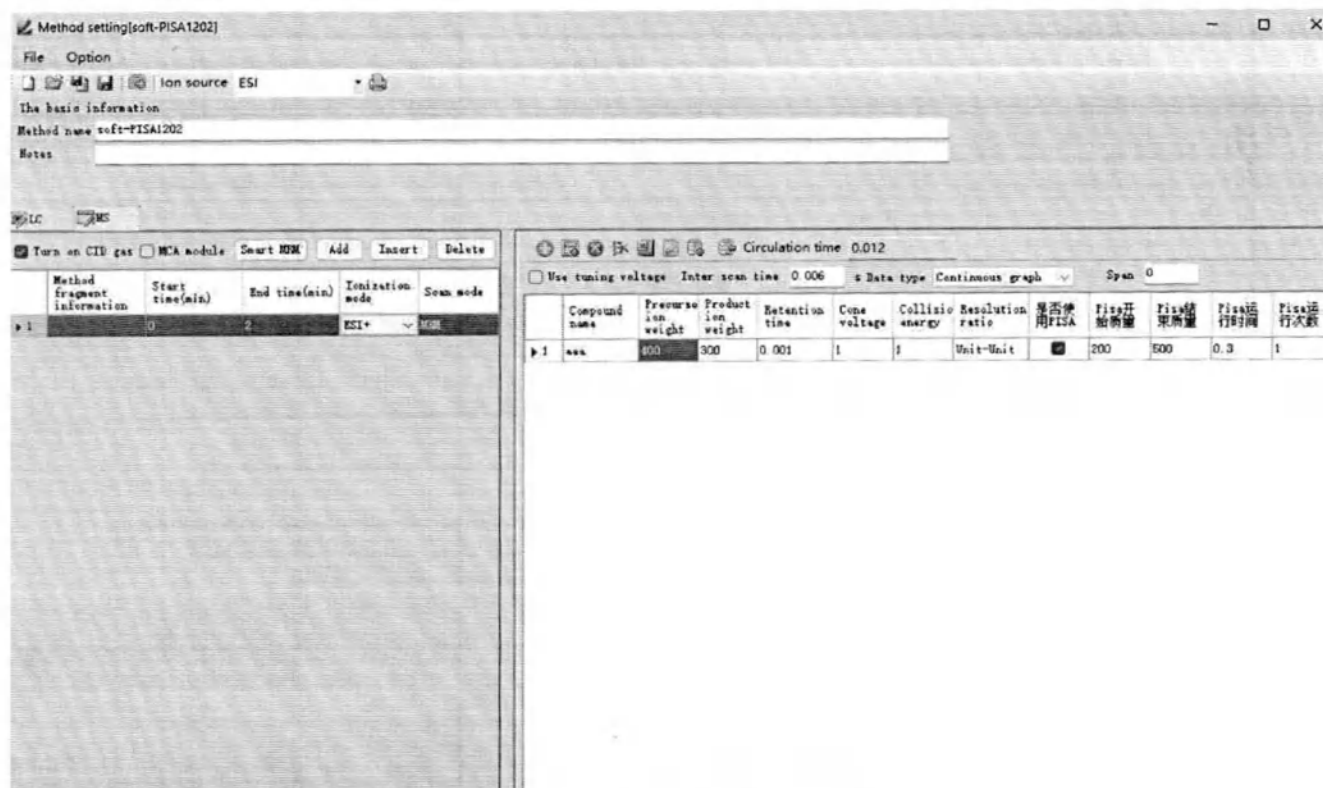


Рисунок 5.25. Интерфейс режима сканирования MRM (общий вид).

ДЛЯ РИСУНКА 5.25.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Method setting (soft-PISA1202)	Настройка метода (программное обеспечение-PISA1202)
File	Файл
Option	Опция
Ion source ESI	Источник ионов ESI
The basic information	Основная информация
Method name	Наименование метода
soft-PISA1202	Программное обеспечение-PISA1202
Notes	Примечания
LC	Жидкостной хроматограф
MS	Масс-спектрометр
Turn on CID gas	Включить газ CID
MCA module	Модуль MCA
Smart MEM	Смарт-MEM

ДЛЯ РИСУНКА 5.25.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Add	Добавить
Insert	Вставить
Delete	Удалить
Method fragment information	Информация о фрагменте метода
Start time (min)	Время начала (минут)
End time (min)	Время окончания (минут)
Ionization mode ESI+	Режим ионизации ESI+
Scan mode MFM	Режим сканирования MFM
Circulation time 0.012	Время циркуляции 0,012
Use tuning voltage	Использовать напряжение настройки
Inter scan time 0.006 s	Время между сканированиями 0,006 сек
Data type – Continuous graph	Тип данных – Непрерывный график
Span 0	Диапазон измерения 0
Compound name	Наименование химического соединения
Precursor ion weight	Масса иона-предшественника
Product ion weight	Масса иона-продукта
Retention time	Время удержания
Cone voltage	Напряжение на конусе
Collision energy	Энергия столкновений
Resolution ratio – Unit-Unit	Соотношение разрешений – единица-единица

Выберите режим ионизации в разделе метода и введите время сбора данных масс-спектра во временном окне. Если необходимо установить несколько фрагментов, нажмите кнопку «Добавить фрагмент» или «Вставить фрагмент» сверху, как показано на рисунке 5.26.

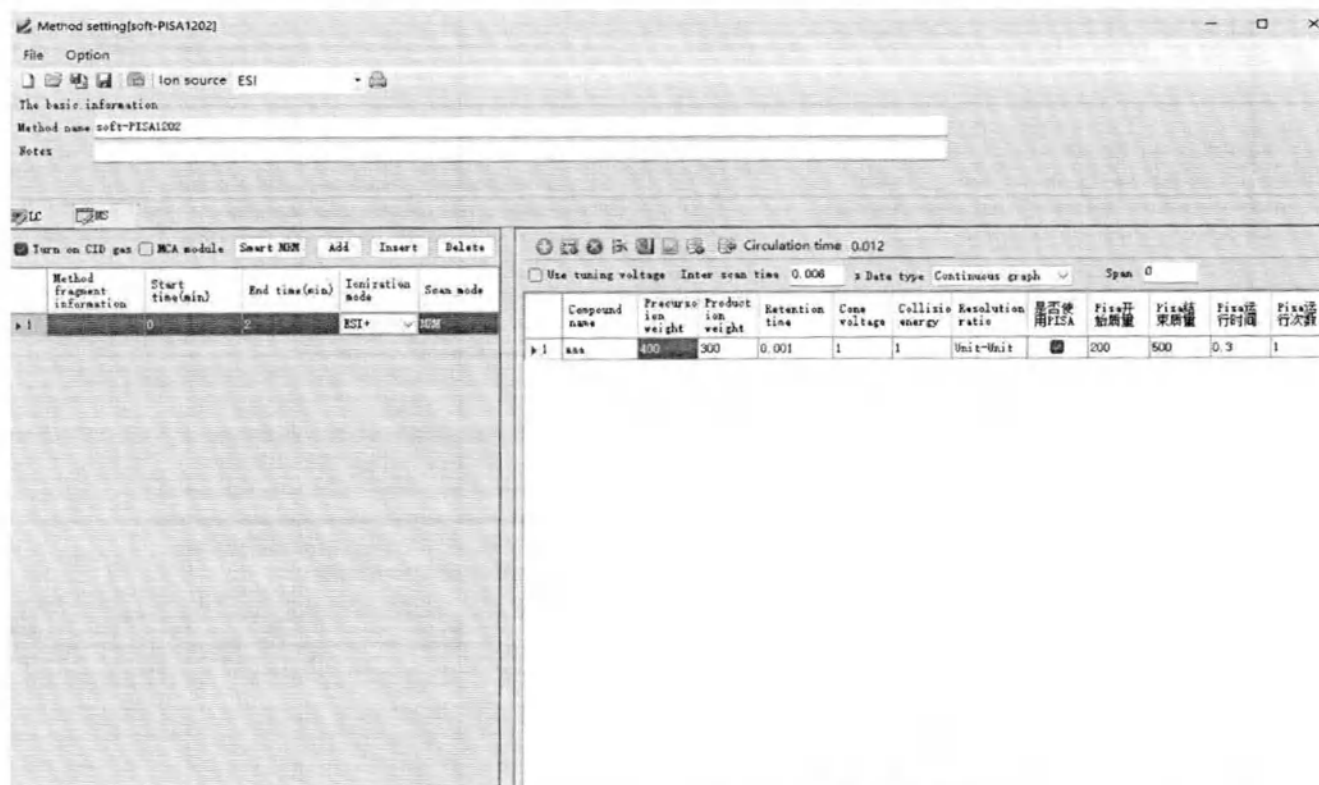


Рисунок 5.26. Интерфейс редактирования режима сканирования MRM (добавление фрагментов).

ДЛЯ РИСУНКА 5.26.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Method setting (soft-PISA1202)	Настройка метода (программное обеспечение-PISA1202)
File	Файл
Option	Опция
Ion source ESI	Источник ионов ESI
The basic information	Основная информация
Method name	Наименование метода
soft-PISA1202	Программное обеспечение-PISA1202
Notes	Примечания
LC	Жидкостной хроматограф

ДЛЯ РИСУНКА 5.26.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
MS	Масс-спектрометр
Turn on CID gas	Включить газ CID
MCA module	Модуль MCA
Smart MEM	Смарт-МЕМ
Add	Добавить
Insert	Вставить
Delete	Удалить
Method fragment information	Информация о фрагменте метода
Start time (min)	Время начала (минут)
End time (min)	Время окончания (минут)
Ionization mode ESI+	Режим ионизации ESI+
Scan mode MFM	Режим сканирования MFM
Circulation time 0.012	Время циркуляции 0,012
Use tuning voltage	Использовать напряжение настройки
Inter scan time 0.006 s	Время между сканированиями 0,006 сек
Data type – Continuous graph	Тип данных – Непрерывный график
Span 0	Диапазон измерения 0
Compound name	Наименование химического соединения
Precursor ion weight	Масса иона-предшественника
Product ion weight	Масса иона-продукта
Retention time	Время удержания
Cone voltage	Напряжение на конусе
Collision energy	Энергия столкновений
Resolution ratio – Unit-Unit	Соотношение разрешений – единица-единица

- 3) Добавьте канал соединения каждого фрагмента в методе, введите название соединения, массу иона-предшественника целевого соединения, массу иона-продукта, время сканирования, энергию столкновения и режим разрешения. Если необходимо настроить несколько каналов, нажмите кнопку «Добавить» или «Вставить» ниже; если необходимо удалить избыточные каналы, нажмите кнопку «Удалить» или «Удалить все» ниже; если имеется библиотека методов, то также нажмите ниже «Импорт библиотеки методов», войдите в библиотеку методов; нажмите , экспорт методов (рисунки 5.27–5.28.).

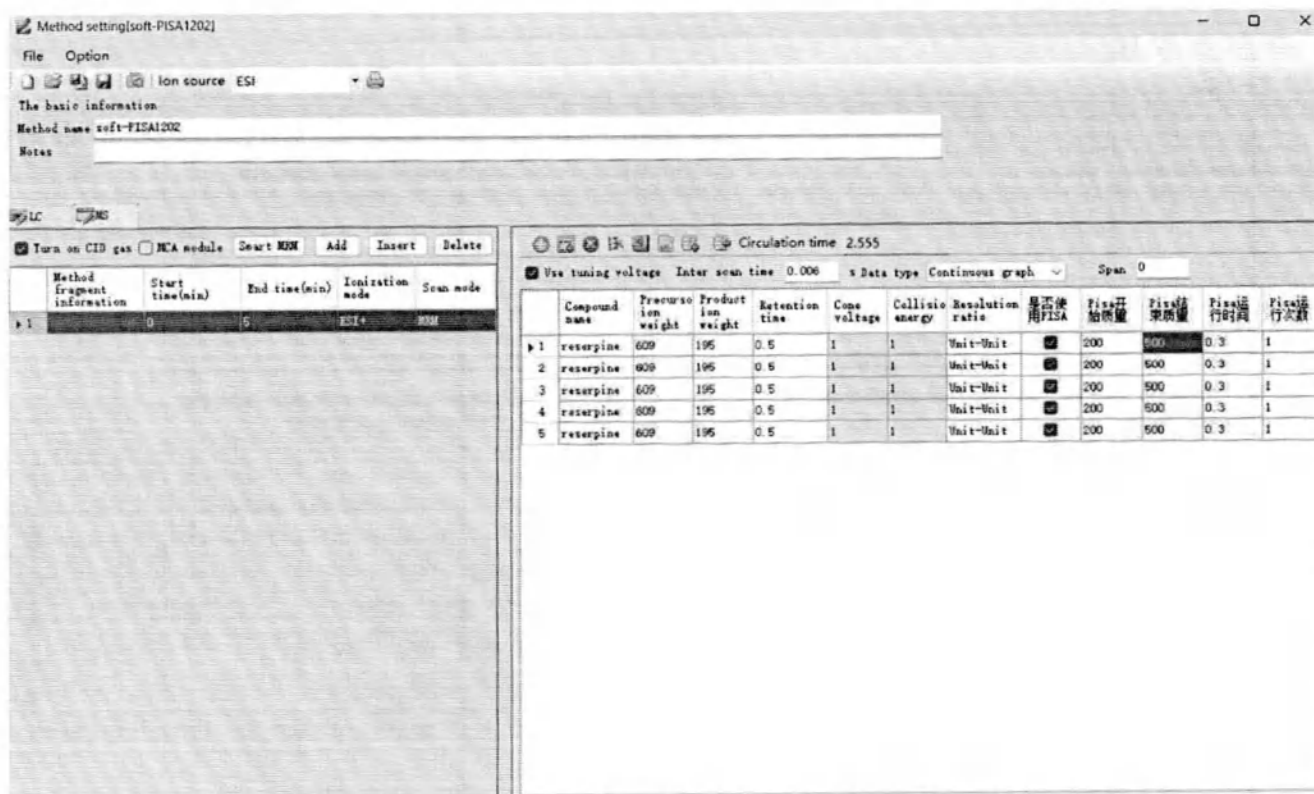


Рисунок 5.27. Интерфейс редактирования канала.

ДЛЯ РИСУНКА 5.27.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Method setting (soft- PISA1202)	Настройка метода (программное обеспечение- PISA1202)
File	Файл
Option	Опция
Ion source ESI	Источник ионов ESI
The basic information	Основная информация
Method name	Наименование метода
soft- PISA1202	программное обеспечение- PISA1202
Notes	Примечания
LC	Жидкостной хроматограф
MS	Масс-спектрометр
Turn on CID gas	Включить газ CID
MCA module	Модуль MCA
Smart MEM	Смарт- MEM
Add	Добавить
Insert	Вставить
Delete	Удалить
Method fragment information	Информация о фрагменте метода
Start time (min)	Время начала (минут)
End time (min)	Время окончания (минут)
Ionization mode ESI+	Режим ионизации ESI+
Scan mode MFM	Режим сканирования MFM
Circulation time 0.012	Время циркуляции 0,012
Use tuning voltage	Напряжение настройки применения
Inter scan time 0.006 s	Время между сканированиями 0,006 с
Data type – Continuous graph	Тип данных – Непрерывный график
Span 0	Диапазон измерения 0
Compound name - reserpine	Наименование химического соединения - резерпин
Precursor ion weight	Масса иона-предшественника
Product ion weight	Масса иона-продукта
Retention time	Время удержания
Cone voltage	Напряжение на конусе
Collision energy	Энергия столкновений
Resolution ratio – Unit-Unit	Соотношение разрешений – единица-единица



Рисунок 5.28. Интерфейс редактирования составного канала во фрагменте метода.

ДЛЯ РИСУНКА 5.28.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Method setting (soft-PISA1202)	Настройка метода (программное обеспечение-PISA1202)
soft-PISA1202	Программное обеспечение- PISA1202
File	Файл
Option	Опция
Ion source ESI	Источник ионов ESI
The basic information	Основная информация
Method name	Наименование метода
soft-VD	программное обеспечение-VD

ДЛЯ РИСУНКА 5.28.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Notes	Примечания
LC	Жидкостной хроматограф
MS	Масс-спектрометр
Turn on CID gas	Включить газ CID
MCA module	Модуль MCA
Smart MEM	Смарт-МЕМ
Add	Добавить
Insert	Вставить
Delete	Удалить
Method fragment information	Информация о фрагменте метода
Start time (min)	Время начала (минут)
End time (min)	Время окончания (минут)
Ionization mode ESI=	Режим ионизации ESI=
Scan mode MFM	Режим сканирования MFM
Circulation time 0.012	Время циркуляции 0,012
Use tuning voltage	Напряжение настройки применения
Inter scan time 0.006 s	Время между сканированиями 0,006 сек
Data type – Continuous graph	Тип данных – Непрерывный график
Span 0	Диапазон измерения 0
Compound list	Перечень химических соединений
Export	Экспорт
Sample name	Наименование образца
Each page	Каждая страница
Previous page	Предыдущая страница
Next page	Следующая страница
Close	Закрыть
Compound name	Наименование химического соединения
Sample name	Наименование образца
English name	Наименование на английском языке
Alas name	Наименование ALAS
Compound type	Тип химического соединения
CAS	CAS
Molecular formular	Молекулярная формула
Molecular weight	Молекулярный вес
Compound list empty, please create or query first	Перечень химических соединений пуст, вначале создайте или сделайте запрос

Меры предосторожности:

- ✓ Приготовление растворителя: отмерьте равные объемы метанола и сверхчистой воды мерным цилиндром, тщательно перемешайте его перед использованием. Все используемые растворители должны быть чистоты «Для хроматографии» или выше;
- ✓ Рекомендуется ввести название соединения, и оно может быть автоматически импортировано, когда количественный метод будет установлен на более позднем этапе;
- ✓ Время удержания зависит от количества каналов соединений в каждом фрагменте и ширины хроматографического пика. Чем больше каналов, тем уже хроматографический пик и короче время удержания. Чаще всего время удержания рекомендуется 50–300 мс;
- ✓ Различные соединения имеют свое оптимальное напряжение на конусе для отбора образцов и энергию столкновения, которые требуют оптимизации параметров;
- ✓ Режим разрешения по умолчанию – режим «Unit-Unit», то есть калибровочная кривая в режиме «Unit» используется для ионов-предшественников для MS1 и ионов-продуктов для MS2. Выберите режим Low-Low, если необходимо улучшить составной отклик, но это может увеличить шум;
- ✓ Введите имя метода и причину изменения, а затем нажмите на иконку  («Сохранить»), чтобы сохранить. После сохранения импорт можно открыть по щелчку (рисунок 5.29.).

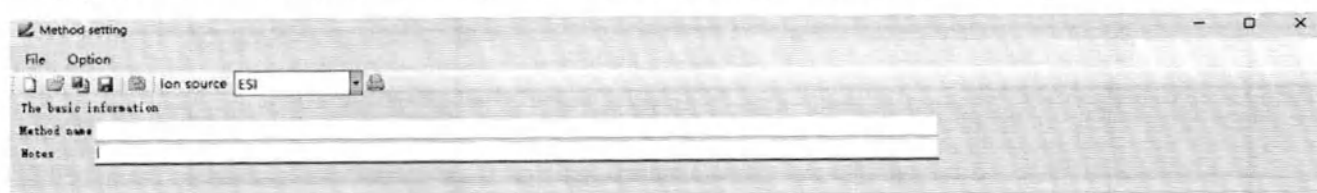


Рисунок 5.29. Интерфейс сохранения метода.

ДЛЯ РИСУНКА 5.30.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Method sequence	Последовательность метода
Real-time Chart	Карта в реальном времени
Chromatogram	Хроматограмма
Mass spectrogram	Масс-спектрограмма
View method	Метод просмотра
Select channel	Выбор канала
Spectra per page	Спектров на страницу
Response (%)	Оклик (%)
Time, min	Время, минут
Progress	Прогресс
Estimated time, min	Расчетное время, мин
Running time, min	Текущее время, мин
LC	Жидкостной хроматограф
MS	Масс-спектрометр
Unconnected	Не подключен
Alarm	Тревога
Monitor information	Информация монитора
MS2HM	Модуль масс-спектрометрии 2 с высоким разрешением
MS2 pre-rod voltage	Напряжение перед стержнем MS2
MS2 ion energy	Энергия ионов MS2
CID Inlet Voltage (V)	Напряжение на входе в ячейку диссоциации, вызванное столкновением (CID) (В)
CID collision energy	Энергия столкновений в ячейке CID
CID outer wall voltage	Напряжение на наружной стенке ячейки CID
CID outlet voltage	Напряжение на выходе ячейки CID
Multiplier Inlet V...	Напряжение на входе умножителя
Multiplier deflection...	Отклонение умножителя
Multiplier Voltage	Напряжение умножителя
Transfer Rod Chamber	Камера трансмиссионного стержня
Analyzer Chamber	Камера анализатора
Collision Cell Chamber	Камера ячейки столкновений
Dynode voltage	Напряжение динода
MS1 RF voltage	Напряжение MS1 RF
MS2 RF voltage	Напряжение MS2 RF
MS1 DCP voltage	Напряжение MS1 DCP
MS1 DCN voltage	Напряжение MS1 DCN
MS2 DCP voltage	Напряжение MS2 DCP
MS2 DCN voltage	Напряжение MS2 DCN
Motherboard power...	Питание материнской платы

- 4) Выберите хроматографический пик для просмотра с помощью левой кнопки мыши, дважды щелкните, соответствующий масс-спектр появится в окне масс-спектра в реальном времени (но только информация об одном сканировании), используйте левую кнопку мыши, чтобы выбрать диапазон на хроматограмме, и появится средний масс-спектр за это время, то есть среднее значение всех сигналов сканирования масс-спектров в выбранном временном диапазоне.

После завершения анализа не оставляйте вials с пробами в автосемплере на длительное время.

5.11. Обработка данных обычного анализа

Обработка результатов анализа возможна ручным и автоматическим методом. При ручном методе анализ результатов проводится согласно указаниям соответствующего раздела инструкции по применению используемого набора реагентов. Порядок действий при автоматическом методе анализа приведен ниже и в Разделе 14 настоящего Руководства по эксплуатации.

5.11.1. Качественный анализ



- 1) Нажмите на иконку  в главном интерфейсе, программное обеспечение для анализа открытых данных;
- 2) Выберите «Качественный анализ» в верхней строке меню всплывающего окна, чтобы открыть интерфейс качественного анализа, как показано на рисунке 5.31.

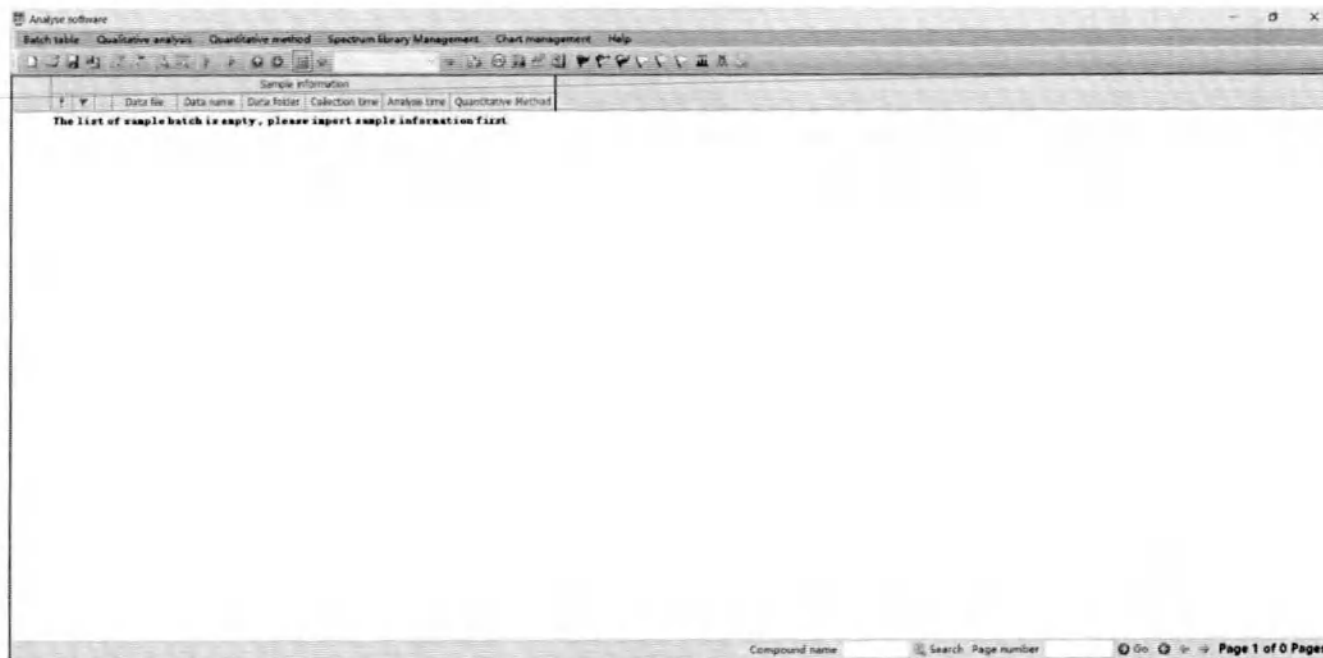


Рисунок 5.31. Интерфейс создания качественного метода.

ДЛЯ РИСУНКА 5.31.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analyse software	Программное обеспечение для анализа
Batch table	Таблица серии
Qualitative analysis	Качественный анализ
Quantitative analysis	Количественный анализ
Spectrum library management	Управление библиотекой спектров
Chart management	Управление картой
Help	Помощь
Sample information	Информация об образце
Data file	Файл данных
Data name	Наименование данных
Data folder	Папка данных
Collection time	Время отбора
Analysis time	Время анализа
Quantitative method	Количественный метод
The list of sample batch is empty.	Перечень серии образцов пуст.
Please import sample information first	Вначале введите информацию об образцах
Compound name	Наименование химического соединения
Search page number	Поиск номера страницы
Go	Идти к
Page 1 of 0 pages	Страница 1 из 0 страниц

- 3) Откройте файл данных для анализа, выберите  импорт целых папок, опционально  загрузите определенные файлы данных, как показано на рисунке 5.32.

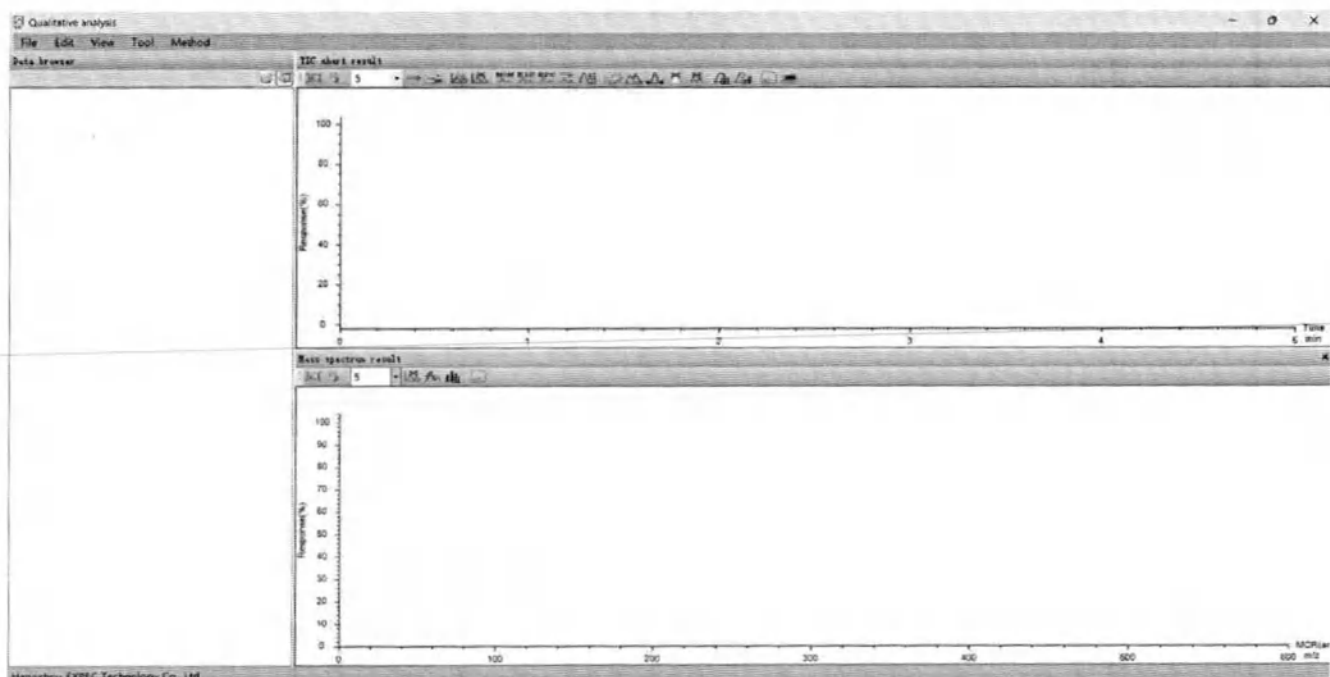


Рисунок 5.32. Интерфейс импорта данных метода.

ДЛЯ РИСУНКА 5.32.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Qualitative analysis	Количественный анализ
File	Файл
Edit	Редактировать
View	Просмотр
Tool	Инструмент
Method	Метод
Data browser	Браузер данных
TIC chart result	Результат карты ТС
Response, %	Отклик, %
Time, min	Время, мин
MCR (array) m/z	MCR (матрица) масса/заряд
Mass spectrum result	Результат масс-спектра

4) Введение функций:

1. Увеличение или уменьшение масштаба спектра (рисунок 5.33.)

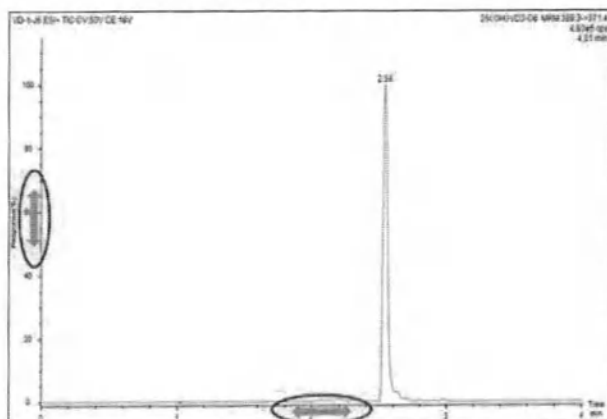


Рисунок 5.33. Интерфейс функции настройки масштаба спектра.

ДЛЯ РИСУНКА 5.33.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Response, %	Отклик, %
Time, min	Время, мин
cps	импульсов в секунду
min	мин

Для увеличения или уменьшения масштаба спектра по оси X, переместите курсор под ось X, пока не появится горизонтальная двойная стрелка. Удерживая нажатой правую кнопку мыши, перетащите слева направо, чтобы увеличить ось X. Удерживая нажатой правую кнопку мыши, перетащите справа налево, — ось X сожмется.

Для увеличения или уменьшения масштаба спектра по оси Y, переместите курсор влево от оси Y, пока не появится двойная вертикальная водяная стрелка. Нажмите и удерживайте правую кнопку мыши и перетащите снизу вверх – ось Y будет увеличена; нажмите правую кнопку мыши и перетащите сверху вниз – ось Y уменьшится; спектр будет изменяться равномерно.

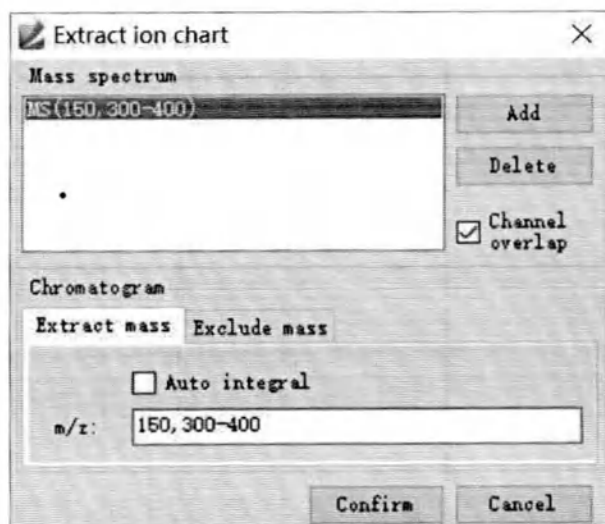
Нажмите на иконку , чтобы восстановить масштаб по умолчанию. Нажмите на иконку , чтобы восстановить последний масштаб шкалы. Эти две функции доступны во всех окнах при качественном и количественном анализе не только хроматограмм, но и масс-спектров. Удерживайте правую кнопку мыши и перетащите, чтобы увеличить или уменьшить масштаб спектра; удерживайте левую кнопку мыши и перетащите, чтобы перевести координаты.

Примечание. Другой способ увеличения: удерживать и перетаскивать правую кнопку на хроматограмме или масс-спектре, чтобы выбрать область, после чего область будет увеличена.

2. Извлечение хроматограммы

В этом программном обеспечении можно извлекать хроматограммы EIC (хроматограммы извлеченных ионов), BPC (хроматограммы основного пика) и MRM (хроматограммы канала MRM):

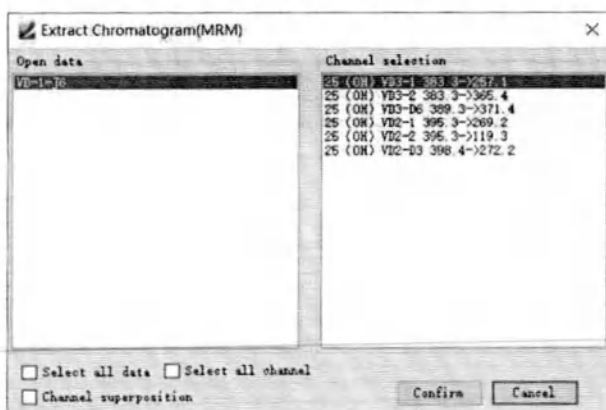
- ✓ Нажмите левой кнопкой мыши по ярлыку  в окне хроматограммы можно извлечь или щелкнуть правой кнопкой мыши в области отображения хроматограммы и выбрать «Извлечь хроматограмму» во всплывающем меню. Во всплывающем диалоговом окне введите массу, которую нужно извлечь, и нажмите кнопку «ОК». Если необходимо одновременно извлечь несколько хроматограмм разной массы, введите несколько значений, разделенных запятыми. Также можно извлечь хроматограмму диапазона масс, например, введя диапазон масс 300–400 ед. (рисунок 5.34.).



ДЛЯ РИСУНКА 5.34.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Extract ion chart	Карта извлечения ионов
Mass spectrum MS (150, 300–400)	Масс-спектр MS (150, 300–400)
Add	Добавить
Delete	Удалить
Channel overlap	Перекрывание каналов
Chromatogram	Хроматограмма
Extract mass	Извлечь массу
Exclude mass	Исключить массу
Auto integral	Автоматическое интегрирование
m/z: 150, 300–400	Масса/заряд: 150, 300–400
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

Рисунок 5.34. Интерфейс функции извлеченной ионной хроматограммы.

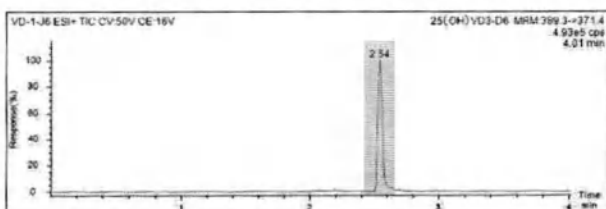
- ✓ Нажмите левой кнопкой мыши по ярлыку в окне хроматограммы , извлеките хроматограмму основного пика, которая чаще всего используется в полном спектре сканирования, что может эффективно уменьшить помехи от шума базовой линии и получить относительно чистый спектр;
- ✓ Щелкнуть левой кнопкой мыши по ярлыку в окне хроматограммы , извлеките хроматограмму MRM, во всплывающем диалоговом окне выберите данные для извлечения и соответствующий канал MRM (рисунок 5.35.).



ДЛЯ РИСУНКА 5.35.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Extract chromatogram (MRM)	Извлечь хроматограмму (MRM)
Open data	Открыть данные
Channel selection	Выбор канала
Select all data	Выбрать все данные
Select all channel	Выбрать все каналы
Channel superposition	Наложение каналов
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

Рисунок 5.35. Функциональный интерфейс извлечения хроматограммы канала MRM.

3. Извлечение масс-спектра (рисунок 5.36.)



ДЛЯ РИСУНКА 5.36.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Response, %	Отклик, %
Time, min	Время, мин
cps	импульсов в секунду
min	минут

Рисунок 5.36. Функциональный интерфейс извлечения масс-спектра.

Нажмите и удерживайте левую кнопку мыши на хроматограмме, выберите диапазон, а затем дважды щелкните левой кнопкой мыши, чтобы получить средний масс-спектр за выбранный период времени.

Для получения масс-спектра в определенный момент времени дважды щелкните левой кнопкой в этот момент.

Выберите «Walking Chromatogram» из меню правой кнопки мыши, переместите курсор в область хроматограммы и используйте клавиши со стрелками влево и вправо на клавиатуре для быстрого просмотра масс-спектра в любой момент времени во всем временном диапазоне хроматограммы.

Нажмите на иконку  в окне спектра, появится просмотр и отображение результатов масс-спектрального пика во всплывающем окне со списком пиков справа, включая информацию о массе, абсолютном содержании и процентной доле пиков масс-спектра, как показано на рисунке 5.37.

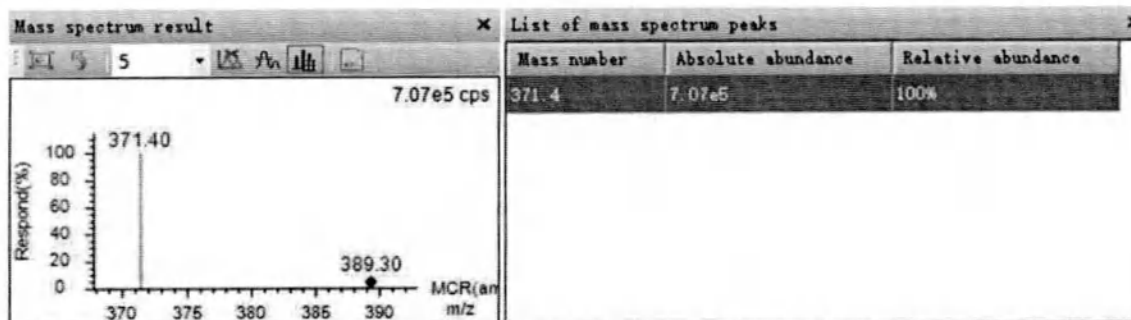
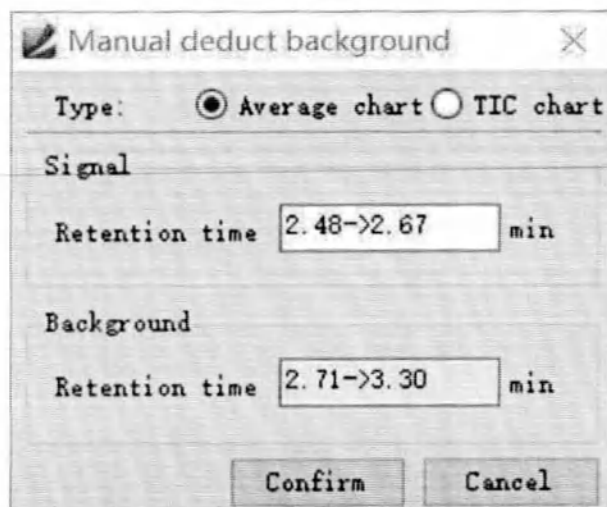


Рисунок 5.37. Интерфейс отображения спектра.

ДЛЯ РИСУНКА 5.37.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Mass spectrum result	Результат масс-спектра
Response, %	Отклик, %
cps	импульсов в секунду
MCR (array) m/z	MCR (матрица) масса/заряд
List of mass spectrum peaks	Перечень пиков масс-спектра
Mass number	Массовое число
Absolute abundance	Абсолютная интенсивность
Relative abundance	Относительная интенсивность

4. Масс-спектр с вычтенным фоном

Нажмите на иконку  в окне хроматограммы, затем во всплывающем диалоговом окне используйте левую кнопку мыши, чтобы выбрать сигнал и фоновый диапазон на хроматограмме, и программа автоматически отобразит масс-спектр за вычетом фона в окне масс-спектра, как показано на рисунке 5.38.



ДЛЯ РИСУНКА 5.38.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Manual deduct background	Ручной вычет фоновых спектров
Type	Тип
Average chart	Карта среднего значения
TIC chart	Карта полного ионного тока
Signal	Сигнал
Retention time 2.48–2.67 min	Время удерживания 2.48–2.67 мин
Background	Фон
Retention time 2.71–3.30 min	Время удерживания 2.71–3.30 мин
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

Рисунок 5.38. Интерфейс ручного вычета фоновых спектров.

5. Интеграция

Нажмите на иконку  в окне хроматограммы, хроматографические пики в спектре могут быть автоматически интегрированы. Параметры автоматического интегрирования задаются в верхней части строки «Меню», после этого выберите «Метод», далее – «Параметры интегрирования». Если необходимо скорректировать результаты автоматической интеграции, нажмите на иконку  и проведите интеграцию вручную, как показано на рисунке 5.39.

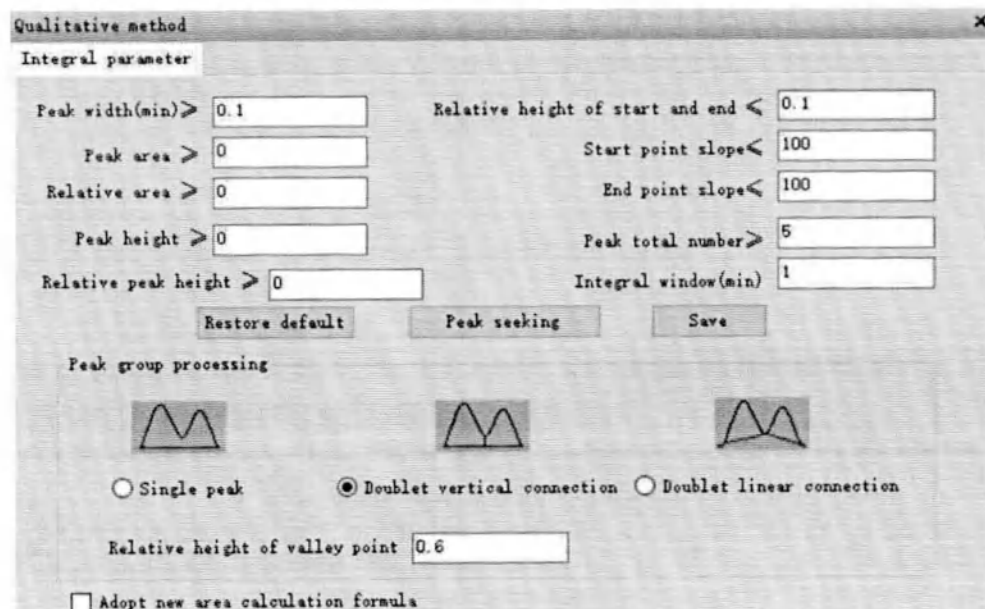


Рисунок 5.39. Интерфейс настройки интеграции.

ДЛЯ РИСУНКА 5.39.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Qualitative method	Качественный метод
Integral parameter	Параметр интегрирования
Peak width (min) ≥ 0.1	Ширина пика (мин) ≥ 0.1
Peak area ≥ 0	Площадь пика ≥ 0
Relative area ≥ 0	Относительная площадь ≥ 0
Peak height ≥ 0	Высота пика ≥ 0
Relative peak height ≥ 0	Относительная высота пика ≥ 0
Relative height of start and end ≤ 0.1	Относительная высота начала и конца ≤ 0.1
Start point slope ≤ 100	Наклон в начальной точке ≤ 100
End point slope ≤ 100	Наклон в конечной точке ≤ 100
Peak total number ≥ 5	Общее количество пиков ≥ 5
Integral window (min) 1	Окно интегрирования (мин) 1
Restore default	Восстановить по умолчанию
Peak seeking	Поиск пика
Save	Сохранить
Peak group processing	Обработка группы пиков
Single peak	Одиночный пик
Doublet vertical connection	Вертикальное соединение сдвоенных пиков
Doublet linear connection	Линейное соединение сдвоенных пиков
Relative height of valley point	Относительная высота точки минимума
Adopt new area calculation formula	Принять новую формулу расчета площади

Нажмите на иконку  в окне хроматограммы – появится просмотр и отображение результатов интегрирования в окне списка пиков окна хроматограммы, включая время удержания пиков, площадь пиков и информацию о высоте пиков, как показано на рисунке 5.40.

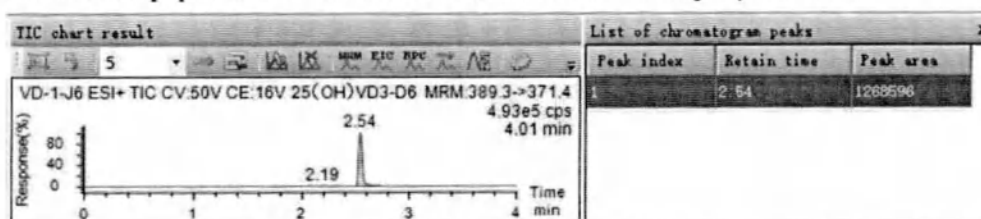


Рисунок 5.40. Интерфейс списка информации о пиках.

ДЛЯ РИСУНКА 5.40.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
TIC chart result	Результат карты полного ионного тока
Response, %	Отклик, %
cps	импульсов в секунду
min	мин
Time, min	Время, мин
List of chromatogram peaks	Перечень пиков хроматограммы
Peak index	Индекс пика
Retain time	Время удержания
Peak area	Площадь пика

6. Наложение спектров

Нажмите на иконку  в окне хроматограммы, с помощью которой все отображаемые спектры могут быть наложены друг на друга, или, удерживая нажатой клавишу Ctrl, выберите несколько указанных спектров, а затем нажмите эту же иконку для их наложения. При наложении разных ионных каналов для одних и тех же данных название каждого канала также отображается над наложенной хроматограммой, как показано на рисунке 5.41.

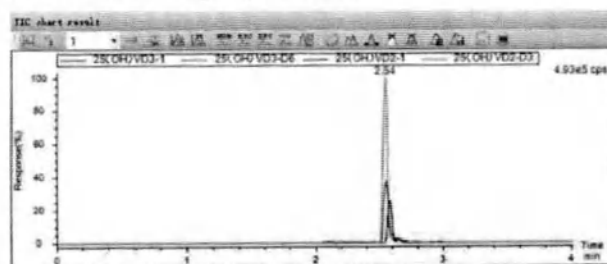


Рисунок 5.41. Интерфейс наложения спектра.

ДЛЯ РИСУНКА 5.41.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
TIC chart result	Результат карты полного ионного тока
Response, %	Отклик, %
cps	импульсов в секунду
Time, min	Время, мин

7. Расчет отношения сигнал/шум

Щелкните иконку  в окне хроматограммы, во всплывающем диалоговом окне левой кнопкой мыши выберите временной диапазон сигнала и шума на хроматограмме, затем выберите метод расчета отношения сигнал/шум (RMS или отношение пик-пик) и нажмите кнопку, чтобы рассчитать отношение сигнал/шум, как показано на рисунке 5.42.

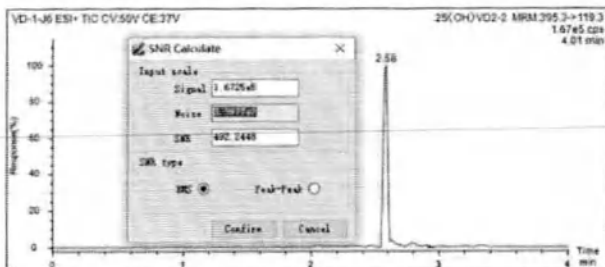


Рисунок 5.42. Ручной расчет интерфейса SNR.

ДЛЯ РИСУНКА 5.42.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Response, %	Отклик, %
cps	импульсов в секунду
min	мин
Time, min	Время, мин
SNR calculate	Рассчитать SNR
Input scale	Масштаб ввода
Signal	Сигнал
Noise 3	Шум
SNR type	Тип SNR
RMS	Среднеквадратичное значение
Peak-Peak	Пик-пик
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

Также можно установить «Автоматически рассчитывать отношение сигнал-шум при интегрировании хроматограммы» в параметре отношения сигнал-шум в строке «Меню» выберите «Метод», при этом отношение сигнал-шум интегрированного пика будет автоматически отображаться в интегрированном списке пиков, как показано на рисунке 5.43.

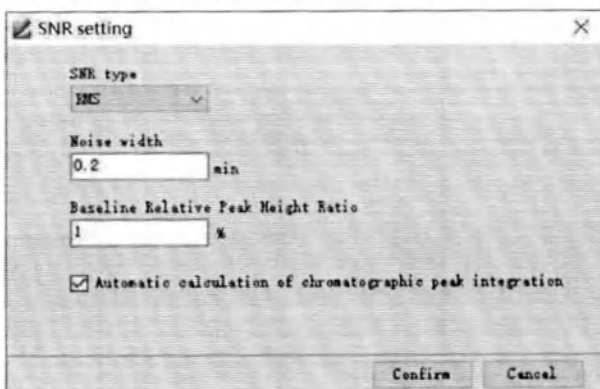


Рисунок 5.43. Интерфейс настройки SNR.

ДЛЯ РИСУНКА 5.43.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
SNR type	Тип SNR
RMS	Среднеквадратичное значение
Noise width 0.2 min	Ширина шума 0,2 мин
Baseline relative peak height ratio 1%	Базовое соотношение относительной высоты пика 1%
Automatic calculation of chromatographic peak integration	Автоматический расчет интегрирования пика хроматограммы
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

8. Сглаживание хроматограммы

Нажмите на иконку  в окне хроматограммы, затем во всплывающем диалоговом окне выберите размер окна сглаживания, алгоритм сглаживания (количество применений) и время сглаживания и нажмите кнопку, чтобы сгладить хроматограмму, как показано на рисунке 5.44.

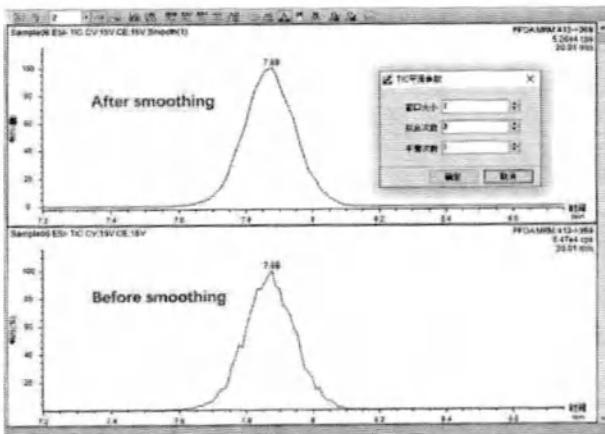


Рисунок 5.44. Интерфейс настройки режима SNR.

ДЛЯ РИСУНКА 5.44.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Response, %	Отклик, %
cps	импульсов в секунду
min	мин
Time, min	Время, мин
After smoothing	После сглаживания
Before smoothing	До сглаживания
Sample ESI-TIC CV:15V CE: 15C Smooth (1)	Образец ESI-TIC CV:15V CE: 15C Сглаживание (1)

9. Расчет ширины на полувысоте пика (FWHM)

Нажмите на иконку  в окне спектра, затем во всплывающем диалоговом окне используйте левую кнопку мыши, чтобы выбрать временной диапазон ширины полупика, который необходимо рассчитать, и вычисленную высоту пика на масс-спектре, и нажмите кнопку, чтобы рассчитать ширину полупика масс-спектра, как показано на рисунке 5.45.

Примечание. Расчеты ширины на полувысоте пика (FWHM) действительны только в том случае, если спектр имеет непрерывный формат.

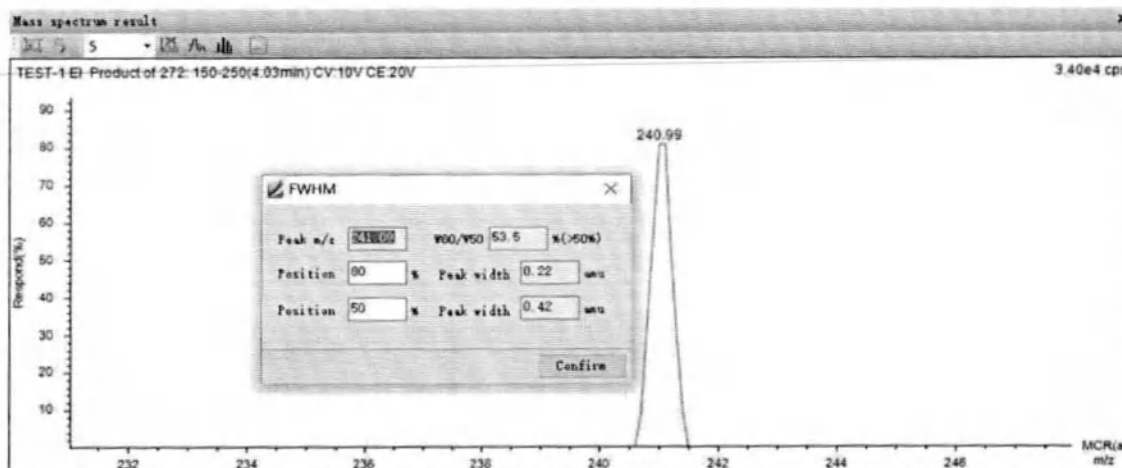


Рисунок 5.45. Интерфейс расчета ширины на полувысоте пика (FWHM).

ДЛЯ РИСУНКА 5.45.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Mass spectrum result	Результат масс-спектра
Response, %	Отклик, %
cps	3.40e4 импульсов в секунду
MCR (array) m/z	MCR (матрица) масса/заряд
TEST-1 EI Product of 272:150- 250 (4.03 min) CV:10V CE: 20V	Тест-1 EI Продукт f 272:150- 250 (4.03 мин) CV:10V CE: 20V
FWHM	Ширина на полувысоте пика
Peak m/z	Пик, масса/заряд
Position	Положение
Peak width	Ширина пика
amu	Единицы атомной массы
Confirm	Подтвердить

10. Добавление текста

Щелкните правой кнопкой мыши в области спектра, выберите «Добавить текст» во всплывающем меню, введите текст, который хотите добавить, установите шрифт и формат и нажмите «ОК», чтобы добавить текст в указанную позицию на спектре, как показано на рисунке 5.46.

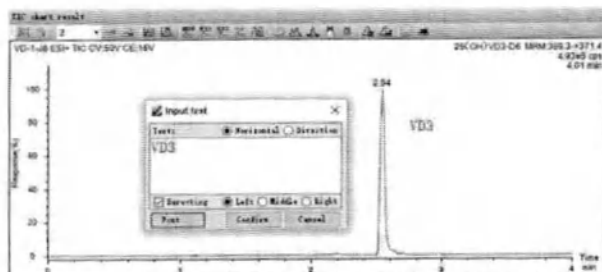


Рисунок 5.46.

Интерфейс добавления текста спектра.

ДЛЯ РИСУНКА 5.46.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
TIC chart result	Результат
Response, %	Отклик, %
cps	импульсов в секунду
min	мин
Input text	Ввод текста
Horizontal	Горизонтальное
Direction	Направление
Directing	Направлять
Left	Левое
Middle	Среднее
Right	Правое
Font	Шрифт
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

11. Настройки спектра

Нажмите вкладку «Инструменты», выберите «Настройки спектра» или щелкните правой кнопкой мыши в области спектра и выберите «Настройки спектра» во всплывающем меню, установите максимальное количество спектров, которые могут отображаться одновременно. Максимальное количество спектров, которые могут отображаться одновременно, можно указать на панели ярлыков хроматограммы  в настройках из выпадающего меню, как показано на рисунке 5.47.

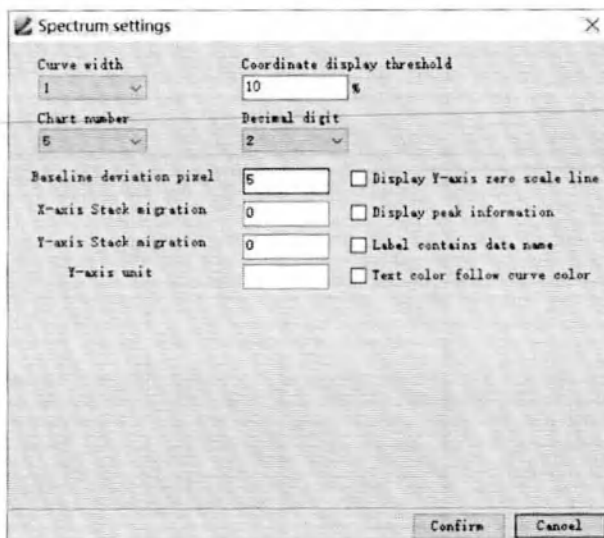


Рисунок 5.47.

Интерфейс настройки хроматограммы.

ДЛЯ РИСУНКА 5.47.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Spectrum settings	Настройка спектра
Curve width	Ширина кривой
Coordinate display threshold	Порог отображения координаты
Chart number	Номер карты
Decimal digit	Десятичный знак
Baseline deviation pixel	Отклонение от базовой линии, пикселей
X-axis stack migration	Миграция блока по оси X
Y-axis stack migration	Миграция блока по оси Y
Y-axis unit	Единицы по оси Y
Display Y-axis zero scale line	Отображение нулевой линии масштаба по оси Y
Display peak information	Отображение информации о пике
Label contains data name	Ярлык содержит наименование данных
Text color follow curve color	Цвет текста соответствует цвету кривой

В окне «Настройки спектра» также появляется настройка отображения гистограммы, которая отображает спектральные пики по высоте пика, как показано на рисунке 5.48.

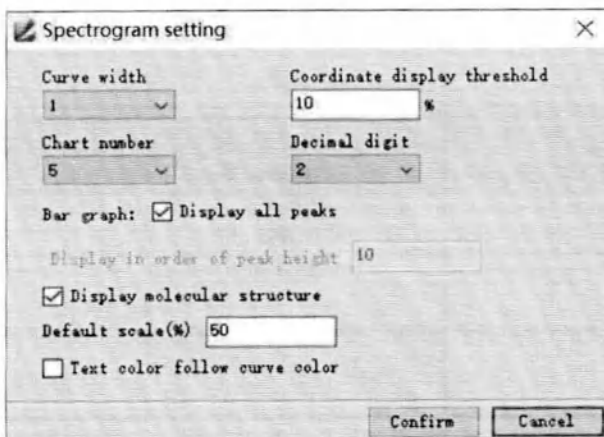


Рисунок 5.48. Интерфейс настройки спектра.

ДЛЯ РИСУНКА 5.48.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Spectrogram setting	Настройка спектра
Curve width	Ширина кривой
Coordinate display threshold	Порог отображения координаты
Chart number	Номер карты
Decimal digit	Десятичный знак
Bar graph: Display all peaks	Столбчатая диаграмма: Отображать все пики
Display in order of peak height	Отображать в порядке высоты пиков
Display molecular structure	Отображать молекулярную структуру
Default scale (%)	Масштаб по умолчанию (%)
Text color follow curve color	Цвет текста соответствует цвету кривой
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

5.11.2. Количественный анализ

В этом разделе показано создание количественного метода и пакетного процесса на основе собранных данных MRM.



Сначала нажмите на значок в главном интерфейсе  программного обеспечения для анализа данных. Затем в верхней строке меню всплывающего окна выберите «Количественный метод» для входа, а затем нажмите «Новый метод» в «Метод», чтобы открыть интерфейс настройки количественного метода, как показано на рисунке 5.49.

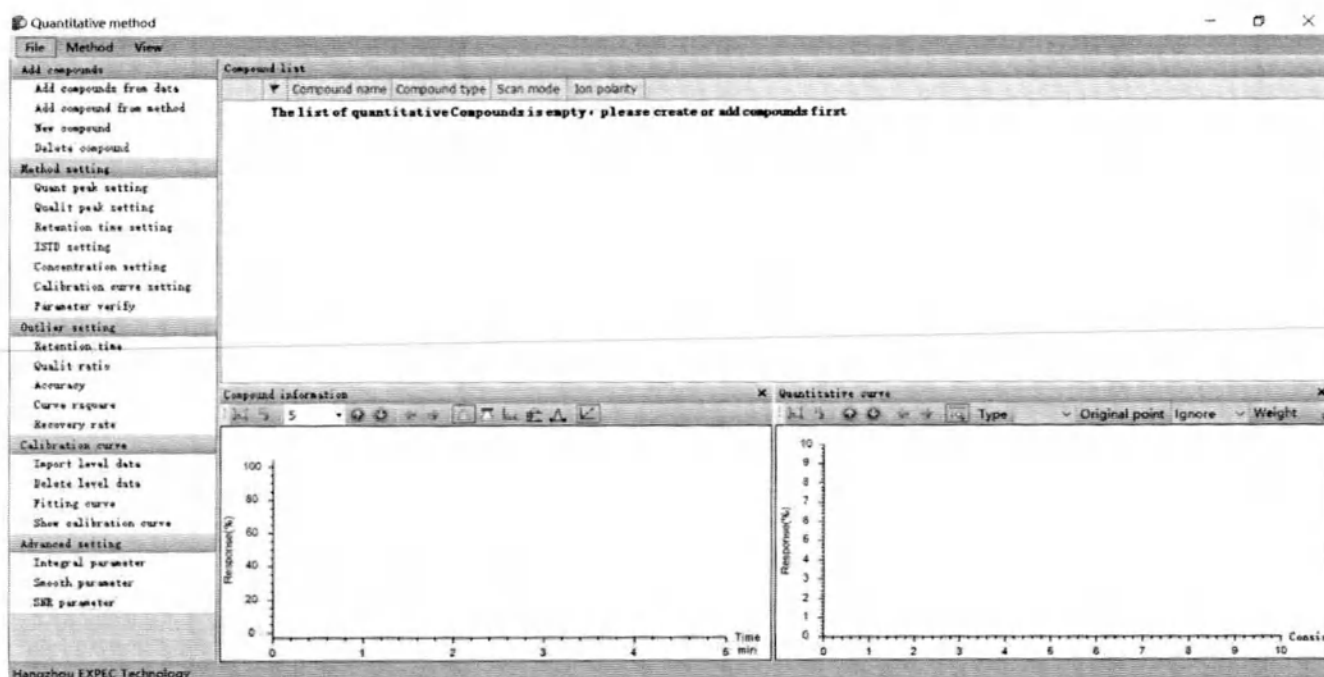


Рисунок 5.49. Интерфейс создания количественного метода.

ДЛЯ РИСУНКА 5.49.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Quantitative method	Количественный метод
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compound from data	Добавить химическое соединение из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химических соединений
Compound type	Тип химических соединений
Scan mode	Режим сканирования
Ion polarity	Полярность ионов
The list of quantitative compounds is empty, please create or add compounds first	Перечень количественных химических соединений пуст, вначале создайте или добавьте химические соединения
Compound information	Информация о химических соединениях

ДЛЯ РИСУНКА 5.49.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Response (%)	Ответ (%)
Time, min	Время, мин
Quantitative curve	Количественная кривая
Type	Тип
Original point	Первоначальный пункт
Ignore	Игнорировать
Weight	Масса
Concentration	Концентрация

5.11.2.1. Метод внешнего стандарта

Количественные данные метода внешнего стандарта включают калибровку, контроль качества, образцы 16 сульфаниламидных соединений. Путь хранения данных: Mass Analyst/Количественные анализы/метод внешних стандартов. Каталог данных выглядит, как показано на рисунке 5.50.

☐ VD-1-BlackIcmsDat ☐ VD-1-J1IcmsDat ☐ VD-1-J2IcmsDat ☐ VD-1-J3IcmsDat ☐ VD-1-J4IcmsDat ☐ VD-1-J5IcmsDat ☐ VD-1-J6IcmsDat ☐ VD-1-L1IcmsDat ☐ VD-1-L2IcmsDat ☐ VD-1-L3IcmsDat ☐ VD-1-L4IcmsDat ☐ VD-1-L5IcmsDat ☐ VD-1-L6IcmsDat ☐ VD-1-Sample1IcmsDat ☐ VD-1-Sample2IcmsDat ☐ VD-1-Sample3IcmsDat ☐ VD-ng.dlmlth	Calibration/Black QC Sample Quantitative method
---	---

ДЛЯ РИСУНКА 5.50.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Calibration/Black	Калибровка/Черный
QC	Контроль качества
Sample	Образец
Quantitative method	Количественный метод

Рисунок 5.50. Интерфейс данных метода внешних стандартов.

- 1) Нажмите «Добавить соединения из данных» на левой навигационной панели интерфейса настройки количественного метода и импортируйте полученные данные MRM SA-100ppb.lcmsDat (рекомендуется выбрать репрезентативный спектр – чаще всего выбирают данные образца с более высокой концентрацией, чтобы время удержания и качественное соотношение были более точны, как показано на рисунке 5.51).

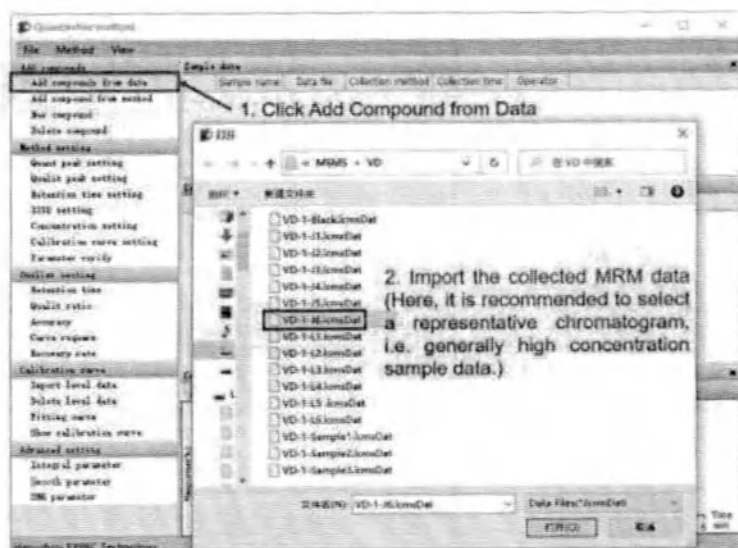


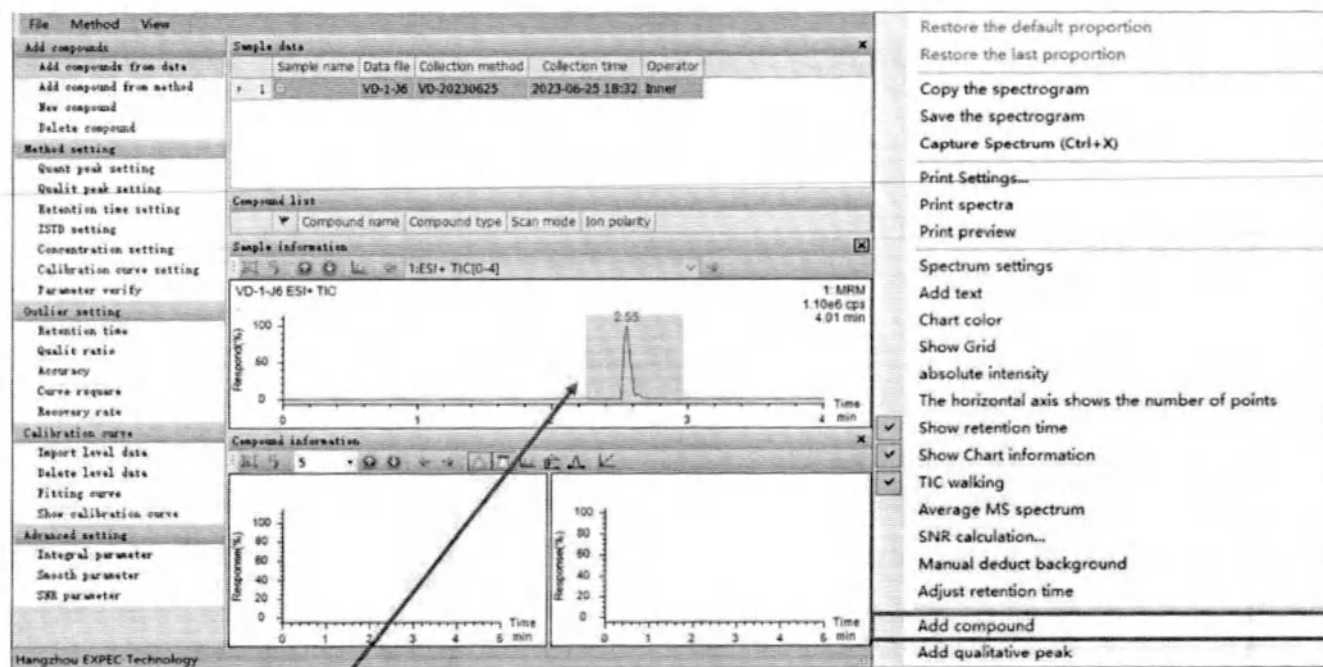
Рисунок 5.51. Интерфейс импорта данных.

ДЛЯ РИСУНКА 5.51.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Quantitative method	Количественный метод

ДЛЯ РИСУНКА 5.51.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compound from data	Добавить химическое соединение из данных
1. Click Add compound from data	1. Нажать «Добавить химическое соединение из данных»
2. Import the collected MRM data (Here, it is recommended to select a representative chromatogram, i.e. generally high concentration sample data)	2. Импортировать собранные данные MRM (Здесь рекомендуется выбрать представительную хроматограмму, то есть данные образца с высокой концентрацией)
Data files	Файлы данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Данные уровня ввода
Delete level data	Данные уровня удаления
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор

- 2) После импорта данных в нижней части интерфейса появится окно информации об образце, и будет отображаться хроматограмма ТИС образца. Выбрав левой кнопкой мыши диапазон времени, содержащий анализируемое соединение, позволит «Добавить Соединение» в контекстном меню. Соединение будет добавлено в список соединений, как показано на рисунке 5.52.



1. Select a time range containing on compounds

2. Select Add Compound from the right click-menu

Рисунок 5.52. Добавление составного интерфейса (метод внешнего стандарта).

ДЛЯ РИСУНКА 5.52.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных

ДЛЯ РИСУНКА 5.52.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type	Тип химического соединения
Scan mode	Режим сканирования
Ion polarity	Полярность ионов
Response, %	Отклик, %
cps	импульсов в секунду
min	мин
Time, min	Время, мин
Compound information	Информация о химическом соединении
1. Select a time range containing the compounds	1. Выбрать диапазон времени, содержащий химические соединения
2. Select Add Compound from the right-click menu	2. Выбрать «Добавить химическое соединение» из меню, выводимого правой кнопкой мыши
Restore the default proportion	Восстановить пропорцию, заданную по умолчанию
Restore the last proportion	Восстановить последнюю пропорцию
Copy the spectrogram	Копировать спектрограмму
Save the spectrogram	Сохранить спектр
Capture spectrum (Ctrl + X)	Захват спектра (Ctrl + X)
Print settings	Настройки печати
Print spectra	Печать спектров
Print preview	Печать предварительного просмотра
Spectrum settings	Настройки спектра
Add text	Добавить текст
Chart color	Цвет карты
Show grid	Показать сетку
Absolute intensity	Абсолютная интенсивность
The horizontal axis shows the number of points	Горизонтальная ось показывает количество точек
Show retention time	Показать время удержания
Show chart information	Показать информацию карты
TIC walking	Цикл полного ионного тока
Average MS spectrum	Средний спектр масс-спектрометрии
SNR calculation	Расчет отношения сигнал-шум
Manual deduct background	Фон ручного вычета
Adjust retention time	Откорректировать время удержания
Add compound	Добавить химическое соединение
Add qualitative peak	Добавить качественный пик

- 3) Программное обеспечение автоматически создаст список соединений, чтобы проверить, есть ли какие-либо недостающие соединения, как показано на рисунке 5.53.

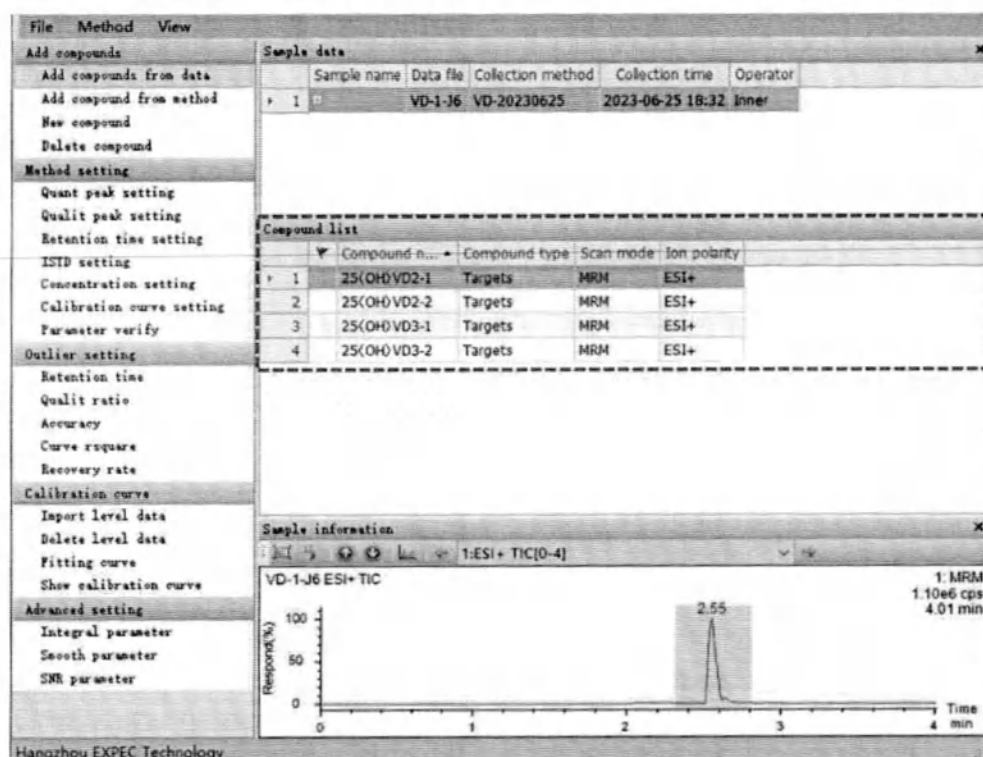


Рисунок 5.53. Интерфейс добавленного списка соединений (метод внешнего стандарта).

ДЛЯ РИСУНКА 5.53.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных

ДЛЯ РИСУНКА 5.53.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Sample information	Информация об образце
Response, %	Отклик, %
cps	импульсов в секунду
min	мин
Time, min	Время, мин

- 4) Параметр Method setting («Настройка метода») на левой панели навигации выполняется сверху вниз. Нажмите Method setting («Настройка метода»), выберите Quant peak setting («Настройка количественного пика»), чтобы проверить правильность добавленных пиков соединения, используемых для его количественного определения. По умолчанию для количественного определения чаще всего выбирают ионную пару с более высокой интенсивностью каждого соединения (рисунок 5.54.).

1. Click Quantitative Peak Settings

Sample name	Data file	Collection method	Collection time	Operator
1	VD-1-J6	VD-20230625	2023-06-25 18:32	Inner

Compound name	Compound type	Scan mode	Ion polarity	Fixed Ion	Scan ion	Ion channel
1 25(OH)VD2-1	Targets	MRM	ESI+	395.3	269.2	395.3-->269.2
2 25(OH)VD2-2	Targets	MRM	ESI+	395.3	119.3	395.3-->119.3
3 25(OH)VD2-D3	Targets	MRM	ESI+	398.4	272.2	398.4-->272.2
4 25(OH)VD3-1	Targets	MRM	ESI+	383.3	257.1	383.3-->257.1
5 25(OH)VD3-2	Targets	MRM	ESI+	383.3	365.4	383.3-->365.4
6 25(OH)VD3-D6	Targets	MRM	ESI+	389.3	371.4	389.3-->371.4

2. By default, the ion pair with higher strength of each compound is selected for quantitative analysis

Рисунок 5.54. Интерфейс настройки пиков, используемых для количественного определения соединений (метод внешнего стандарта).

ДЛЯ РИСУНКА 5.54.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения

ДЛЯ РИСУНКА 5.34.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Fixed ion	Фиксированные ионы
Scan ion	Сканируемые ионы
Ion channel	Канал ионов
Targets	Целевые
1. Click quantitative peak settings	1. Нажать «Настройки количественного пика»
2. By default, the ion pair with higher strength of each compound is selected for quantitative analysis	2. По умолчанию, ионную пару с более высокой прочностью выбирают для количественного анализа

- 5) Нажмите Method setting («Настройка метода»), выберите Qualit peak setting («Настройка качественного пика»), чтобы проверить правильность добавленных пиков соединения, используемых для его качественного определения. Параметры качественных пиков автоматически генерируются при добавлении соединений. По умолчанию для характеристики выбирается ионная пара с более низкой интенсивностью каждого соединения, как показано на рисунке 5.55.

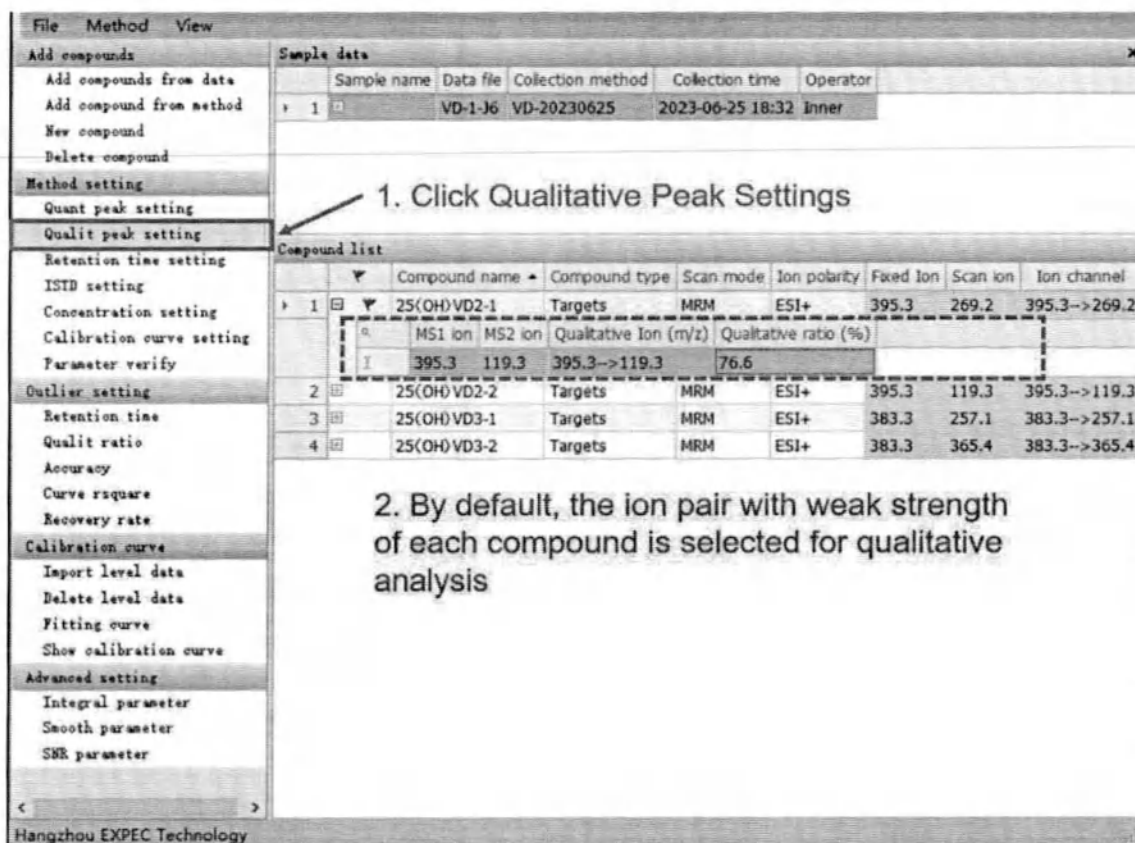


Рисунок 5.55. Интерфейс настройки пиков, используемых для качественного определения соединений (метод внешнего стандарта).

ДЛЯ РИСУНКА 5.55.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации

ДЛЯ РИСУНКА 5.55.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Fixed ion	Фиксированные ионы
Scan ion	Сканированные ионы
Ion channel	Канал ионов
Targets	Целевые
MS1 ion	Ион MS1
MS2 ion	Ион MS2
Qualitative ion (m/z)	Качественный ион (масса/заряд)
Qualitative ratio (%)	Качественное соотношение (%)
1. Click qualitative peak settings	1. Нажать «Настройки качественного пика»
2. By default, the ion pair with higher strength of each compound is selected for qualitative analysis	2. По умолчанию, ионную пару с более высокой прочностью выбирают для качественного анализа

- 6) Нажмите Method setting («Настройка метода»), выберите Retention time setting («Настройка времени удержания»), проверьте время удержания добавленного соединения и установите диапазон интегрирования. По умолчанию допустимый диапазон отклонения времени удержания находится в пределах $\pm 0,5$ мин, как показано на рисунке 5.56.

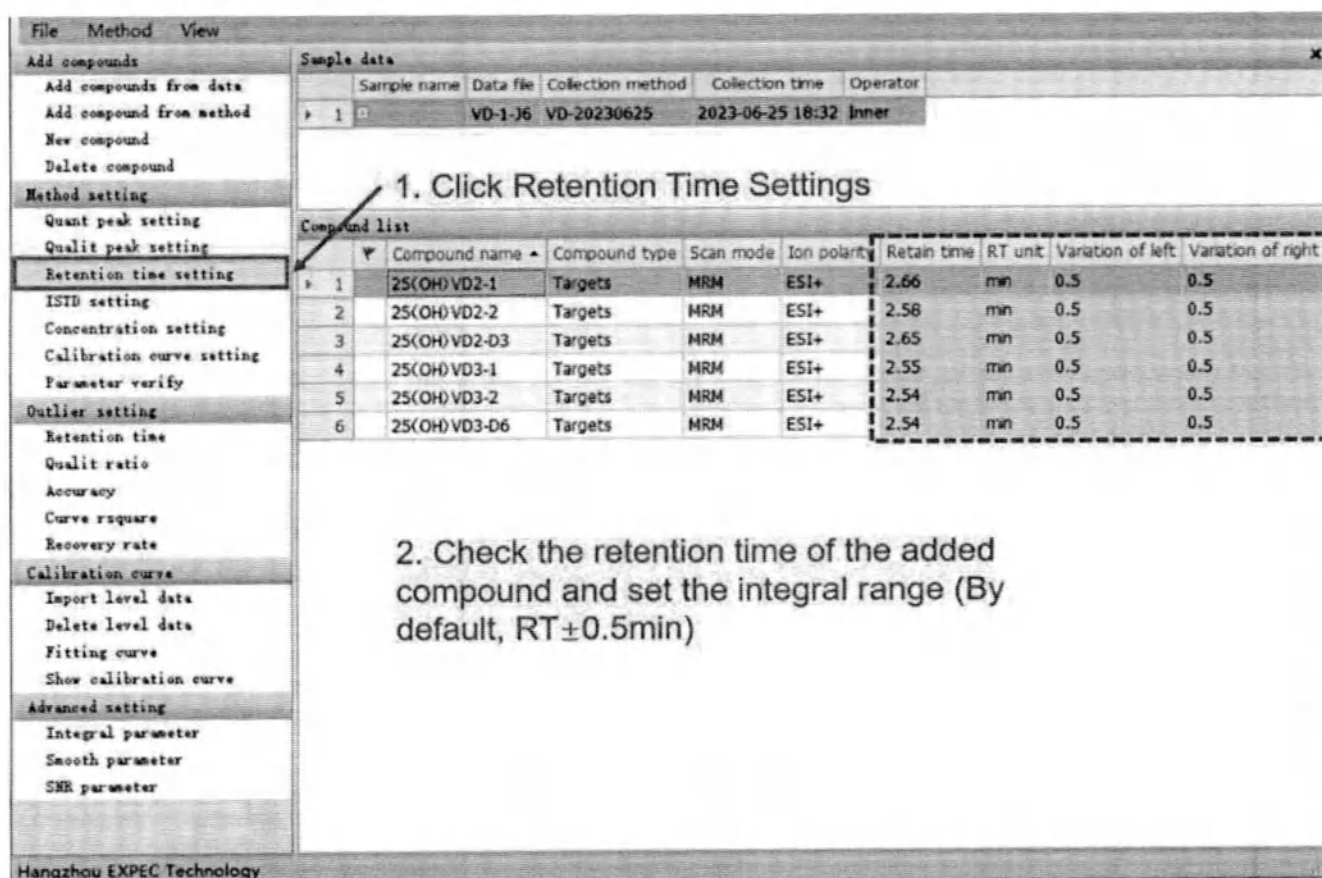


Рисунок 5.56. Интерфейс настройки времени удержания (метод внешнего стандарта).

ДЛЯ РИСУНКА 5.56.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type-Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity – ESI+	Поларность ионов – ESI+
Retain time	Время удержания
RT unit – min	Единицы времени удержания – минуты
Variation of left	Вариация слева
Variation of right	Вариация справа
1. Click retention time settings	1. Нажать «Настройки времени удержания»
2. Check the retention time of the added compound and set the integral range (By default, RT ± 0.5 min)	2. Проверить время удержания добавляемого химического соединения и установить интегральный диапазон (По умолчанию, время удержания ± 0,5 мин)

- 7) Так как в примере не используется внутренний стандарт, то нет необходимости нажимать ISTD setting («Настройка внутреннего стандарта»);
- 8) Нажмите Method setting («Настройка метода»), выберите Concentration setting («Настройка концентрации»), сначала введите самую высокую концентрацию соединения на калибровочной кривой при самой высокой концентрации при разбавлении, а затем введите коэффициент разбавления для каждого уровня концентрации от высокого до низкого в столбце режима разбавления. Коэффициент разбавления представляет собой отношение концентрации предыдущего уровня к концентрации следующего уровня (равен 1 для самого высокого уровня).

В этом примере 16 сульфонамидных соединений имеют 6 уровней концентрации, и конкретные концентрации основного соединения на каждом уровне составляют 1 мкг/л, 2 мкг/л, 5 мкг/л, 10 мкг/л, 20 мкг/л, 50 мкг/л и 100 мкг/л. Поэтому введите 100 при самой высокой концентрации при разбавлении и введите 1:2:2,5:2:2,5:2 для режима разбавления. Далее выберите единицу концентрации и множитель. Коэффициент умножения представляет собой фактический коэффициент преобразования концентрации после предварительной обработки, а конечная концентрация в таблице серии = расчетная концентрация × коэффициент умножения, как показано на рисунке 5.57.

1. Click Concentration Setting

2. Input the highest concentration of this compound in the calibration curve

3. Input Dilution mode

Compound name	Compound type	Scan mode	Ion polarity	Maximum dilution concentration	Dilution mode	Concentration unit	Product factor
25(OH)VD2-1	Targets	MRM	ESI+	100	1:2:5:2:2:5:2	ng/mL	1
25(OH)VD2-2	Targets	MRM	ESI+	100	1:2:5:2:2:5:2	ng/mL	1
25(OH)VD3-1	Targets	MRM	ESI+	100	1:2:5:2:2:5:2	ng/mL	1
25(OH)VD3-2	Targets	MRM	ESI+	100	1:2:5:2:2:5:2	ng/mL	1

Concentration	Dilution mode
100	1
50	2
10	5
5	2
2	2.5
1	2

4. Product factor
The product factor is the conversion coefficient of the actual concentration after pretreatment, and the final concentration in the batch treatment table = calculated concentration * product factor.

Dilution mode: 1:2:5:2:2:5:2

Рисунок 5.57. Интерфейс метода настройки концентрации (метод внешнего стандарта, метод 1).

ДЛЯ РИСУНКА 5.57.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора

ДЛЯ РИСУНКА 5.57.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type-Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Maximum dilution concentration	Максимальная концентрация разбавления
Dilution mode	Режим разбавления
Concentration unit, ng/ml	Единицы концентрации, нг/мл
Product factor	Коэффициент умножения
1. Click Concentration setting	1. Нажмите «Настройка концентрации»
2. Input the highest concentration of this compound in the calibration curve	2. Введите самую высокую концентрацию этого химического вещества в калибровочной кривой
3. Input Dilution mode The dilution ratio is the ratio of the previous concentration level to the next concentration level (the highest level is 1)	3. Режим Ввод разбавления Отношение разбавления – отношение предыдущего уровня концентрации к следующему уровню концентрации (самый высокий уровень 1)
Concentration level	Уровень концентрации
Dilution level	Уровень разбавления
4. Product factor The product factor is the conversion coefficient of the actual concentration after pretreatment, and the final concentration in the batch treatment table = calculated concentration × product factor	4. Коэффициент умножения Коэффициент умножения – коэффициент преобразования фактической концентрации после предварительной обработки, и конечная концентрация в таблице обработки серии = расчетная концентрация × коэффициент умножения

Есть еще один способ определить концентрацию: сделайте двойной щелчок по значку  непосредственно в столбце режима разбавления Dilution mode («Режим разбавления»), введите концентрацию каждого уровня непосредственно от большего к меньшему во всплывающем окне, как показано на рисунке 5.58.

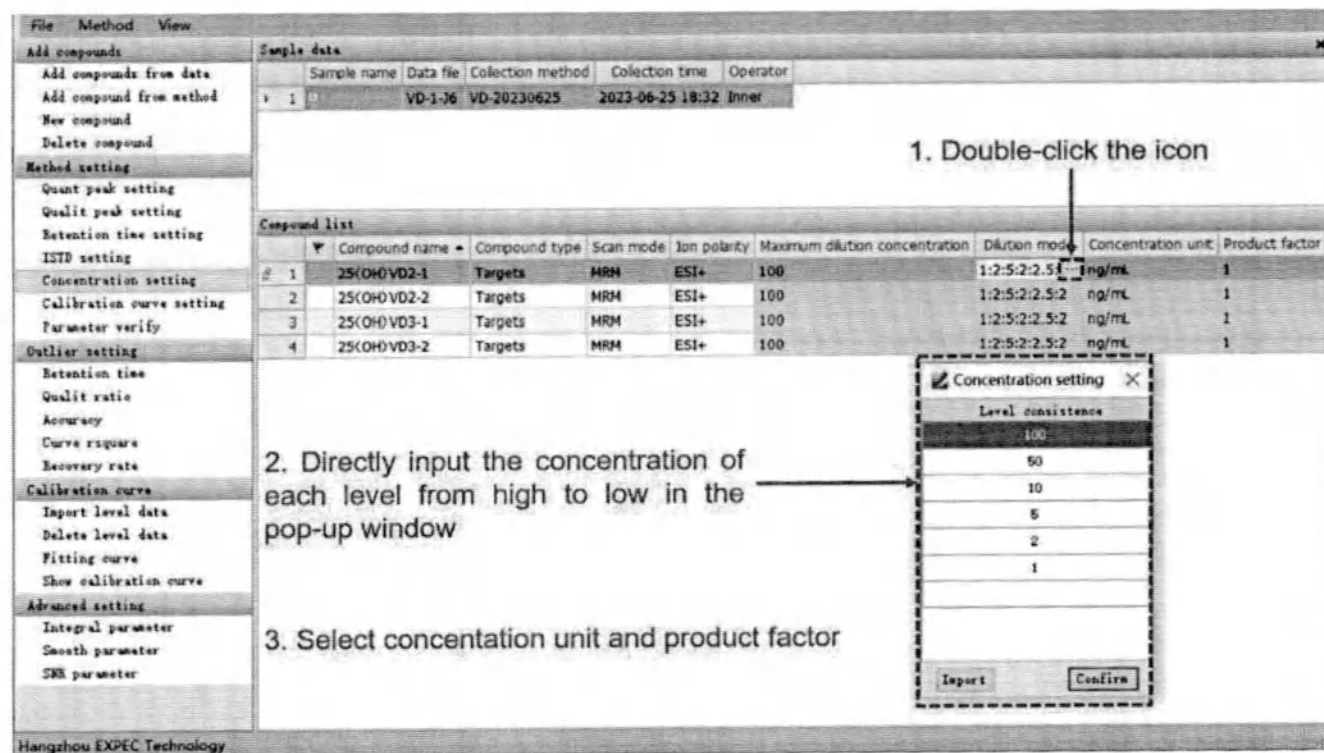


Рисунок 5.58. Интерфейс метода настройки концентрации (метод внешнего стандарта, метод 2).

ДЛЯ РИСУНКА 5.58.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Maximum dilution concentration	Максимальная концентрация разбавления
Dilution mode	Режим разбавления
Concentration unit, ng/ml	Единицы концентрации, нг/мл
Product factor	Коэффициент умножения
Concentration setting	Настройка концентрации
Level consistence	Последовательность уровня
Import	Импортировать
Confirm	Подтвердить
1. Double-click the icon	1. Нажмите «Настройка концентрации»
2. Directly input the concentration of each level from high to low in the pop-up window	2. Прямо введите концентрацию каждого уровня от высокого до низкого во всплывающем окне
3. Select concentration unit and product factor	3. Выберите единицу концентрации и коэффициент разбавления

- 9) Нажмите Method setting («Настройка метода»), выберите Calibration curve setting («Калибровочная кривая»), далее выберите тип аппроксимации (линейная, квадратичная или третья степень), настройки исходной точки аппроксимации (игнорировать, принудительно, содержать и пустое смещение) и тип массы, как показано на рисунке 5.59.

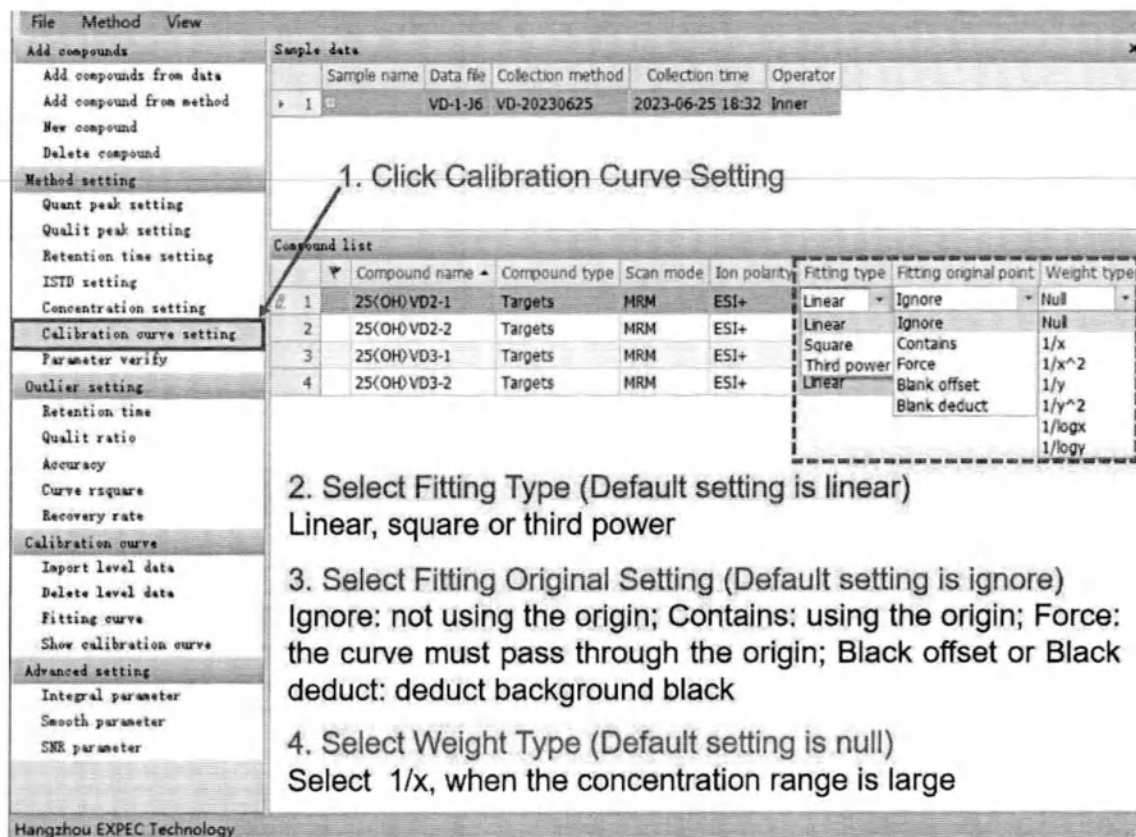


Рисунок 5.59. Интерфейс настройки калибровочной кривой (метод внешнего стандарта).

ДЛЯ РИСУНКА 5.59.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования

ДЛЯ РИСУНКА 5.59.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Fitting type	Тип аппроксимации
Linear	Линейный
Square	Квадратный
Third power	Третья степень
Fitting original point	Аппроксимация первоначальной точки
Ignore	Игнорировать
Contains	Содержит
Force	Принудительно
Blank offset	Сдвиг бланка
Blank deduct	Вычет бланка
Weight type	Тип массы
Null	Ноль
1. Click Calibration Curve Setting	1. Нажать «Настройка калибровочной кривой»
2. Select Fitting Type (Default setting is linear). Linear, square or third power	2. Выбрать «Тип аппроксимации» (По умолчанию задана настройка «линейная»). Линейная, квадратичная или третья степень
3. Select Fitting Original Setting (Default setting is ignore). Ignore: not using the origin; Contains: using the origin; Force: the curve must pass through the origin; Blank offset or Blank deduct: deduct background blank	3. Выбрать «Аппроксимация первоначальной настройки» (По умолчанию задана настройка «Игнорировать»). Игнорировать: не использовать источник; Принудительно: использовать источник; Сдвиг бланка или Вычет бланка: вычесть фон бланка
4. Select Weight Type (Default setting is null). Select 1/x, when the concentration range is large	4. Выбрать «Тип массы» (По умолчанию задана настройка «Ноль»): Выбрать 1/x, когда диапазон концентрации большой

10) Нажмите Parameter verify («Проверка параметров»), чтобы проверить количественный метод. Если параметры верны, появится следующее диалоговое окно, как показано на рисунке 5.60.

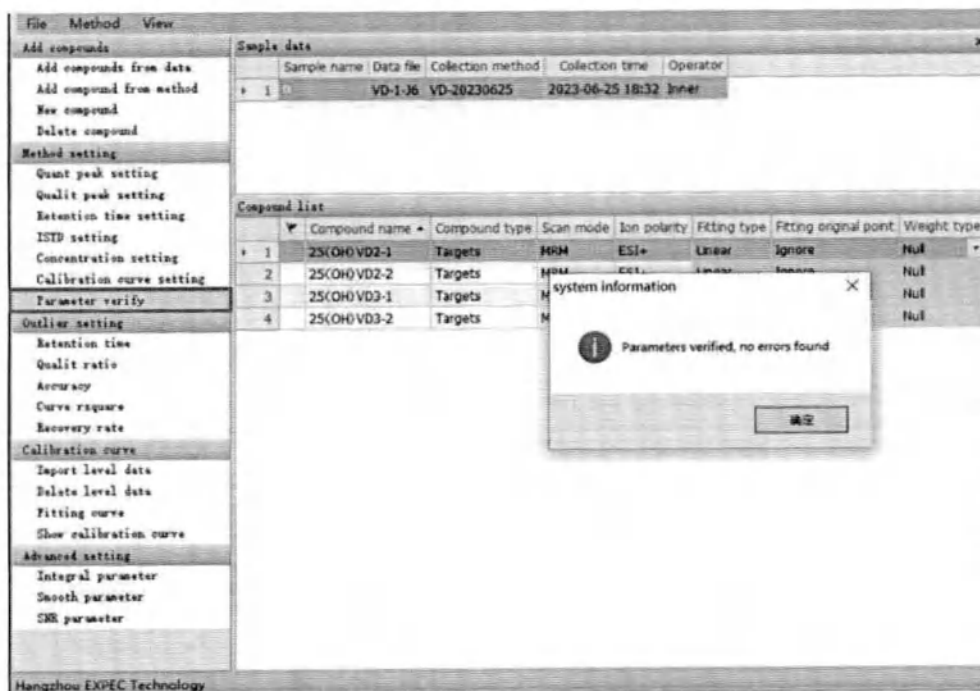


Рисунок 5.60. Интерфейс проверки параметров (метод внешнего стандарта).

ДЛЯ РИСУНКА 5.60.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Fitting type	Тип аппроксимации
Linear	Линейный
Ignore	Игнорировать
Weight type	Тип массы
Null	Ноль
Parameters verified, no errors found	Параметры проверены, ошибки не найдены

11) Параметры выброса

Выброс – отклонение фактического значения от ожидаемого (или теоретического) значения. Установка этого параметра позволяет отслеживать количественные результаты и помогает быстро отфильтровывать подозрительные данные. Параметры, включенные по умолчанию для выбросов: время удержания, качественное соотношение выбросов, отклонение точности от нормы, аппроксимация калибровочной кривой (R^2) и коэффициент извлечения. Например, если значение выброса времени удержания установлено на 20%, а для соединения установлено время удержания 10,00 мин, фактический диапазон ошибок времени удержания соединения, разрешенный программным процессом поиска пиков, составит от 8 мин до 12 мин, то есть если время удержания пика соединения станет менее 8,0 мин или более 12,0 мин, программное обеспечение сообщит об ошибке:

1. Установка времени удержания

Окно Retention Time («Времени удержания»): введите допустимый диапазон отклонения времени удержания. По умолчанию значение равно 20(%).

Единица Retention Time («Времени удержания»): установите единицу времени удержания (минуты или проценты). По умолчанию указаны проценты (рисунок 5.61.).

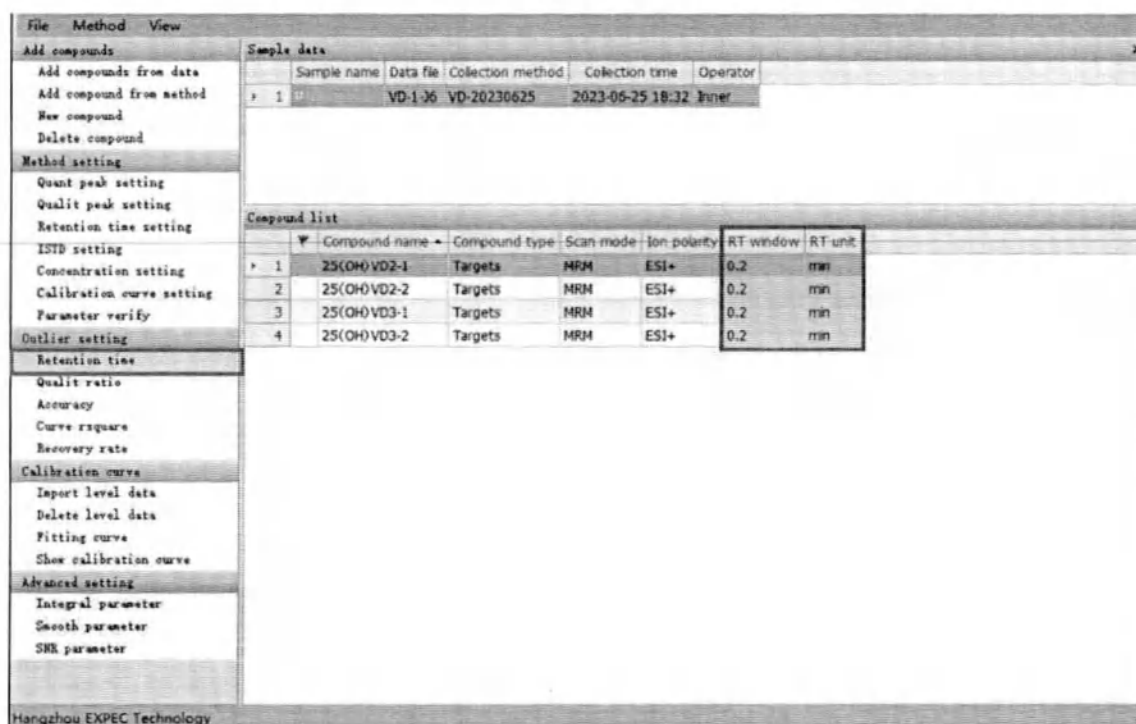


Рисунок 5.61. Настройки времени удержания.

ДЛЯ РИСУНКА 5.61.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора

ДЛЯ РИСУНКА 5.61.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
RT window	Окно времени удержания
RT unit	Единицы времени удержания
min	мин

2. Качественное соотношение выбросов

Неопределенность – допустимый диапазон отклонений качественного соотношения. По умолчанию значение составляет 20%. Тип неопределенности: относительное или абсолютное значение. По умолчанию тип неопределенности установлен как относительное значение, как показано на рисунке 5.62.

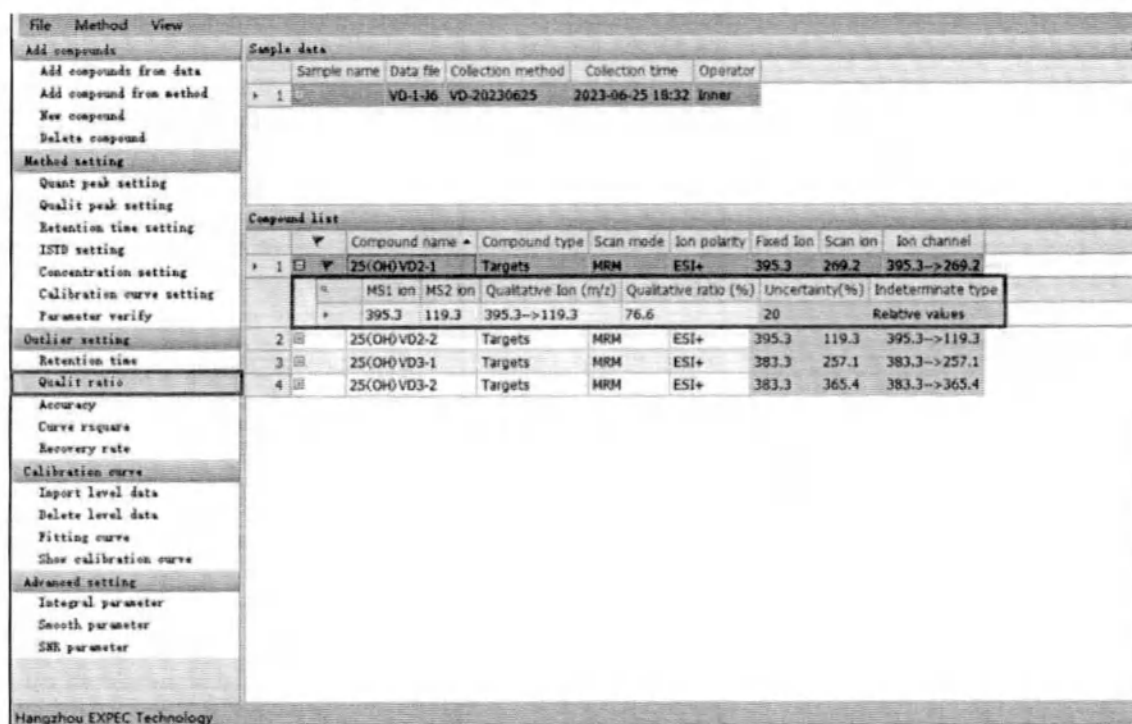


Рисунок 5.62. Настройки качественного соотношения.

ДЛЯ РИСУНКА 5.62.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность

ДЛЯ РИСУНКА 5.62.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Fixed ion	Фиксированный ион
Scan ion	Сканируемый ион
Ion channel	Канал ионов
Qualitative ion (m/z)	Количественные ионы (масса/заряд)
Qualitative ratio (%)	Количественное соотношение (%)
Uncertainty (%)	Неопределенность (%)
Indeterminate type	Неопределенный тип
Relative values	Относительные значения

3. Отклонения точности от нормы

Точность – отношение расчетной концентрации к ожидаемой концентрации. По умолчанию значение составляет 20%.

Точность максимального процентного отклонения – допустимый диапазон процентного отклонения расчетного значения концентрации. По умолчанию значение равно 1,0.

Множитель точности (Product factor of LOD accuracy) регулирует допустимое отклонение самого низкого уровня концентрации на калибровочной кривой, поскольку точность на самом низком уровне калибровочной кривой чаще всего низкая, поэтому расчетная концентрация может составлять только от 40% до 60% от ожидаемой концентрации. В связи с этим необходимо ослабить допустимую погрешность точности низшей точки. Если множитель точности указан как 2,0, а отклонение установлено на 20%, то допустимое отклонение для самого низкого уровня концентрации составит 40% (рисунок 5.63.).

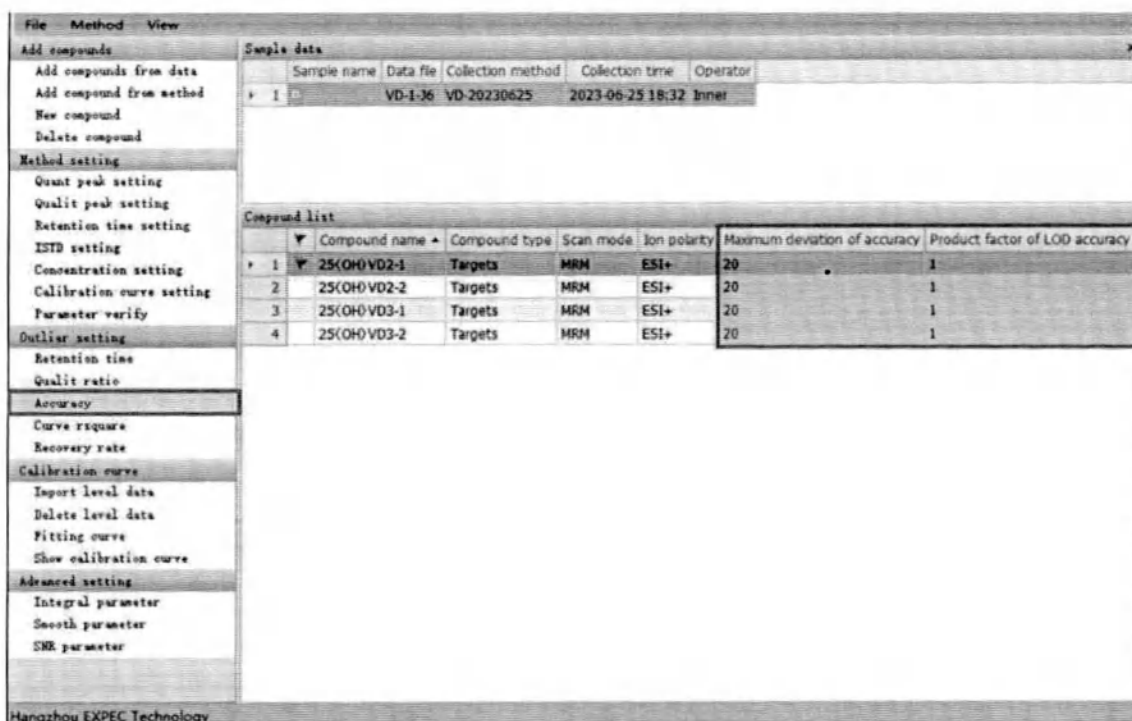


Рисунок 5.63. Настройки точности.

ДЛЯ РИСУНКА 5.63.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня

ДЛЯ РИСУНКА 5.63.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Maximum deviation of accuracy	Максимальное отклонение точности
Product factor of LOD accuracy	Коэффициент умножения для точности линейного отклонения выбросов

4. Аппроксимация калибровочной кривой (R^2)

По умолчанию приемлемый минимум R^2 для калибровочной кривой составляет 0,99, как показано на рисунке 5.64.

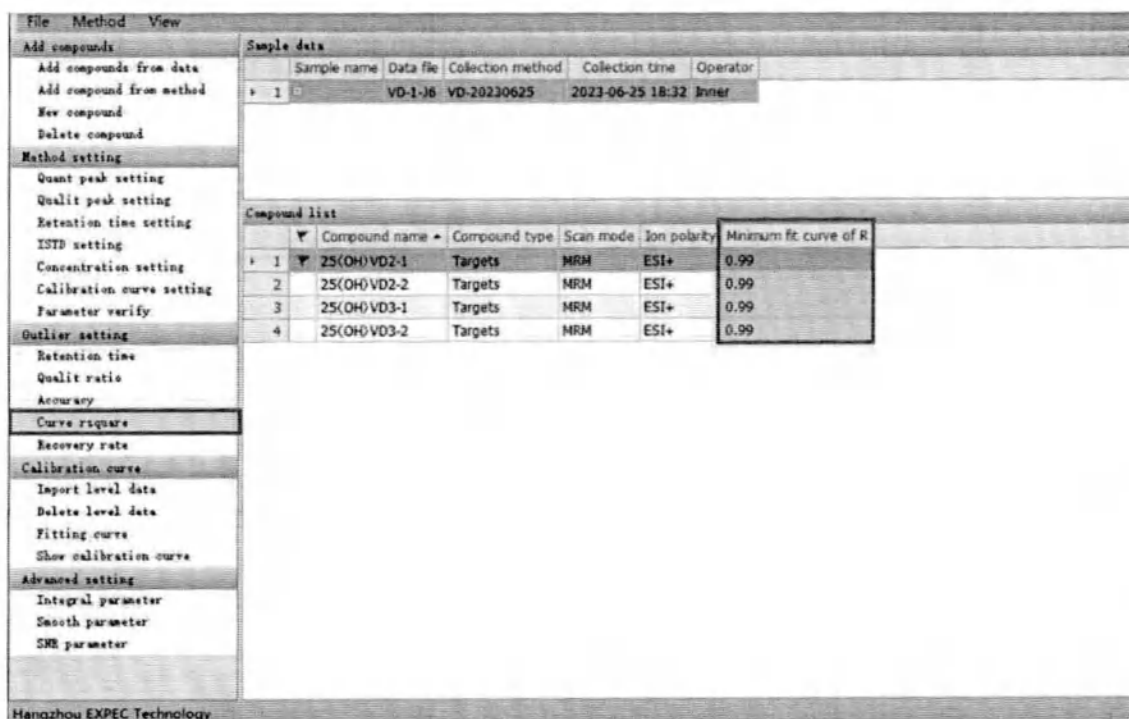


Рисунок 5.64. Настройки кривой R^2 .

ДЛЯ РИСУНКА 5.64.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика

ДЛЯ РИСУНКА 5.64.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Minimum fit curve of R	Кривая с минимальной аппроксимацией R

5. Коэффициент извлечения

Установите порог коэффициента извлечения (Limit of recovery rate) метода. Если значение коэффициента выйдет за верхний или нижний порог, то необходимо обратить внимание на точность метода. По умолчанию значение коэффициента составляет 80% для нижнего предела и 120% для верхнего предела, как показано на рисунке 5.65.

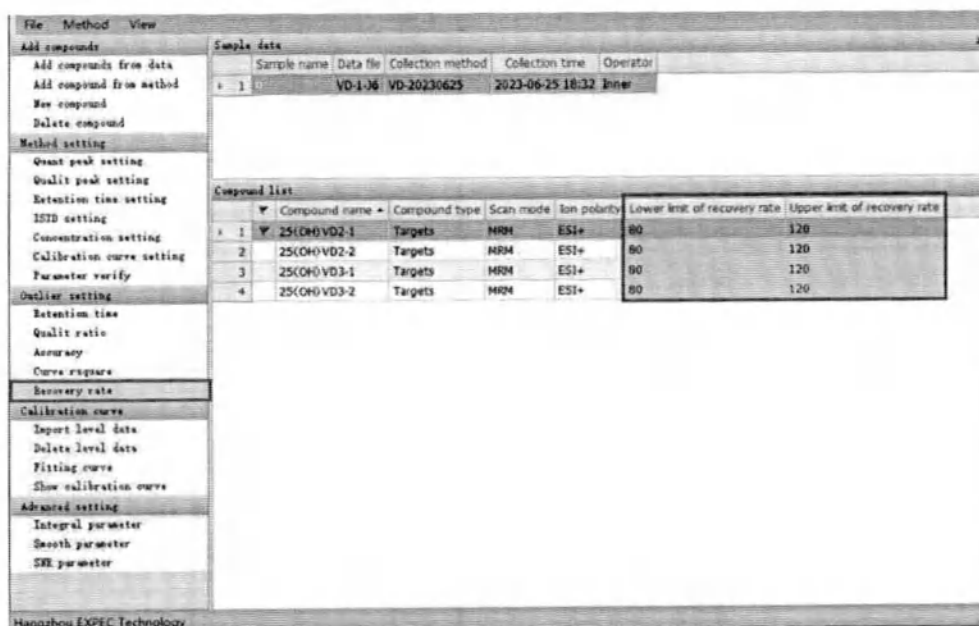


Рисунок 5.65. Параметры извлечения.

ДЛЯ РИСУНКА 5.65.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Lower limit of recovery rate	Нижний предел коэффициента извлечения
Upper limit of recovery rate	Верхний предел коэффициента извлечения

12) Расширенные настройки

1. Параметры интеграции

Установите параметр интеграции для количественного анализа, который является глобальной переменной (рисунок 5.66.).

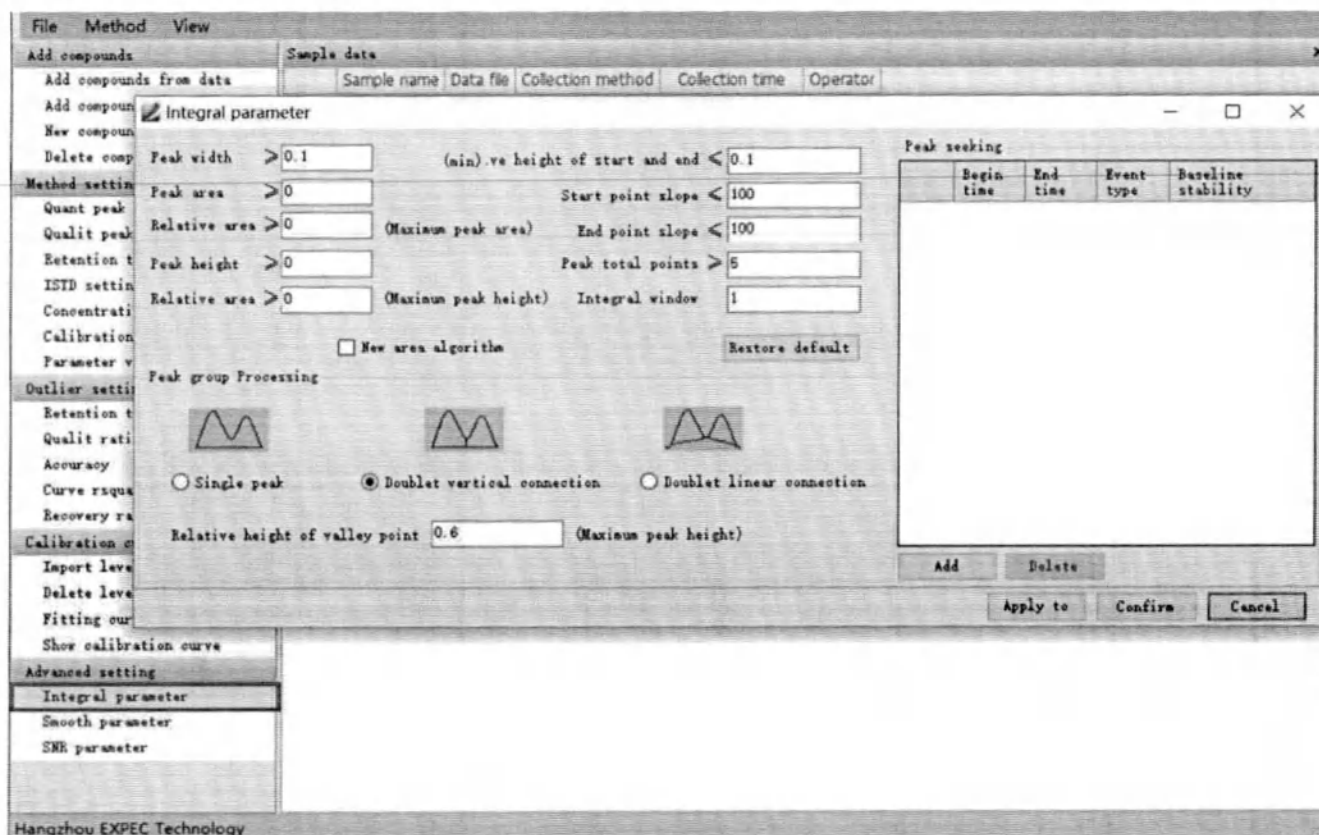


Рисунок 5.66. Интерфейс настройки интегральных параметров.

ДЛЯ РИСУНКА 5.66.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования

ДЛЯ РИСУНКА 5.66.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Integral parameter	Параметр интегрирования
Peak width (min) $\geq 0,1$	Ширина пика (мин) $\geq 0,1$
Peak area ≥ 0	Площадь пика ≥ 0
Relative area ≥ 0 (Maximum peak area)	Относительная площадь ≥ 0 (Максимальная площадь пика)
Peak height ≥ 0	Высота пика ≥ 0
Relative area ≥ 0 (Minimum peak height)	Относительная площадь ≥ 0 (Минимальная высота пика)
(min) height of start and end $\leq 0,1$	(минимальная) высота в начале и в конце $\leq 0,1$
Start point slope ≤ 100	Наклон в начальной точке ≤ 100
End point slope ≤ 100	Наклон в конечной точке ≤ 100
Peak total number ≥ 5	Общее количество пиков ≥ 5
Integral window 1	Окно интегрирования 1
New area algorithm	Новый алгоритм площади
Restore default	Восстановить заданное по умолчанию
Peak group processing	Обработка группы пиков
Single peak	Одиночный пик
Doublet vertical connection	Вертикальное соединение двойного пика
Doublet linear connection	Линейное соединение двойного пика
Relative height of valley point	Относительная высота точки минимума
Maximum peak height	Максимальная высота пика
Peak seeking	Поиск пика
Begin time	Время начала
End time	Время конца
Event type	Тип события
Baseline stability	Стабильность на исходном уровне
Add	Добавить
Delete	Удалить
Apply to	Обратиться к
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

2. Параметр сглаживания

Установите параметры сглаживания во время количественного анализа и автоматически сглаживайте хроматографические пики после их проверки (рисунок 5.67.).

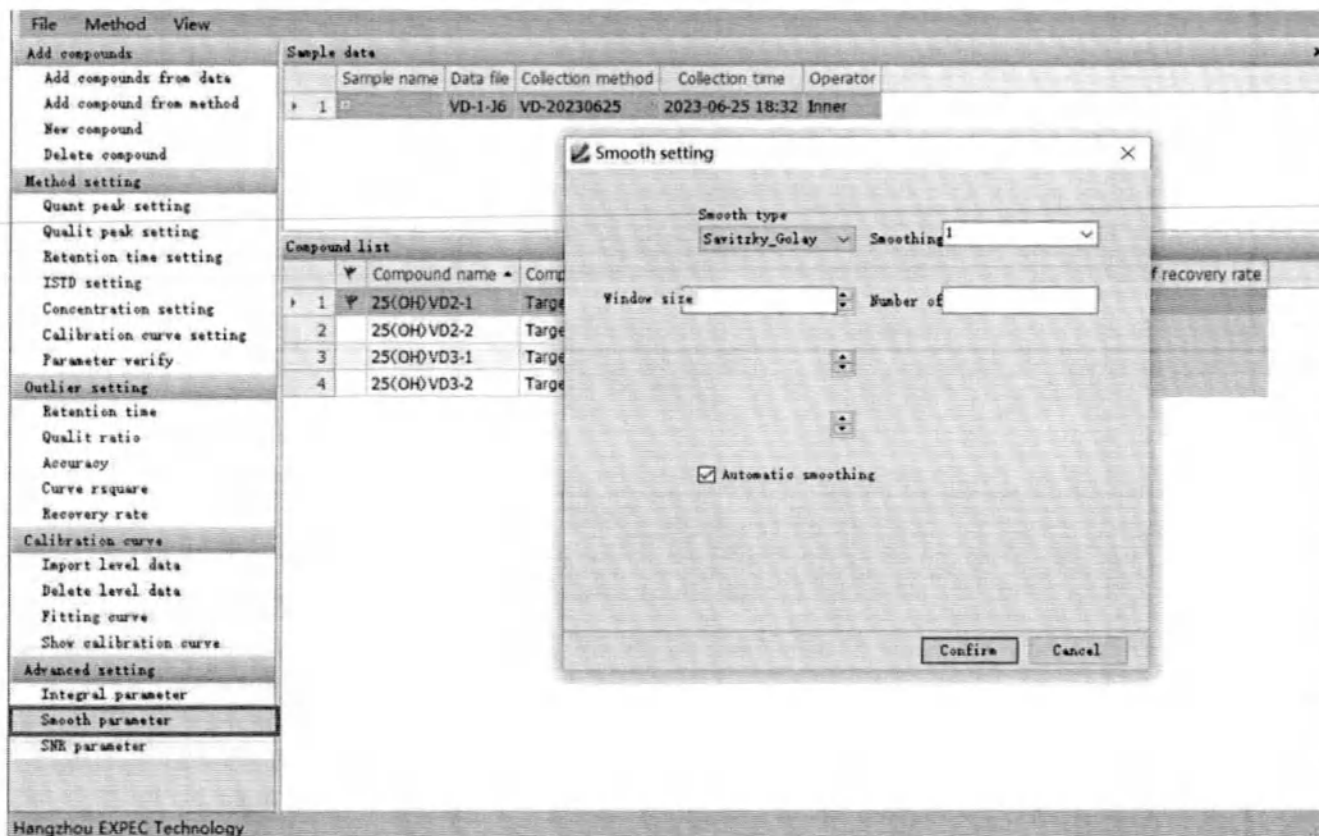


Рисунок 5.67. Интерфейс настройки параметров сглаживания.

ДЛЯ РИСУНКА 5.67.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания

ДЛЯ РИСУНКА 5.67.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity –ESI+	Полярность ионов – ESI+
Lower limit of recovery rate	Нижний предел коэффициента извлечения
Upper limit of recovery rate	Верхний предел коэффициента извлечения
Smooth setting	Настройка сглаживания
Smooth type – Savitsky Gelay	Тип сглаживания – Желе Савицкого
Smoothing 1	Сглаживание 1
Window size	Размер окна
Number of	Количество
Automatic smoothing	Автоматическое сглаживание
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

3. Параметр отношения сигнал/шум

Установите параметры отношения сигнал/шум для количественного анализа и автоматически рассчитайте отношение сигнал/шум для хроматографических пиков после их проверки (рисунок 5.68.).

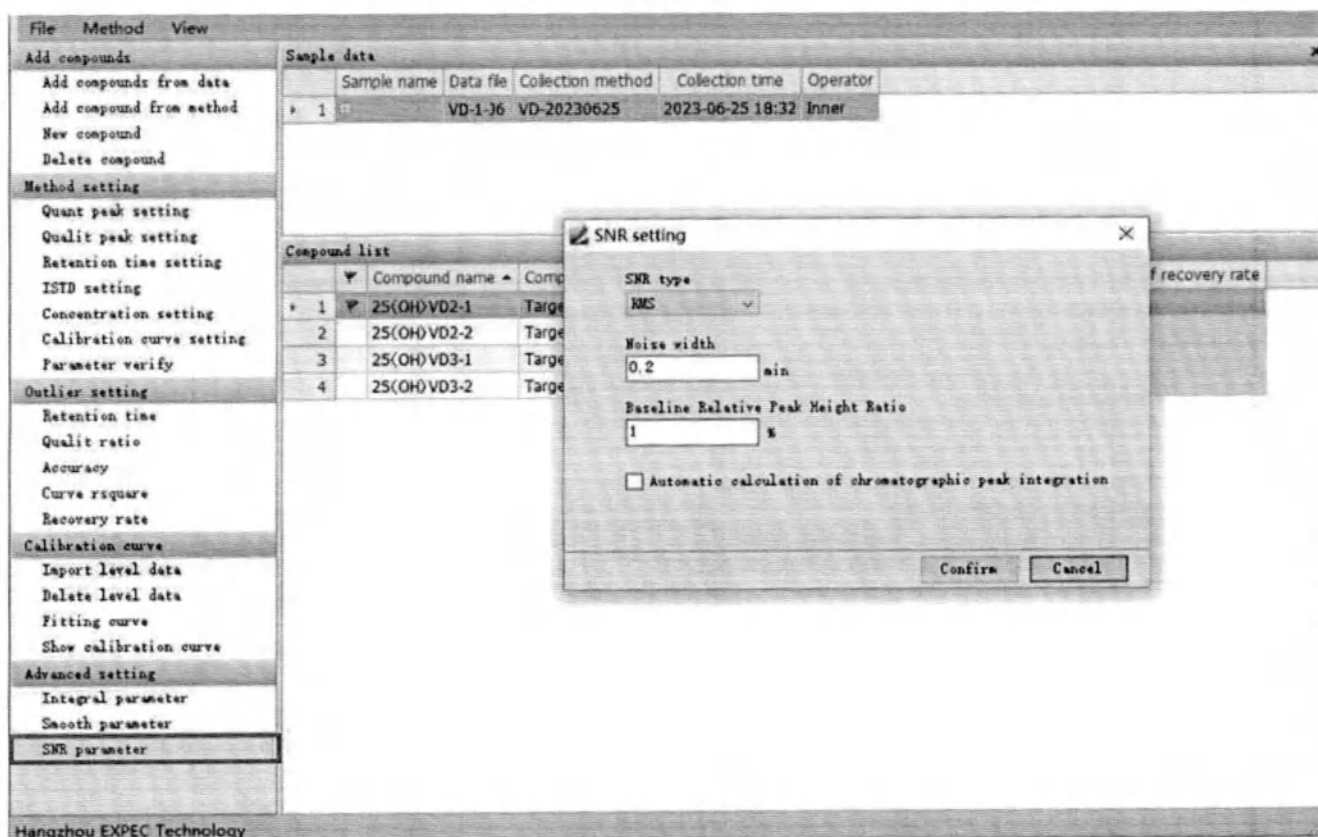


Рисунок 5.68. Интерфейс настройки параметра режима SNR.

ДЛЯ РИСУНКА 5.68.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения

ДЛЯ РИСУНКА 5.68.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Lower limit of recovery rate	Нижний предел коэффициента извлечения
Upper limit of recovery rate	Верхний предел коэффициента извлечения
SNR setting	Настройка SNR (отношения сигнал-шум)
RMS	Среднеквадратичное значение
Noise width – 0.2 min	Ширина шума – 0,2 мин
Baseline Relative Peak Height Ratio – 1	Соотношение относительной высоты пика к исходному уровню – 1
Automatic calculation of chromatographic peak integration	Автоматический расчет хроматографической интеграции пика
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

- 13) Дважды щелкните «Калибровочная кривая», выберите «Импортировать данные об уровне» на левой панели навигации, затем выберите данные калибровочного образца и импортируйте их, как показано на рисунке 5.69.

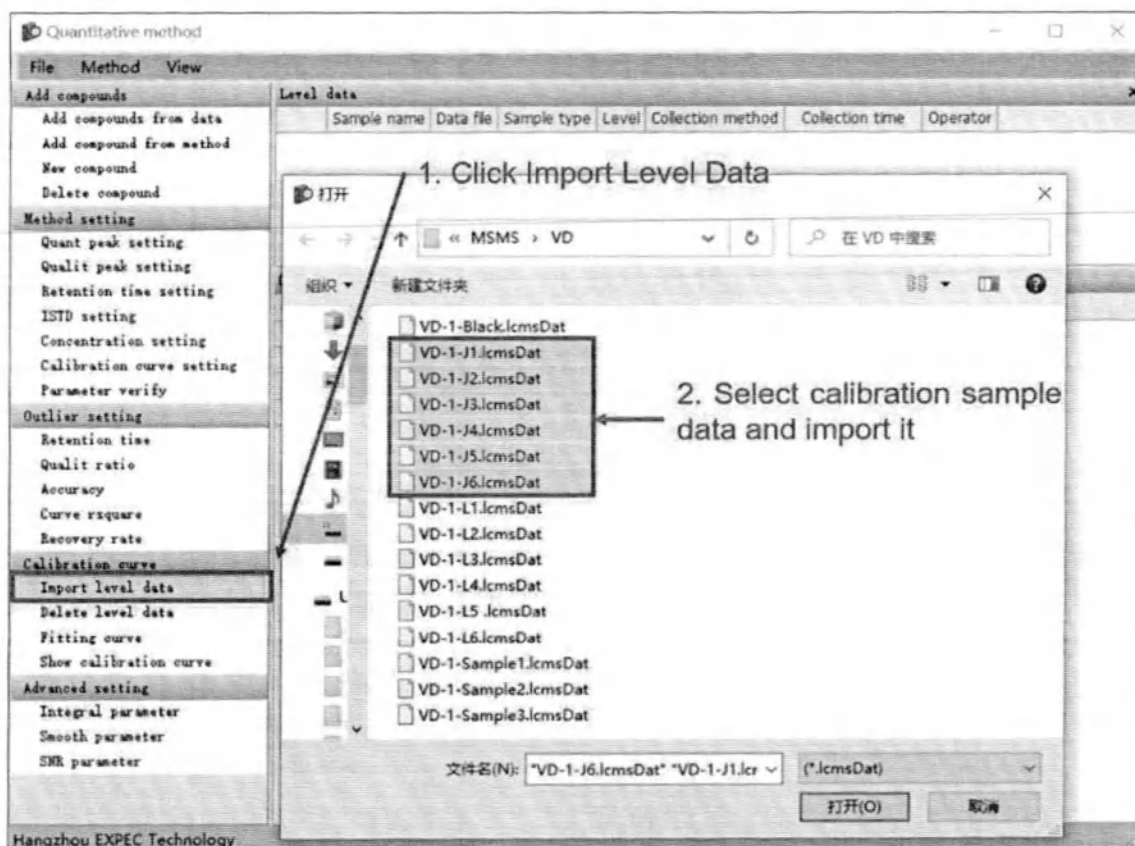


Рисунок 5.69. Интерфейс импорта данных уровня калибровочной кривой.

ДЛЯ РИСУНКА 5.69.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания

ДЛЯ РИСУНКА 5.69.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
1. Click Import Level Data	Нажмите кнопку «Импортировать данные»
2. Select calibration Sample data and import it	Выберите данные калибровочного образца и импортируйте их

- 14) Установите тип образца и уровень калибровки на странице данных уровня. Уровень концентрации холостой пробы равен 0, а уровень концентрации калибровочного образца является целым числом (1–n), увеличивающимся от 1. Чем ниже концентрация, тем меньше количество уровней. Наименьший калибровочный образец равен 1. Затем нажмите Fitting curve («Кривая аппроксимации»), после этого программа начнет аппроксимировать калибровочную кривую в соответствии с заданными параметрами метода (рисунок 5.70.).

1. Set the sample type and calibration level
The concentration level of Blank is 0, and the concentration levels of Calibrations are integers (1~n) increasing from 1.

2. Click Fitting Curve

Рисунок 5.70. Интерфейс настройки кривой аппроксимации (метод внешнего стандарта, общий вид).

ДЛЯ РИСУНКА 5.70.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика

ДЛЯ РИСУНКА 5.70.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
1. Set the sample type and calibration level. The concentration level of Blank is 0, and the concentration levels of Calibrations are integers (1–n) increasing from 1.	1. Выберите тип образца и уровень калибровки. Уровень концентрации бланка 0, а уровни концентрации калибровки – целые числа (от 1 до n), возрастающие от 1.
2. Click Fitting curve	2. Нажмите «Кривая аппроксимации»

- 15) Нажмите на опцию Show calibration curve («Показать калибровочную кривую») – справа отобразится список соединений, информация о соединении и окно калибровочной кривой. Щелчок по строке соединения расширит информацию о калибровке для данного соединения, показывая расчетную концентрацию, точность, качественное соотношение и относительный отклик для каждого уровня концентрации соединения. Поместите курсор на значок  – автоматически отобразится информация для этого соединения (рисунок 5.71.).

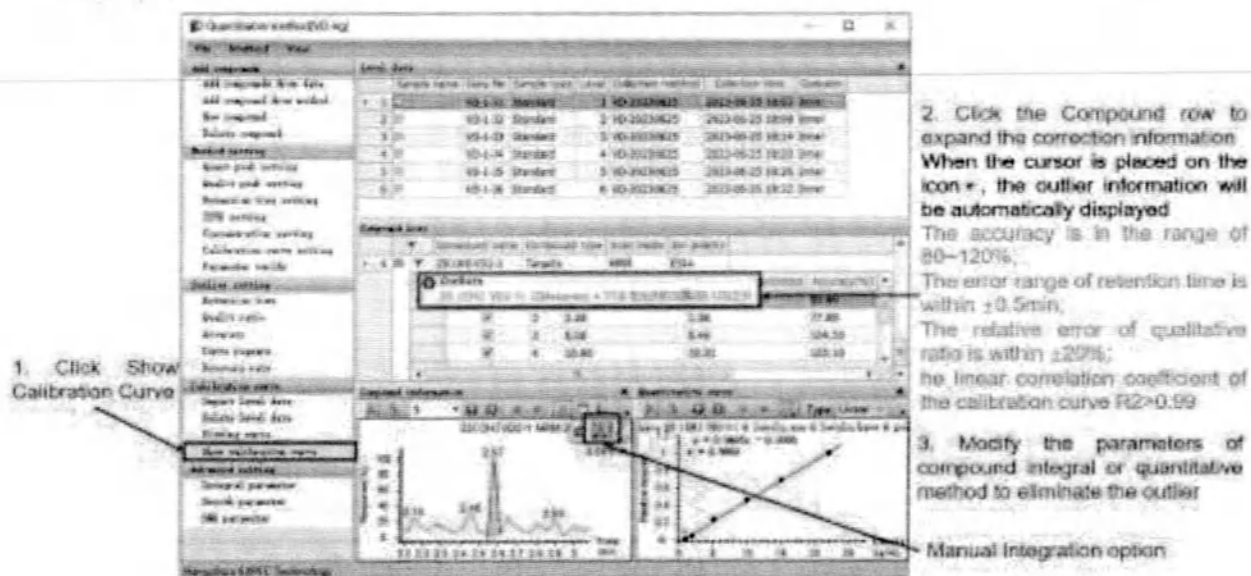


Рисунок 5.71. Интерфейс настройки кривой аппроксимации (метод внешнего стандарта, калибровочная кривая).

ДЛЯ РИСУНКА 5.71.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал–шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца

ДЛЯ РИСУНКА 5.71.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM (Мониторинг множественных реакций)
Ion polarity – ESI+	Пolarity ионов – ESI+
Concentration	Концентрация
Accuracy (%)	Точность (%)
Outliers	Выбросы
Compound information	Информация о химическом соединении
Response (%)	Ответ (%)
Time, min	Время, мин
Quantitative curve	Количественная кривая
Type: Linear	Тип: линейный
Have 25 (OH) VD2-1: 6 levels, use 6 levels,	Есть 25 (OH) VD2-1: 6 уровней, используются 6 уровней,
Concentration, ng/ml	Концентрация, нг/мл
1. Click Show Calibration Curve	1. Нажмите «Показать калибровочную кривую»
2. Click the Compound row to expand the correction information. When the cursor is placed on the icon (), the outlier information will be automatically displayed. The accuracy is in the range 80–120%, The error range of retention time is within ± 0.5 min; The relative error of qualitative ratio is within $\pm 20\%$; The linear correlation coefficient of the calibration curve $R^2 > 0.99$.	2. Нажмите на строку «Химическое соединение», чтобы расширить информацию о корректировке. Когда курсор помещен на пиктограмму (), будет автоматически отображаться информация о выбросе. Точность находится в диапазоне 80–120%, Диапазон погрешности времени удержания в пределах ± 0.5 минут; Относительная погрешность качественного соотношения в пределах $\pm 20\%$; Коэффициент линейной корреляции калибровочной кривой $R^2 > 0.99$.
3. Modify the parameters of compound integral or quantitative method to eliminate the outlier.	3. Модифицируйте параметры интегрального или количественного метода для химического соединения, чтобы устранить выброс.
Manual integration option	Опция интегрирования в ручном режиме

Допустимые значения параметров выброса чаще всего варьируются в *следующих* диапазонах:

- ✓ Допустимый диапазон отклонения времени удержания находится в пределах $\pm 0,5$ мин (по умолчанию – 20%);
- ✓ Относительная погрешность качественного соотношения находится в пределах $\pm 20\%$ (по умолчанию тип неопределенности установлен как относительное значение);
- ✓ Точность находится в диапазоне от 80% до 120%, точка минимальной концентрации может быть снижена до 40%;
- ✓ По умолчанию приемлемый минимум R^2 для калибровочной кривой составляет 0,99;
- ✓ По умолчанию значение коэффициент извлечения составляет 80% для нижнего предела и 120% для верхнего предела.

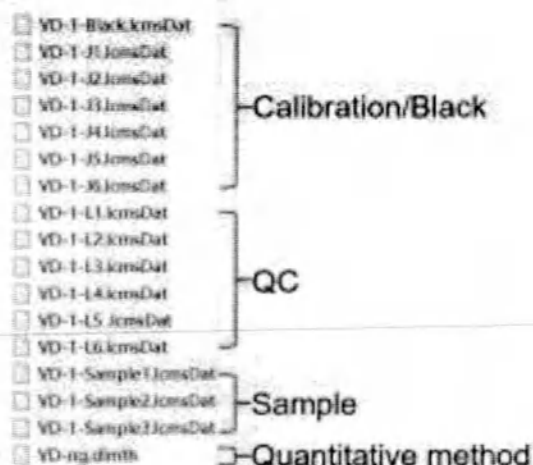
Выбросы, которые можно устранить, изменив параметры интегрирования соединений или метода количественного анализа, не отображаются. Если аномальные выбросы вызваны ошибками интеграции программного обеспечения, то можно вручную интегрировать хроматографические пики соединения с помощью параметра «Интеграция вручную» в окне «Информация о соединении» или улучшить результаты интеграции, изменив параметры интеграции и сглаживания в дополнительных настройках.

Когда все соединения исчезнут, калибровочную кривую можно применять для анализа серии образцов, щелкнув «Настройка метода количественного анализа».

Нажмите на иконку  («Сохранить»), чтобы сохранить количественный метод и закройте окно. После вышеуказанных шагов будет настроен полный количественный метод внешнего стандарта.

5.11.2.2. Метод внутреннего стандарта

Данные количественного анализа методом внутреннего стандарта содержат калибровочные образцы/пробы для 2 перфторированных соединений (M4-PFOA и M4-PFOS) и соответствующие внутренние стандарты (M4-PFOA и M4-PFOS). Количественный анализ, каталог данных выглядит, как показано на рисунке 5.72:



ДЛЯ РИСУНКА 5.72.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Calibration/Black	Калибровка/Черный
QC	Контроль качества
Sample	Образец
Quantitative method	Количественный метод

Рисунок 5.72. Интерфейс данных (пример).

Шаги количественного определения методом внутреннего стандарта аналогичны количественному определению методом внешнего стандарта, но требуется дополнительный шаг – настройка внутреннего стандарта.

1) В интерфейсе настройки количественного метода нажмите Add compounds from data («Добавить соединение из данных»), чтобы импортировать полученные данные MRM PFC-200ppb.lcmsDat

Рекомендуется выбрать репрезентативный спектр и данные образца с более высокой концентрацией, чтобы время удержания и качественное соотношение были более точными (рисунок 5.73.).

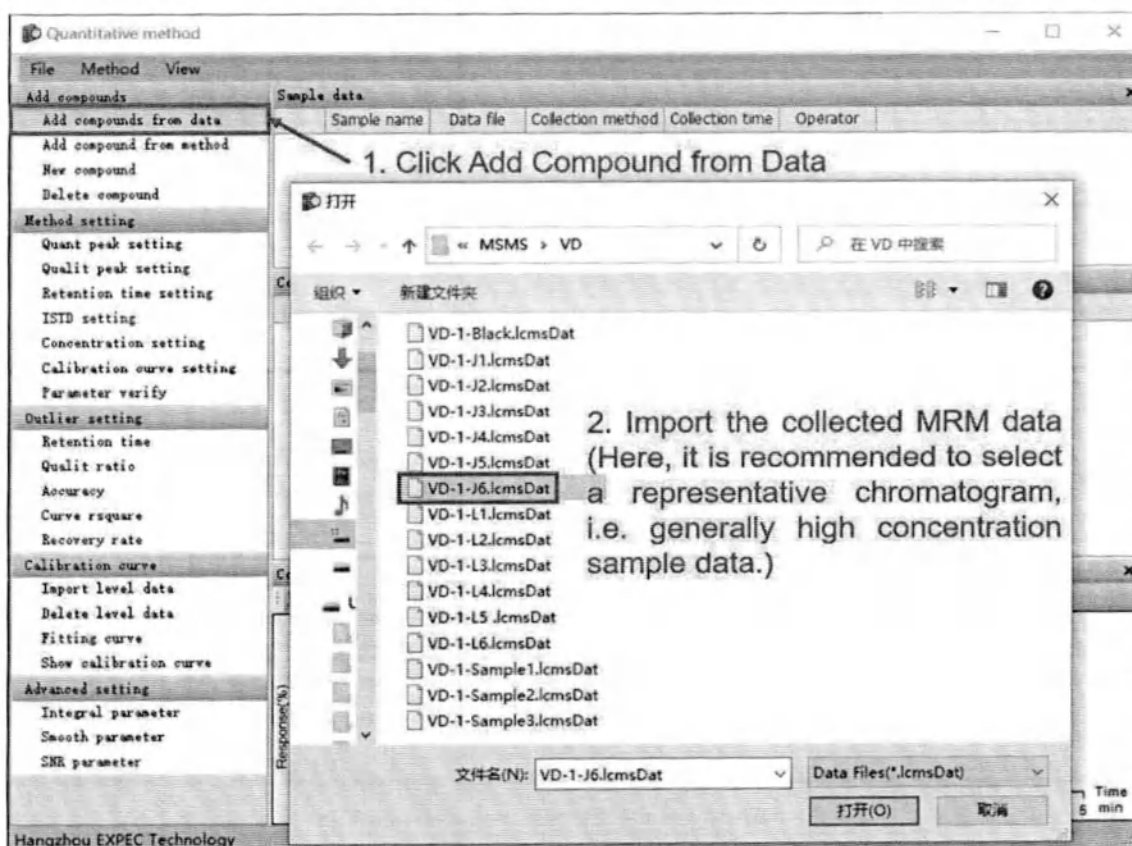


Рисунок 5.73. Интерфейс импорта данных.

ДЛЯ РИСУНКА 5.73.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид

ДЛЯ РИСУНКА 5.73.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
1. Click Add Compound from Data	1. Нажмите «Добавить химические соединения из данных»
2. Import the collected MRM data. (Here, it is recommended to select a representative chromatogram, i.e. generally high concentration sample data)	2. Импортируйте полученные данные MRM. (Здесь рекомендуется выбрать представительную хроматограмму, то есть, как правило, данные образца с высокой концентрацией)
Data files	Файлы данных

- 2) После импорта данных в нижней части интерфейса появится окно информации об образце, и будет отображаться хроматограмма ТИС образца. Выбрав левой кнопкой мыши диапазон времени, содержащий анализируемое соединение, позволит «Добавить Соединение» в контекстном меню. Соединение будет добавлено в список соединений, как показано на рисунке 5.74.

ДЛЯ РИСУНКА 5.74.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Compound type	Тип химического соединения
Scan mode	Режим сканирования
Ion polarity	Полярность ионов
Sample information	Информация об образце
cps	импульсов в секунду
min	мин
Compound information	Информация о химическом соединении
Response (%)	Отклик (%)
Time, min	Время, мин
1. Select a time range containing the compounds	1. Выбрать диапазон времени, содержащий химические соединения
2. Select Add Compound from the right-click menu	2. Выбрать «Добавить химическое соединение» из меню, выводимого правой кнопкой мыши
Restore the default proportion	Восстановить пропорцию, заданную по умолчанию
Restore the last proportion	Восстановить последнюю пропорцию
Copy the spectrogram	Копировать спектрограмму
Save the spectrogram	Сохранить спектр
Capture spectrum (Ctrl + X)	Захват спектра (Ctrl + X)
Print settings	Настройки печати
Print spectra	Печать спектров
Print preview	Печать предварительного просмотра
Spectrum settings	Настройки спектра
Add text	Добавить текст
Chart color	Цвет карты
Show grid	Показать сетку
Absolute intensity	Абсолютная интенсивность
The horizontal axis shows the number of points	Горизонтальная ось показывает количество точек
Show retention time	Показать Время удержания
Show chart information	Показать информацию карты
TIC walking	Цикл полного ионного тока
Average MS spectrum	Средний спектр масс-спектрометрии
SNR calculation	Расчет отношения SNR (отношение сигнал-шум)
Manual deduct background	Фон ручного вычета
Adjust retention time	Откорректировать время удержания
Add compound	Добавить химическое соединение
Add qualitative peak	Добавить качественный пик

- 3) Программное обеспечение автоматически создаст список соединений, чтобы проверить, есть ли какие-либо недостающие соединения, как показано на рисунке 5.75.

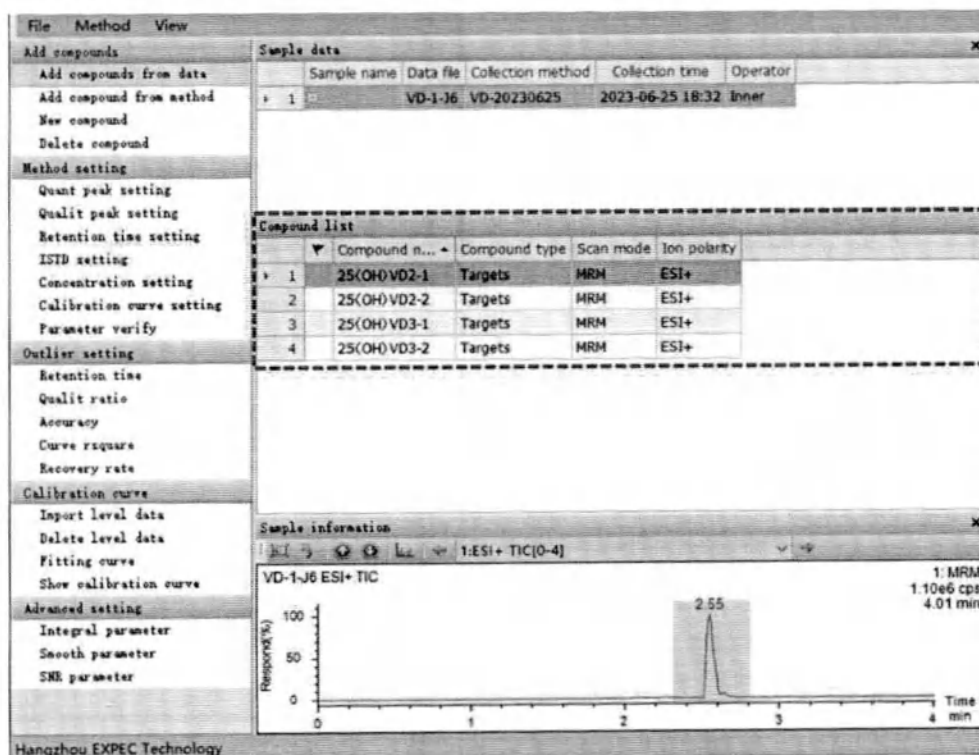


Рисунок 5.75. Интерфейс добавленного списка соединений (метод внутреннего стандарта).

ДЛЯ РИСУНКА 5.75.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Sample information	Информация об образце
cps	импульсов в секунду
min	мин
Compound information	Информация о химическом соединении
Response (%)	Отклик (%)
Time, min	Время, мин

- 4) Параметр Method setting («Настройка метода») на левой панели навигации выполняется сверху вниз. Нажмите Method setting («Настройка метода»), выберите Quant peak setting («Настройка количественного пика»), чтобы проверить правильность количества добавленных ионов соединения, используемых для его количественного определения. По умолчанию для количественного определения чаще всего выбирают ионную пару с более высокой интенсивностью каждого соединения, как показано на рисунке 5.76.

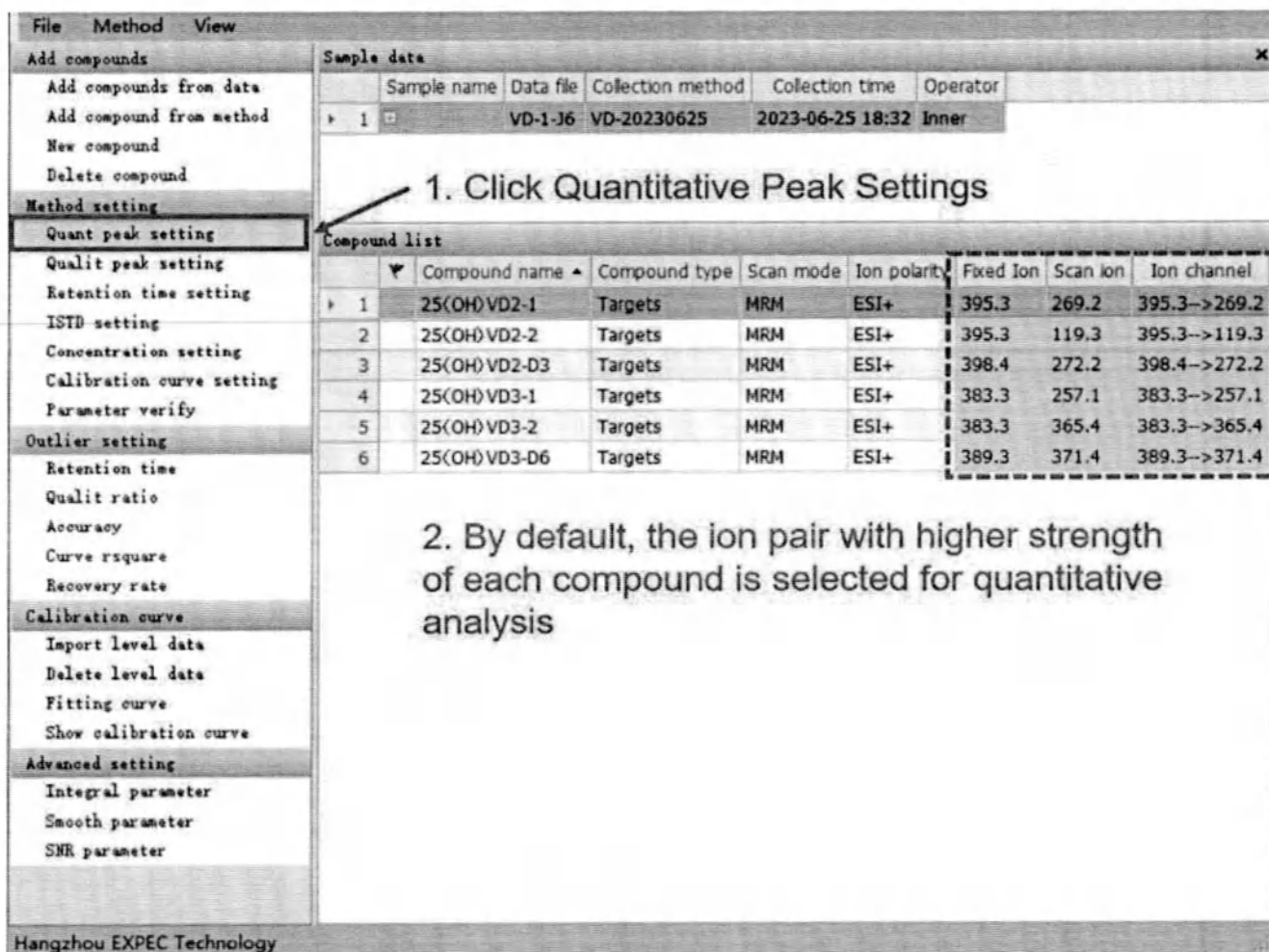


Рисунок 5.76. Интерфейс настройки пиков, используемых для количественного определения соединений (метод внутреннего стандарта).

ДЛЯ РИСУНКА 5.76.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка

ДЛЯ РИСУНКА 5.76.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Fixed ion	Фиксированные ионы
Scan ion	Сканируемые ионы
Ion channel	Канал ионов
1. Click Quantitative Peak Settings	1. Нажмите «Настройка количественного пика»
2. By default, the ion pair with higher strength of each compound is selected for quantitative analysis	2. По умолчанию, ионная пара с более высокой прочностью каждого химического соединения выбирается для количественного анализа

- 5) Нажмите Method setting («Настройка метода»), выберите Qualit peak setting («Настройка качественных пиков»), чтобы проверить правильность добавленных пиков соединения, используемых для его качественного определения. Параметры качественных пиков автоматически генерируются при добавлении соединений. По умолчанию для характеристики выбирается ионная пара с более низкой интенсивностью каждого соединения, как показано на рисунке 5.77.

1. Click Qualitative Peak Settings

Sample name	Data file	Collection method	Collection time	Operator
1	VD-1-J6	VD-20230625	2023-06-25 18:32	Inner

Compound name	Compound type	Scan mode	Ion polarity	Fixed Ion	Scan ion	Ion channel
25(OH)VD2-1	Targets	MRM	ESI+	395.3	269.2	395.3-->269.2
MS1 ion	MS2 ion	Qualitative Ion (m/z)	Qualitative ratio (%)			
395.3	119.3	395.3-->119.3	76.6			
25(OH)VD2-2	Targets	MRM	ESI+	395.3	119.3	395.3-->119.3
25(OH)VD2-D3	Targets	MRM	ESI+	398.4	272.2	398.4-->272.2
25(OH)VD3-1	Targets	MRM	ESI+	383.3	257.1	383.3-->257.1
25(OH)VD3-2	Targets	MRM	ESI+	383.3	365.4	383.3-->365.4
25(OH)VD3-D6	Targets	MRM	ESI+	389.3	371.4	389.3-->371.4

2. By default, the ion pair with weak strength of each compound is selected for qualitative analysis

Рисунок 5.77. Интерфейс настройки пиков, используемых для качественного определения соединений (метод внутреннего стандарта).

ДЛЯ РИСУНКА 5.77.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Fixed ion	Фиксированные ионы
Scan ion	Сканируемые ионы
Ion channel	Канал ионов
1.Click Qualitative Peak Settings	1.Нажмите «Настройка качественного пика»
2. By default, the ion pair with higher strength of each compound is selected for qualitative analysis	2. По умолчанию, ионная пара с более высокой прочностью каждого химического соединения выбирается для качественного анализа

- 6) Нажмите Method setting («Настройка метода»), выберите Retention time setting («Настройка времени удержания»), проверьте время удержания добавленного соединения и установите диапазон интегрирования. По умолчанию допустимый диапазон отклонения времени удержания находится в пределах $\pm 0,5$ мин, как показано на рисунке 5.78.

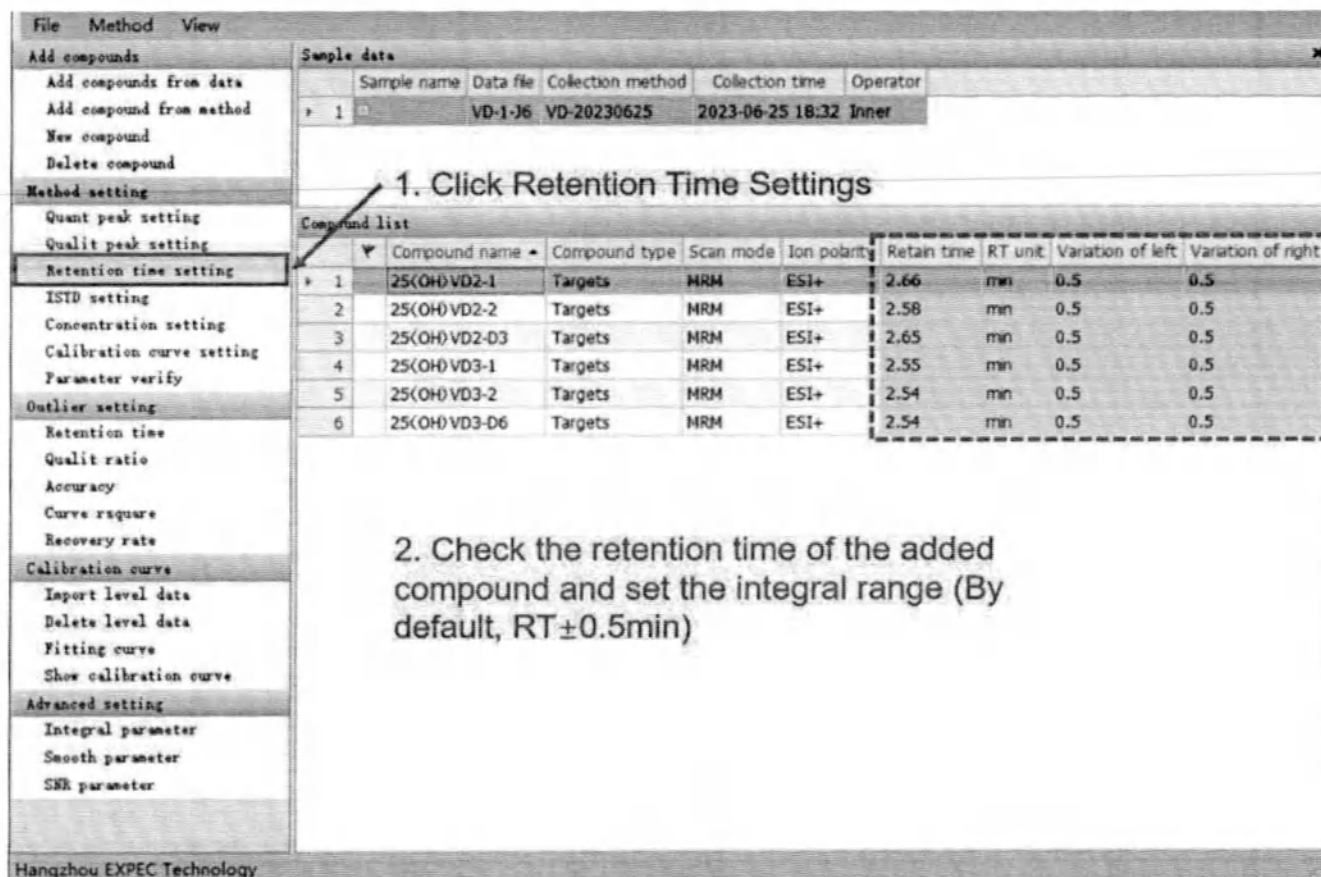


Рисунок 5.78. Интерфейс настройки времени удержания (метод внутреннего стандарта).

ДЛЯ РИСУНКА 5.78.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка

ДЛЯ РИСУНКА 5.78.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Retain time	Время удержания
RT unit	Единица времени удержания
Variation of left	Вариация слева
Variation of right	Вариация справа
1. Click Retention Time Settings	1. Нажмите «Настройка времени удержания»
2. Check the retention time of the added compound and set the integral range (By default, RT ± 0.5 min)	2. Проверьте время удержания добавленного химического соединения и установите интегральный диапазон (По умолчанию, время удержания ± 0,5 мин)

- 7) Нажмите Method setting («Настройка метода»), выберите ISTD setting («Настройка внутреннего стандарта»), сначала измените тип соединения, которое будет отмечено как внутренний стандарт (ISTD), затем установите галочку в столбце Use ISTD («Использовать внутренний стандарт») и укажите соединение внутреннего стандарта для каждого целевого соединения в раскрывающемся меню Name of ISTD («Имя внутреннего стандарта»). В этом примере целевое соединение M4PFOA является внутренним стандартом PFOA, а целевое соединение M4PFOS является внутренним стандартом PFOS (рисунок 5.79.).

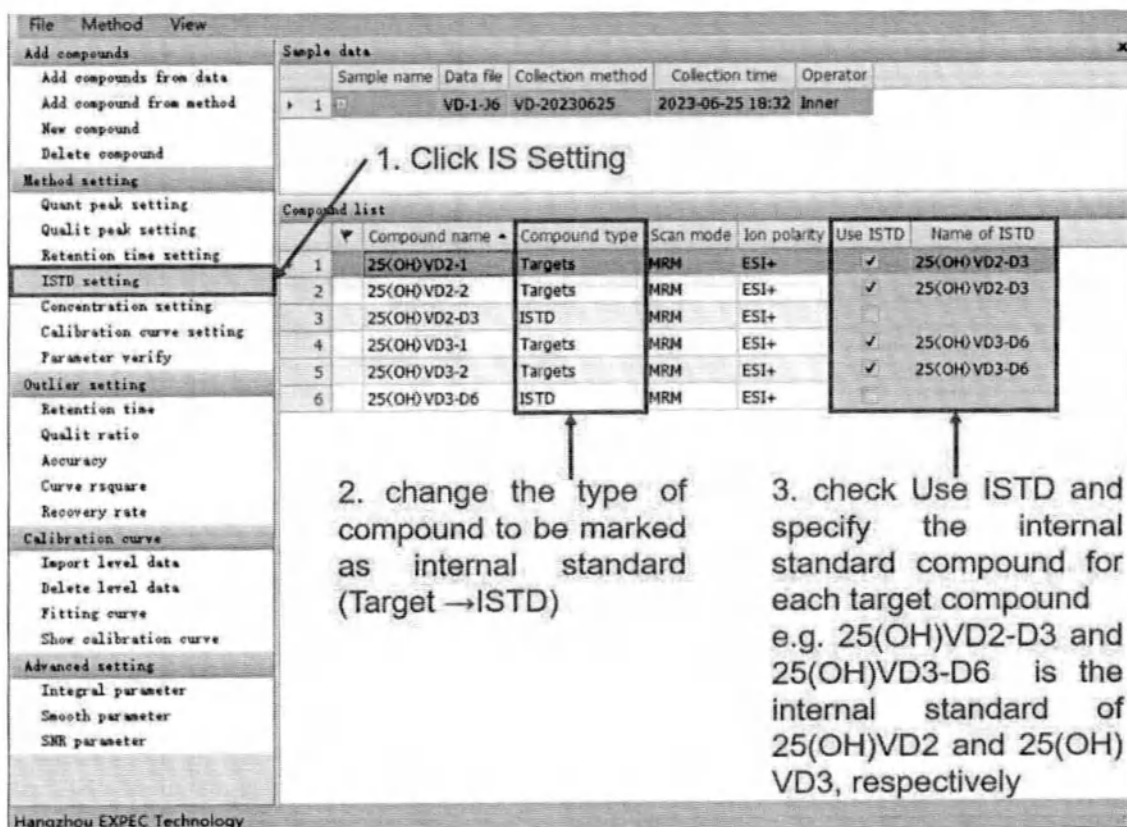


Рисунок 5.79. Интерфейс настройка внутреннего стандарта.

ДЛЯ РИСУНКА 5.79.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Use ISTD	Использовать внутренний стандарт
Name of ISTD	Наименование внутреннего стандарта
1. Click IS Setting	1. Нажмите «Настройка внутреннего стандарта»
2. Change the type of compound to be marked as internal standard (Target – ISTD)	2. Измените тип химического соединения, отмеченного как внутренний стандарт (Целевой – Внутренний стандарт)
3. Check Use ISTD and specify the internal standard compound for each target compound e.g. 25(OH)VD2-D3 and 25(OH)VD3-D6 is the internal standard of 25(OH)VD2 and 25(OH)VD3, respectively	3. Проверьте «Использовать внутренний стандарт» и укажите внутренний стандарт химического соединения для каждого химического соединения-цели, например, 25(OH)VD2-D3 и 25(OH)VD3-D6 – это внутренний стандарт для 25(OH)VD2 и 25(OH)VD3, соответственно

- 8) Нажмите Method setting («Настройка метода»), выберите Concentration setting («Настройка концентрации»), сначала введите самую высокую концентрацию соединения на калибровочной кривой при самой высокой концентрации при разбавлении, а затем введите коэффициент разбавления для каждого уровня концентрации от высокого до низкого в столбце режима разбавления. Коэффициент разбавления представляет собой отношение концентрации предыдущего уровня к концентрации следующего уровня (равен 1 для самого высокого уровня).

В этом примере PFOA и PFOS имеют 5 уровней концентрации, конкретные концентрации целевых соединений PFOA и PFOS на каждом уровне составляют 10 ppb (частей на миллиард), 20 ppb, 50 ppb, 100 ppb и 200 ppb, а концентрация внутреннего стандарта на каждом уровне составляет 5 ppb. Поэтому введите 200 при максимальной концентрации разбавления PFOA и PFOS, введите 1:2:2:2,5:2 в режиме разбавления; введите 5 при максимальной концентрации разбавления M4PFOA и M4PFOS, введите

1:1:1:1 в режиме разбавления. Далее выберите единицу концентрации и множитель. Коэффициент умножения представляет собой фактический коэффициент преобразования концентрации после предварительной обработки, конечная концентрация в таблице серии = расчетная концентрация × коэффициент умножения, как показано на рисунке 5.80.

1. Click Concentration Setting

2. Input the highest concentration of this compound in the calibration curve

3. Input Dilution mode
The dilution ratio is the ratio of the previous concentration level to the next concentration level (the highest level is 1)

Concentration	Dilution mode
100	1
50	2
10	5
5	2
2	2.5
1	2

4. Product factor
The product factor is the conversion coefficient of the actual concentration after pretreatment, and the final concentration in the batch treatment table = calculated concentration * product factor.

Target compound: 1:2:5:2:2:5:2
Internal standard: 1:1:1:1:1:1

Рисунок 5.80. Интерфейс метода настройки концентрации (метод внутреннего стандарта, метод 1).

ДЛЯ РИСУНКА 5.80.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений

ДЛЯ РИСУНКА 5.80.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets/ISTD	Тип химического соединения – Целевые/Внутренний стандарт
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Maximum dilution concentration	Максимальная концентрация разбавления
Dilution mode	Режим разбавления
Concentration unit, ng/ml	Единицы концентрации, нг/мл
Product factor	Коэффициент умножения
1. Click Concentration setting	1. Нажмите «Настройка концентрации»
2. Input the highest concentration of this compound in the calibration curve	2. Введите самую высокую концентрацию этого химического вещества в калибровочной кривой
3. Input Dilution mode The dilution ratio is the ratio of the previous concentration level to the next concentration level (the highest level is 1)	3. Режим Ввод разбавления Отношение разбавления – отношение предыдущего уровня концентрации к следующему уровню концентрации (самый высокий уровень 1)
Concentration	Концентрация
Dilution mode	Режим разбавления
Target compound	Целевые химические соединения
Internal standard	Внутренний стандарт
4. Product factor The product factor is the conversion coefficient of the actual concentration after pretreatment, and the final concentration in the batch treatment table = calculated concentration × product factor	4. Коэффициент умножения Коэффициент умножения – коэффициент преобразования фактической концентрации после предварительной обработки, и конечная концентрация в таблице обработки серии = расчетная концентрация × коэффициент умножения.

Есть еще один способ определить концентрацию: сделайте двойной щелчок по значку  непосредственно в столбце режима разбавления Dilution mode («Режим разбавления»), введите концентрацию каждого уровня непосредственно от большего к меньшему во всплывающем окне, как показано на рисунке 5.81.

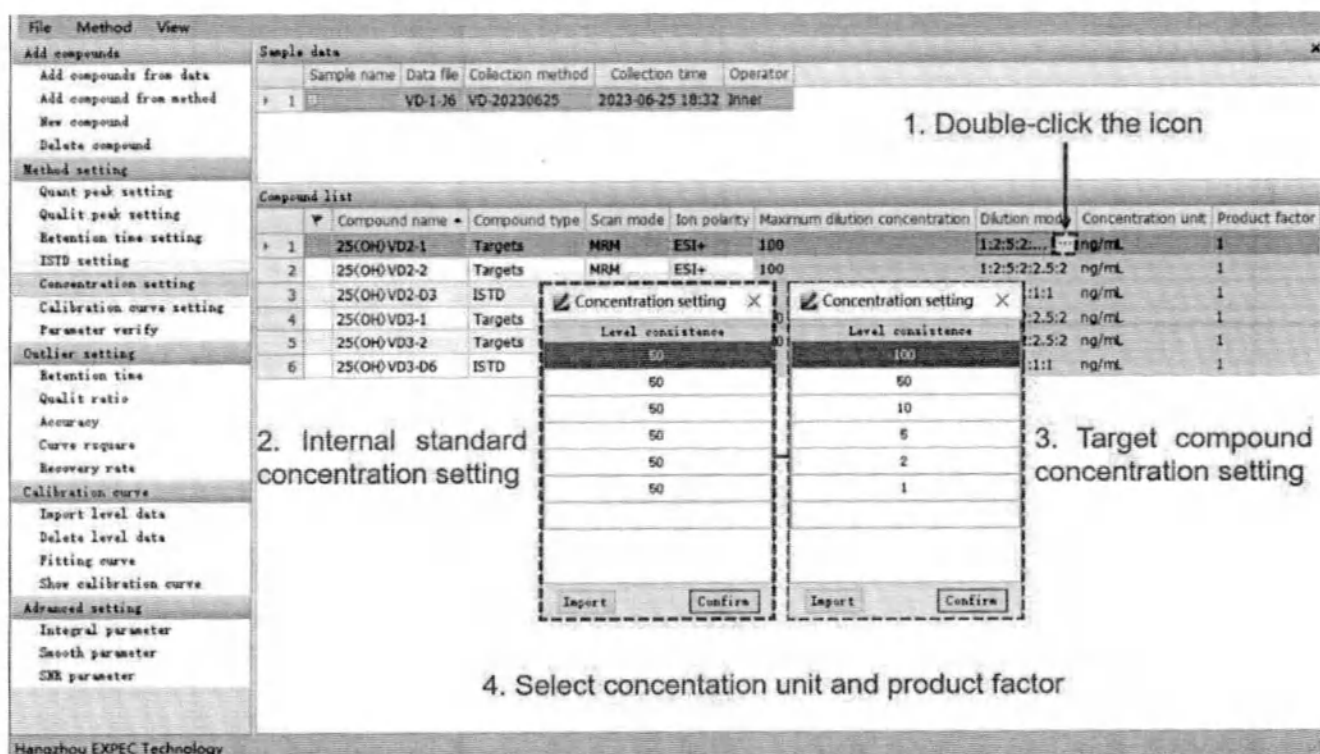


Рисунок 5.81. Интерфейс метода настройки концентрации (метод внутреннего стандарта, метод 2).

ДЛЯ РИСУНКА 5.81.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения

ДЛЯ РИСУНКА 5.81.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал—шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Maximum dilution concentration	Максимальная концентрация разбавления
Dilution mode	Режим разбавления
Concentration unit, ng/ml	Единицы концентрации, нг/мл
Product factor	Коэффициент умножения
Concentration setting	Настройка концентрации
Level consistence	Последовательность уровня
Import	Импортировать
Confirm	Подтвердить
1. Double-click the icon	1. Нажмите «Настройка концентрации»
2. Internal standard concentration setting	2. Настройка внутреннего стандарта концентрации
3. Target compound concentration setting	3. Настройка концентрации целевого химического соединения
4. Select concentration unit and product factor	4. Выберите единицы концентрации и коэффициент умножения

- 9) Нажмите Method setting («Настройка метода»), выберите Calibration curve setting («Калибровочная кривая»), далее выберите тип аппроксимации (линейная, квадратичная или третья степень), настройки исходной точки аппроксимации (игнорировать, принудительно, содержать и пустое смещение) и тип массы, как показано на рисунке 5.82.

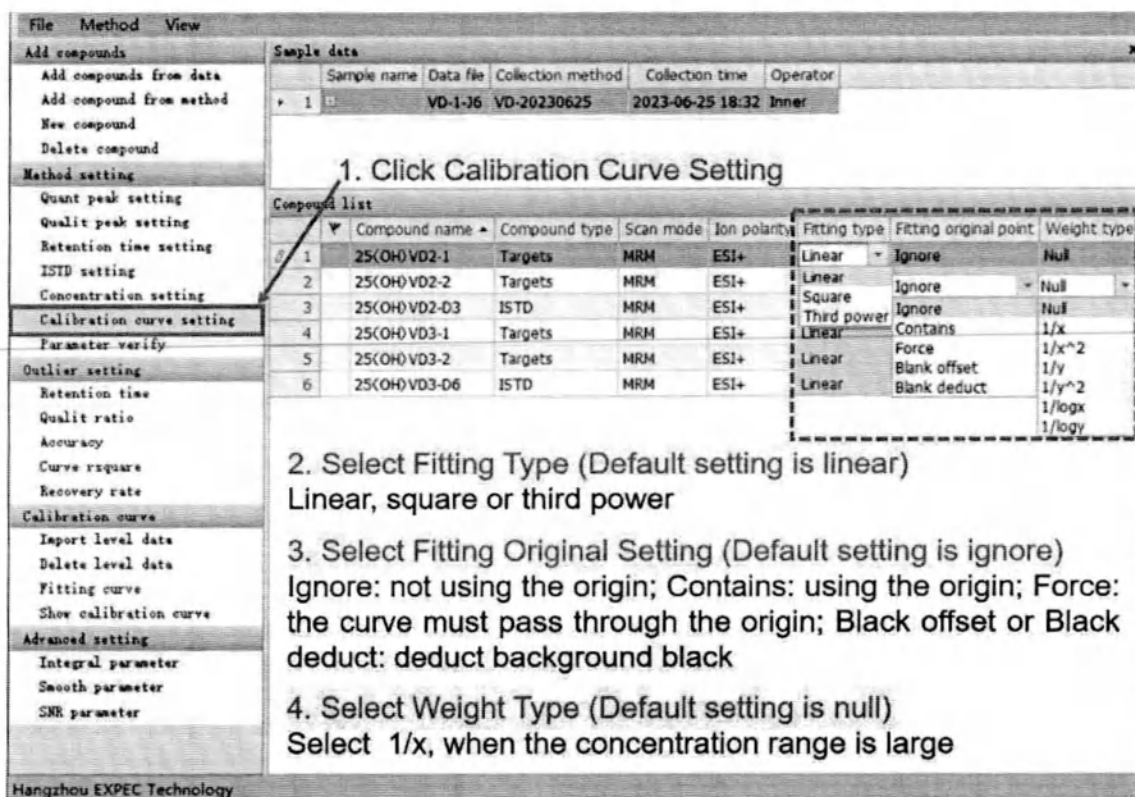


Рисунок 5.82. Интерфейс настройки калибровочной кривой (метод внутреннего стандарта).

ДЛЯ РИСУНКА 5.82.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора

ДЛЯ РИСУНКА 5.82.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Fitting type	Тип аппроксимации
Linear	Линейный
Square	Квадратный
Third power	Третья степень
Fitting original point	Подбор первоначальной точки
Ignore	Игнорировать
Contains	Содержит
Force	Принудительно
Blank offset	Сдвиг бланка
Blank deduct	Вычет бланка
Weight type	Тип массы
Null	Ноль
1. Click Calibration Curve Setting	1. Нажать «Настройка калибровочной кривой»
2. Select Fitting Type (Default setting is linear). Linear, square or third power	2. Выбрать «Тип аппроксимации» (По умолчанию задана настройка «линейная»). Линейная, квадратичная или третья степень
3. Select Fitting Original Setting (Default setting is ignore). Ignore: not using the origin; Contains: using the origin; Force: the curve must pass through the origin; Blank offset or Blank deduct: deduct background blank	3. Выбрать «Аппроксимация первоначальной настройки» (По умолчанию задана настройка «Игнорировать»). Игнорировать: не использовать источник; Принудительно: использовать источник; Сдвиг бланка или Вычет бланка: вычесть фон бланка
4. Select Weight Type (Default setting is null). Select 1/x, when the concentration range is large	4. Выбрать «Тип массы» (По умолчанию задана настройка «Ноль»); Выбрать 1/x, когда диапазон концентрации большой

10) Нажмите Parameter verify («Проверка параметров»), чтобы проверить количественный метод. Если параметры верны, появится следующее диалоговое окно, как показано на рисунке 5.83.

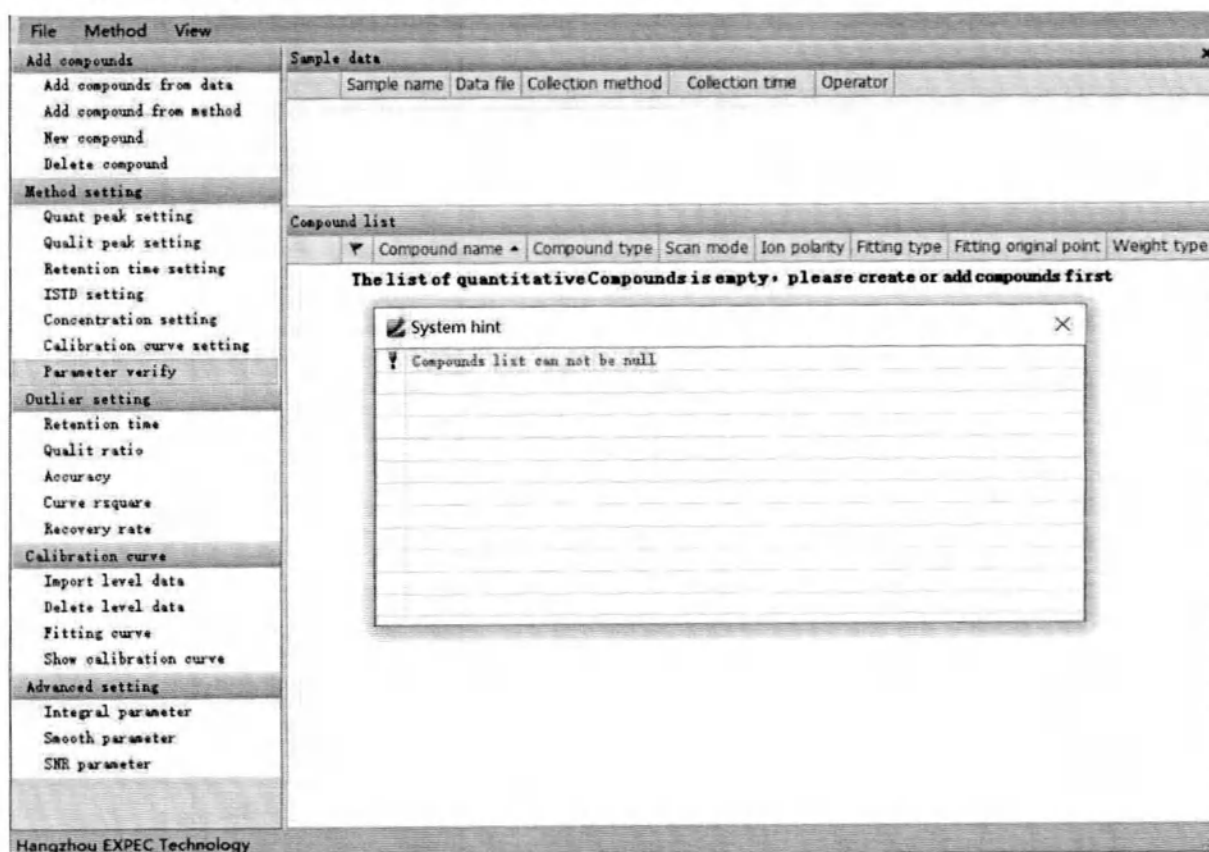


Рисунок 5.83. Интерфейс проверки параметров (метод внутреннего стандарта).

ДЛЯ РИСУНКА 5.83.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type	Тип химического соединения
Scan mode	Режим сканирования
Ion polarity	Полярность ионов
Fitting type	Тип аппроксимации
Fitting original point	Начальная точка аппроксимации
Weight type	Тип массы
The list of quantitative compounds is empty -- please create or add compounds first	Перечень количественных химических соединений пуст -- вначале создайте его или добавьте химические соединения
System hint	Подсказка системы
Compounds list cannot be null	Перечень химических соединений не может быть пустым

- 11) Установите отклонения и расширенные параметры, как описано в п. «Метод внешнего стандарта».
- 12) Дважды щелкните Calibration curve («Калибровочная кривая»), выберите Import level data «Импортировать данные об уровне» на левой панели навигации, затем выберите данные калибровочного образца и импортируйте их, как показано на рисунке 5.84.

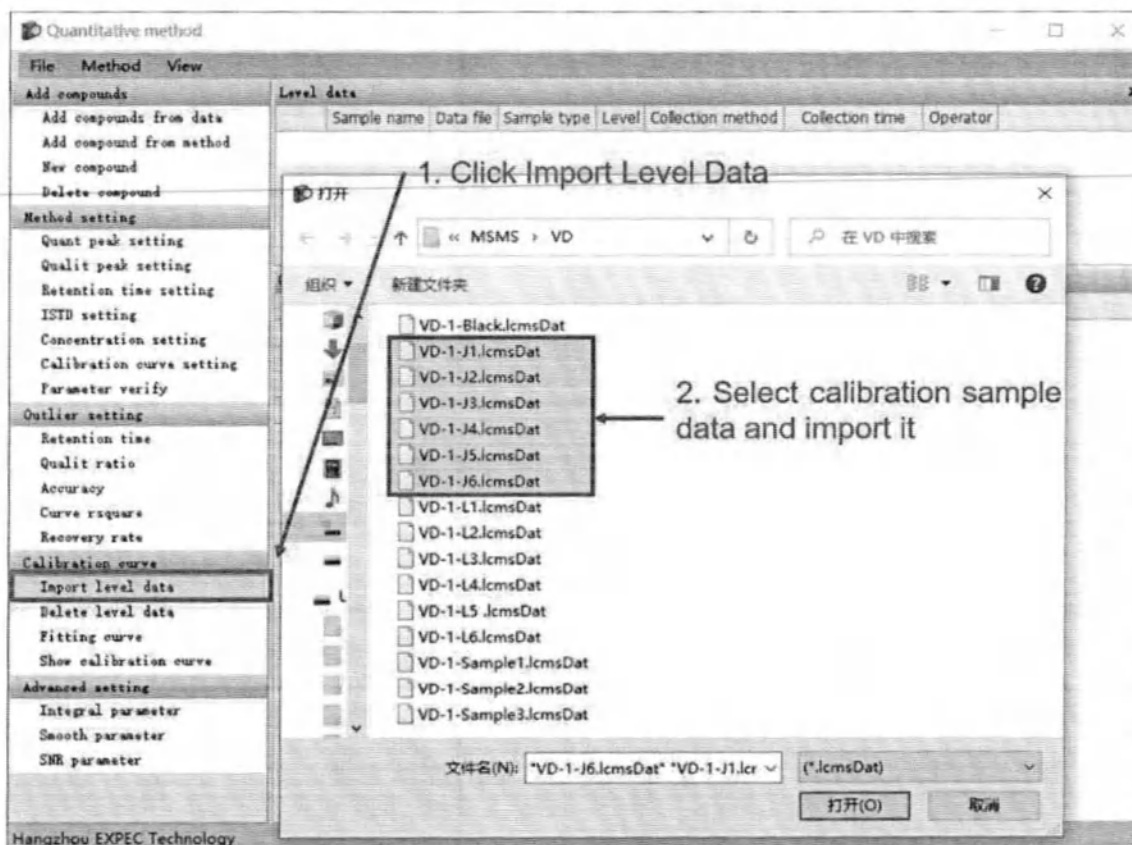


Рисунок 5.84. Интерфейс импорта данных уровня калибровочной кривой.

ДЛЯ РИСУНКА 5.84.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования

ДЛЯ РИСУНКА 5.84.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
1. Click Import Level Data	1. Нажмите на «Импорт данных уровня» и импортируйте их
2. Select calibration sample data and import it	2. Выберите данные калибровки образца и импортируйте их
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

- 13) Установите тип образца и уровень калибровки на странице данных уровня. Уровень концентрации холостой пробы равен 0, а уровень концентрации калибровочного образца является целым числом (1–n), увеличивающимся от 1. Чем ниже концентрация, тем меньше количество уровней. Наименьший калибровочный образец равен 1. Затем нажмите Fitting curve («Кривая аппроксимации»), после этого программа начнет аппроксимировать калибровочную кривую в соответствии с заданными параметрами метода (рисунок 5.85.).

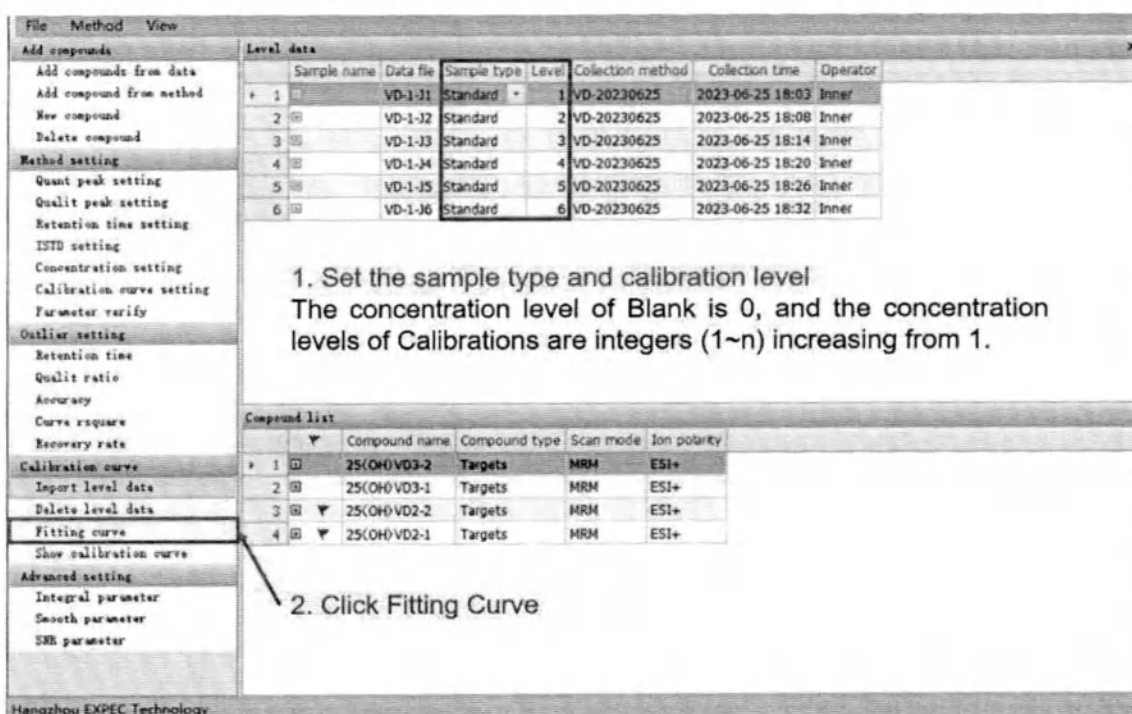


Рисунок 5.85. Интерфейс настройки кривой аппроксимации (метод внутреннего стандарта, общий вид).

ДЛЯ РИСУНКА 5.85.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров

ДЛЯ РИСУНКА 5.85.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал—шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
1. Set the sample type and calibration level. The concentration level of Blank is 0, and the concentration levels of Calibrations are integers (1–n) increasing from 1.	1. Выберите тип образца и уровень калибровки. Уровень концентрации бланка 0, а уровни концентрации калибровки – целые числа (от 1 до n), возрастающие от 1.
2. Click Fitting curve	2. Нажмите «Кривая аппроксимации».

14) Нажмите на опцию Show calibration curve («Показать калибровочную кривую») – справа отобразится список соединений, информация о соединении и окно калибровочной кривой. Щелчок по строке соединения расширит информацию о калибровке для данного соединения, показывая расчетную концентрацию, точность, качественное соотношение и относительный отклик для каждого уровня концентрации соединения. Поместите курсор на значок  – автоматически отобразится информация для этого соединения.

Нажмите на иконку  количественной хроматограммы для внутреннего стандарта (ISTD). При наведении курсора на значок автоматически отображается информация об отклонениях для этого соединения (рисунок 5.86.).

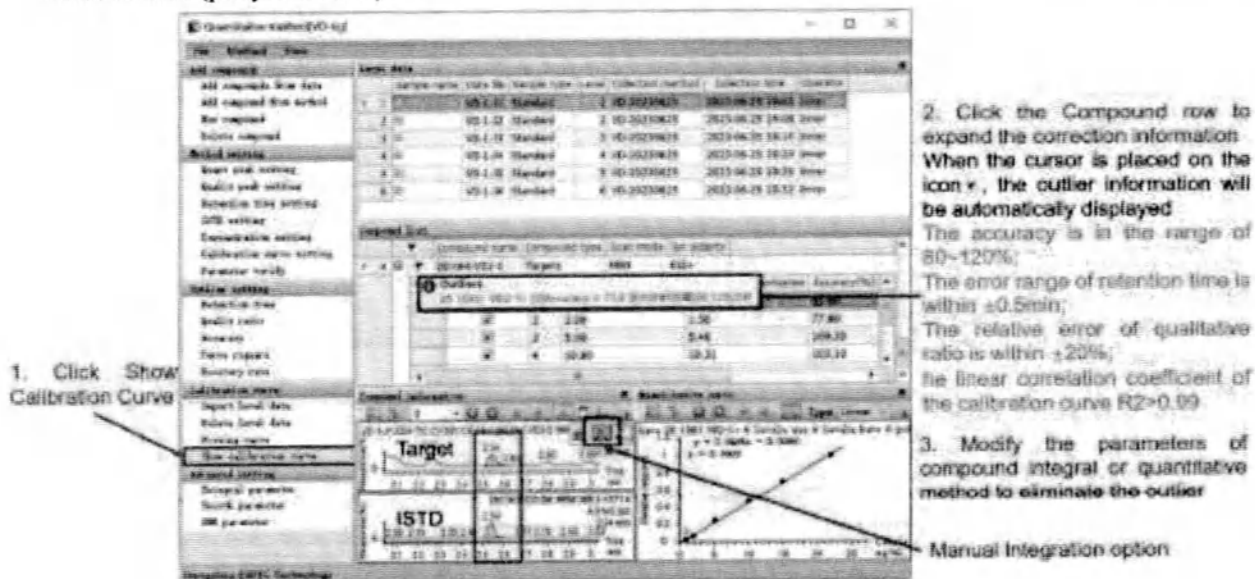


Рисунок 5.86. Интерфейс настройки кривой аппроксимации (метод внутреннего стандарта, калибровочная кривая).

ДЛЯ РИСУНКА 5.86.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File	Файл
Method	Метод
View	Вид
Add compounds	Добавить химические соединения
Add compounds from data	Добавить химические соединения из данных
Add compound from method	Добавить химическое соединение из метода
New compound	Новое химическое соединение
Delete compound	Удалить химическое соединение
Method setting	Настройка метода
Quant peak setting	Настройка количественного пика
Qualit peak setting	Настройка качественного пика
Retention time setting	Настройка времени удержания
ISTD setting	Настройка внутреннего стандарта
Concentration setting	Настройка концентрации
Calibration curve setting	Настройка калибровочной кривой
Parameter verify	Проверка параметров
Outlier setting	Настройка выбросов
Retention time	Время удержания
Qualit ratio	Количественное соотношение
Accuracy	Точность
Curve square	Площадь кривой
Recovery rate	Степень восстановления
Calibration curve	Калибровочная кривая
Import level data	Импорт данных уровня
Delete level data	Удалить данные уровня
Fitting curve	Кривая аппроксимации
Show calibration curve	Показать калибровочную кривую
Advanced setting	Дополнительная настройка
Integral parameter	Параметр интегрирования
Smooth parameter	Параметр сглаживания
SNR parameter	Параметр SNR (отношение сигнал-шум)
Sample data	Данные образца
Sample name	Наименование образца
Data file	Файл данных
Collection method	Метод отбора
Collection time	Время отбора
Operator	Оператор
Compound list	Перечень химических соединений
Compound name	Наименование химического соединения
Compound type – Targets	Тип химического соединения – Целевые
Scan mode – MRM	Режим сканирования – MRM
Ion polarity – ESI+	Полярность ионов – ESI+
Concentration	Концентрация
Accuracy (%)	Точность (%)
Outliers	Выбросы
Compound information	Информация о химическом соединении
Response (%)	Отклик (%)
Time, min	Время, мин
Quantitative curve	Количественная кривая
Type: Linear	Тип: линейный
Have 25 (OH) VD2-1: 6 levels, use 6 levels,	Есть 25 (OH) VD2-1: 6 уровней, используются 6 уровней,
Concentration, ng/ml	Концентрация, нг/мл
Target	Целевой
ISTD	Внутренний стандарт
1. Click Show Calibration Curve	1. Нажмите «Показать калибровочную кривую»
2. Click the Compound row to expand the correction information. When the cursor is placed on the icon (), the outlier information will be automatically displayed. The accuracy is in the range 80–120%, The error range of retention time is within ± 0.5 min; The relative error of qualitative ratio is within $\pm 20\%$; The linear correlation coefficient of the calibration curve $R^2 > 0.99$.	2. Нажмите на строку «Химическое соединение», чтобы расширить информацию о корректировке. Когда курсор помещен на пиктограмму (), будет автоматически отображаться информация о выбросе. Точность находится в диапазоне 80–120%, Диапазон погрешности времени удержания в пределах ± 0.5 минут; Относительная погрешность качественного соотношения в пределах $\pm 20\%$; Коэффициент линейной корреляции калибровочной кривой $R^2 > 0.99$.
3. Modify the parameters of compound integral or quantitative method to eliminate the outlier.	3. Модифицируйте параметры интегрирования или количественного метода для химического соединения, чтобы устранить выброс.
Manual integration option	Опция интегрирования в ручном режиме.

Допустимые значения параметров выброса приведены в п. «Метод внешнего стандарта».

Выбросы, которые можно устранить, изменив параметры интегрирования соединений или метода количественного анализа, не отображаются. Если аномальные выбросы вызваны ошибками интегрирования программного обеспечения, то можно вручную интегрировать хроматографические пики соединения с помощью параметра «Интеграция вручную» в окне «Информация о соединении» или улучшить результаты интегрирования, изменив параметры интеграции и сглаживания в дополнительных настройках.

Когда все соединения исчезнут, калибровочную кривую можно применять для анализа серии образцов, щелкнув «Настройка метода количественного анализа».

Нажмите на иконку  («Сохранить»), чтобы сохранить количественный метод и закройте окно. После вышеуказанных шагов будет настроен полный количественный метод внешнего стандарта.

5.11.2.3. Пакетный анализ

1) Импорт данных и выбор метода

Возьмите в качестве примера данные по сульфонамидам, обработанные методом внешнего стандарта, нажмите на иконку  в интерфейсе пакетной обработки, проведите импорт данных для анализа, как показано на рисунке 5.87.

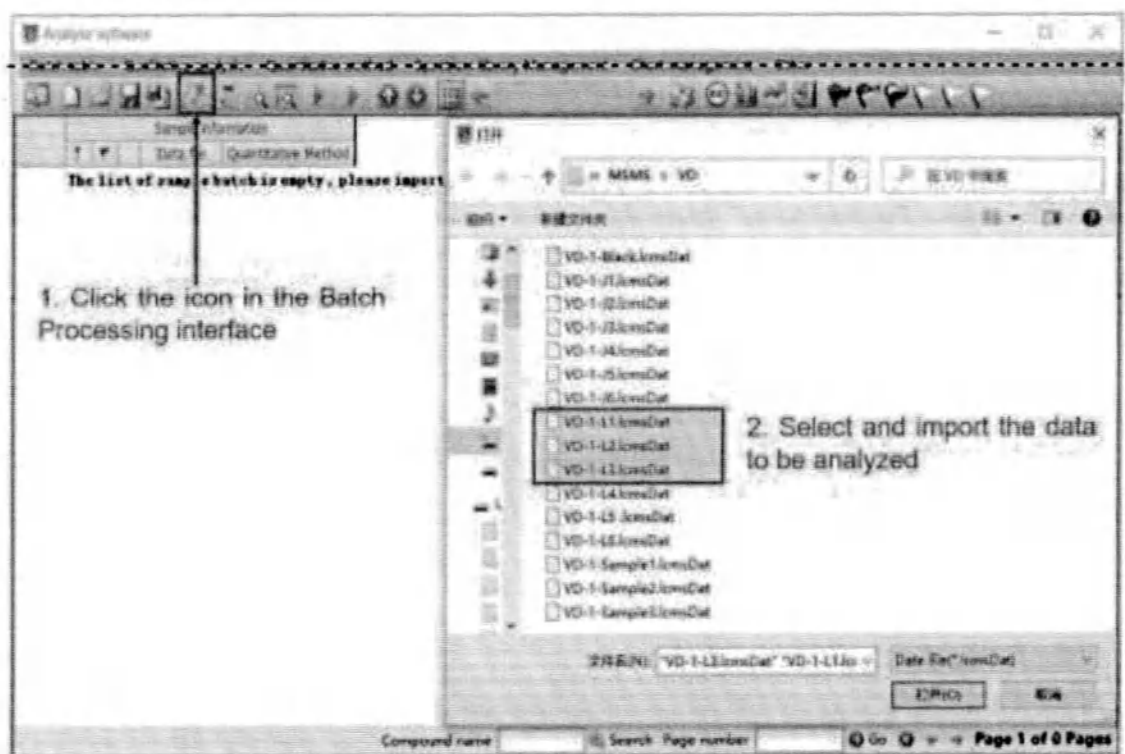


Рисунок 5.87. Интерфейс импорта данных для анализа.

ДЛЯ РИСУНКА 5.87.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analyse software	Программное обеспечение для анализа
Batch table	Таблица серии
Qualitative analysis	Качественный анализ
Quantitative method	Количественный метод
Spectrum library management	Управление библиотекой спектров
Chart management	Управление картой
Other	Другое
Sample information	Информация об образце
Data file	Файл данных
Quantitative method	Количественный метод
Compound name	Наименование химического соединения
Search page number	Номер страницы поиска
Page 1 of 0 pages	Страница 1 из 0 страниц
The list of sample batch is empty, please import	Перечень серии образцов пуст, импортируйте
1. Click the icon in the batch processing interface	1.Нажмите на пиктограмму в интерфейсе обработки серии

ДЛЯ РИСУНКА 5.87.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
2. Select and import the data to be analyzed	2. Выберите и импортируйте данные для анализа

Выберите строку образца и загрузите только что созданный количественный метод SA-ESTD.dlmth в контекстном меню. Для удобного и гибкого использования различные количественные методы могут быть выбраны в соответствии с разными образцами в одной и той же таблице серии. Если импортированные данные серии используют один и тот же количественный метод, то можно использовать опцию Fill down («Заполнить») в контекстном меню, как показано на рисунке 5.88.

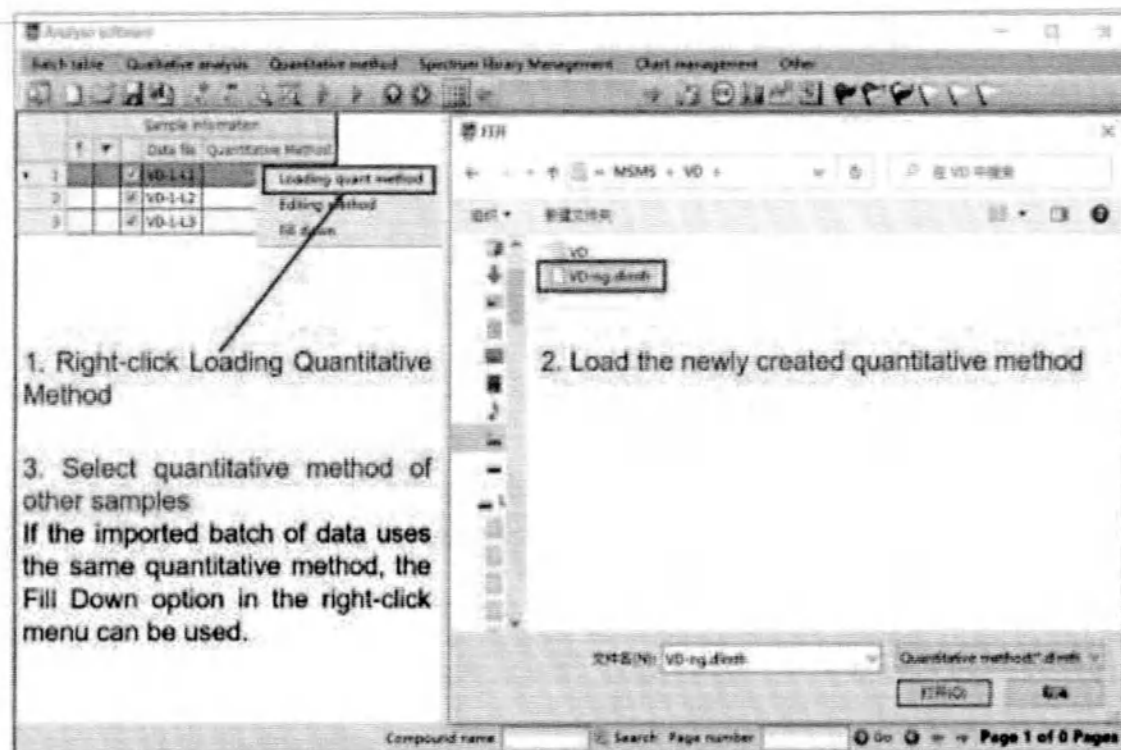


Рисунок 5.88. Интерфейс загрузки количественного метода.

ДЛЯ РИСУНКА 5.88.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analyse software	Программное обеспечение для анализа
Batch table	Таблица серии
Qualitative analysis	Качественный анализ
Quantitative method	Количественный метод
Spectrum library management	Управление библиотекой спектров
Chart management	Управление картой
Other	Другое
Sample information	Информация об образце
Data file	Файл данных
Quantitative method	Количественный метод
Loading quant method	Загрузка количественного метода
Editing method	Метод редактирования
Fill down	Заполнить
Compound name	Наименование химического соединения
Search page number	Номер страницы поиска
Page 1 of 0 pages	Страница 1 из 0 страниц
The list of sample batch is empty, please import	Перечень серии образцов пуст, импортируйте
1. Right-click loading quantitative method	1. Загрузка количественного метода нажатием правой кнопки мыши
2. Loading the newly created quantitative method	2. Загрузка вновь созданного количественного метода
3. Select quantitative method of other samples. If the imported batch of data uses the same quantitative method, the Fill Down option in the right-click menu can be used.	3. Выбрать количественный метод для других образцов. Если для импортируемой серии данных используется такой же количественный метод, то можно использовать опцию «Заполнить» из меню, загружаемого нажатием правой кнопки мыши.

2) Пакетная обработка образцов

Выберите образец для анализа: данные образца, загружаемые в первый раз, отмечены по умолчанию, а непроверенные данные образца не будут обрабатываться при пакетной обработке. Нажмите на иконку  («Анализ серии») – программное обеспечение запустит пакетный анализ образца, автоматически интегрирует, рассчитает концентрацию соединения и отобразит результаты обработки образца в таблице серии. В то же время при периодическом процессе автоматически появляется окно информации о соединении, которое содержит количественные хроматограммы и калибровочные кривые. Нажмите на иконку  («Количественная серия») – предыдущие результаты интегрирования будут сохранены, а концентрация будет пересчитана только для текущей серии, которая подходит для изменения калибровочной кривой, как показано на рисунке 5.89.

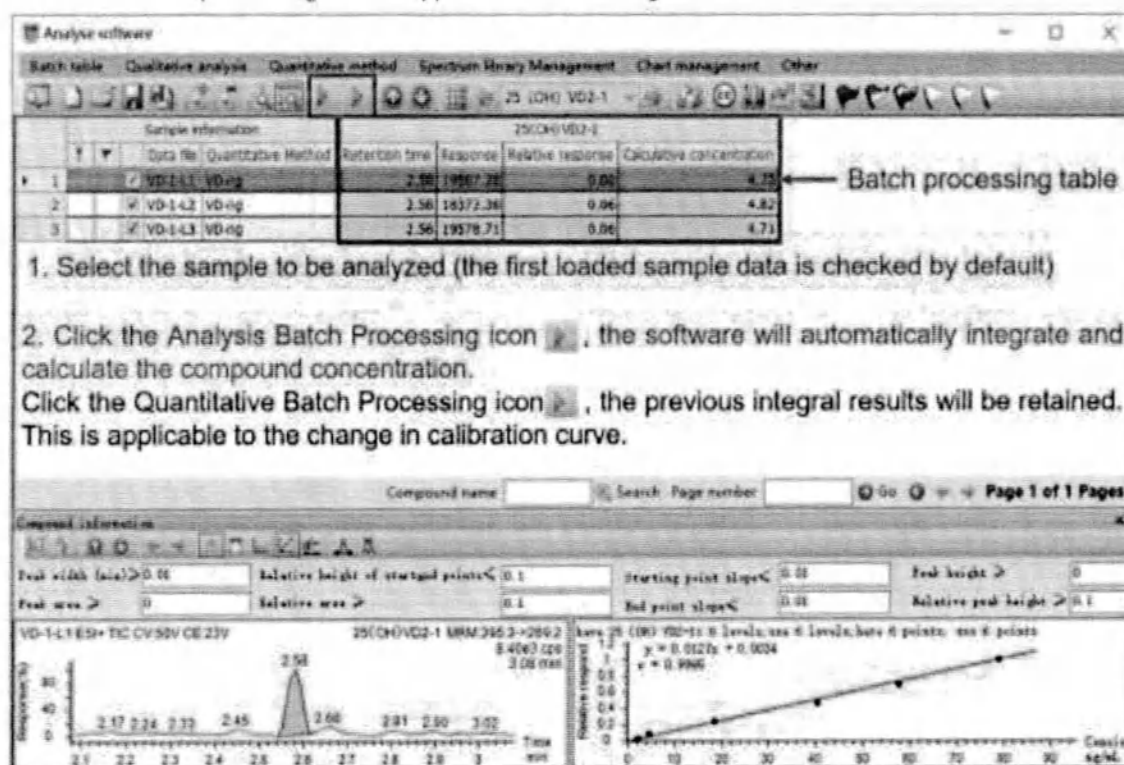


Рисунок 5.89. Пример интерфейса настройки серии.

ДЛЯ РИСУНКА 5.89.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analyse software	Программное обеспечение для анализа
Batch table	Таблица серии
Qualitative analysis	Качественный анализ
Quantitative method	Количественный метод
Spectrum library management	Управление библиотекой спектров
Chart management	Управление картой
Other	Другое
Sample information	Информация об образце
Data file	Файл данных
Quantitative method	Количественный метод
Retention time	Время удержания
Response (%)	Отклик (%)
Relative response	Время удержания
Calculative concentration	Расчетная концентрация
Batch processing table	Таблица обработки серии
Compound name	Наименование химического соединения
Search	Поиск
Page number	Номер страницы поиска
Page 1 of 1 pages	Страница 1 из 1 страниц
Compound information	Информация о химическом соединении
Peak width ≥ 0.01 (min)	Ширина пика $\geq 0,01$ (мин)
Peak area ≥ 0	Площадь пика ≥ 0
Relative height of start-end points ≤ 0.1	Относительная высота начальной и конечной точек $\leq 0,1$

ДЛЯ РИСУНКА 5.89.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Relative area ≥ 0.1	Относительная площадь ≥ 0.1
Start point slope ≤ 0.01	Наклон в начальной точке ≤ 0.01
End point slope ≤ 0.01	Наклон в конечной точке ≤ 0.01
Peak height ≥ 0	Высота пика ≥ 0
Relative peak height ≥ 0.1	Относительная площадь пика ≥ 0.1
cps	импульсов в секунду
min	мин
Have 35(OH)VD2-1: 6 levels, use 6 levels, have 6 points, use 6 points	Имеем 35(OH)VD2-1: 6 уровней, используем 6 уровней, имеем 6 точек, используем 6 точек
Response (%)	Отклик (%)
Relative response	Относительный отклик
Time, min	Время, мин
Concentration, ng/nl	Концентрация, нг/нл
1. Select the sample to be analyzed (the first loaded sample data is checked by default)	1. Выберите образец для анализа (данные о первом загруженном образце проверяются по умолчанию)
2. Click the Analysis Batch Processing icon (), the software will automatically integrate and calculate the compound concentration. Click the Quantitative Batch Processing icon (), the previous integral results will be retained. This is applicable to the change in calibration curve.	2. Нажмите на пиктограмму «Анализ обработки серии» (), программное обеспечение автоматически будет интегрировать и рассчитывать концентрацию химического соединения. Нажмите на пиктограмму «Количественная обработка серии» (), предыдущие интегрированные результаты будут сохранены. Это применимо к изменениям калибровочной кривой.

3) Просмотр результатов пакетной обработки

Нажмите на иконку  – в таблице серии по умолчанию отображаются результаты серии одного соединения. Нажмите на иконку , чтобы отобразить/закрыть текущую информацию о соединении и информацию о калибровочной кривой в нижней части интерфейса. Нажмите в таблице серии и окне информации о соединении кнопки быстрого доступа для быстрого просмотра различных результатов выборки , также интерактивные кнопки для быстрого переключения между соединениями , как показано на рисунке 5.90.

Функции быстрого доступа в информационном окне «Соединения» будут доступны при нажатии на следующие иконки:

- ✓  – отобразится хроматограмма пиков, используемых для количественного определения соединений, отображается по умолчанию;
- ✓  – отобразится хроматограмма пиков, используемых для качественного определения соединений, не отображается по умолчанию;
- ✓  – отобразятся результаты спектра, не отображаются по умолчанию;
- ✓  – отобразится калибровочная кривая, отображается по умолчанию;
- ✓  – отобразится хроматограмма внутреннего стандарта (ISTD), не отображается по умолчанию;
- ✓  – отобразятся хроматографические пики для соединений, которые можно интегрировать вручную.

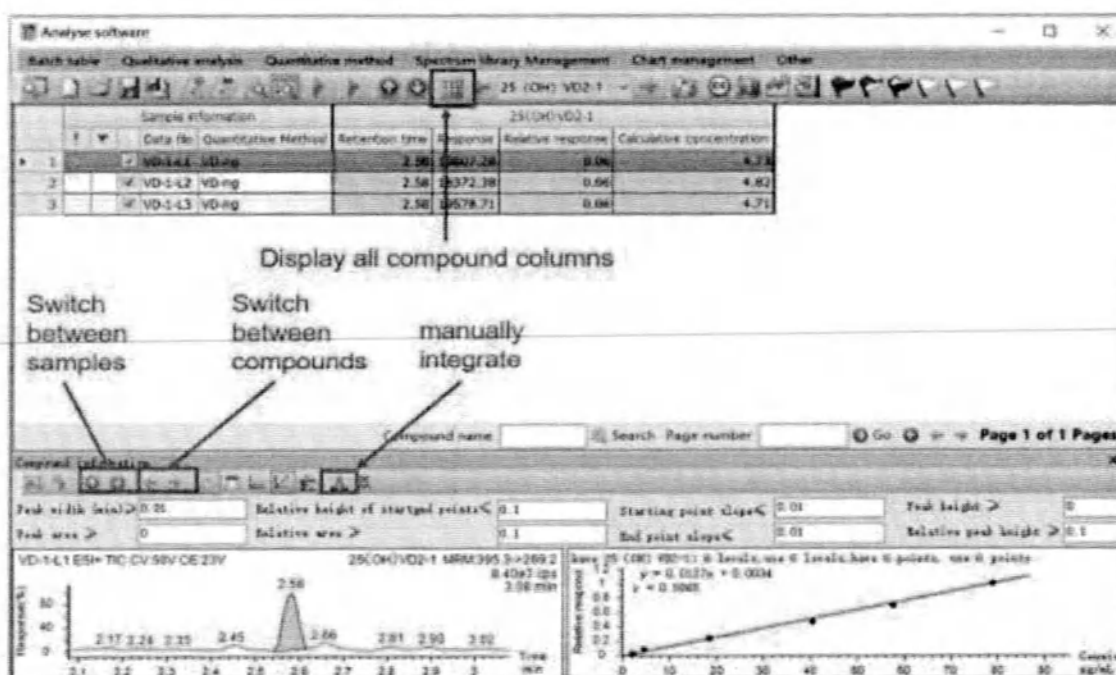


Рисунок 5.90. Интерфейс пакетной обработки образцов.

ДЛЯ РИСУНКА 5.90.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analyse software	Программное обеспечение для анализа
Batch table	Таблица серии
Qualitative analysis	Качественный анализ
Quantitative method	Количественный метод
Spectrum library management	Управление библиотекой спектров
Chart management	Управление картой
Other	Другое
Sample information	Информация об образце
Data file	Файл данных
Quantitative method	Количественный метод
Retention time	Время удержания
Response (%)	Отклик (%)
Relative response	Время удержания
Calculative concentration	Расчетная концентрация
Display all compound columns	Отобразить все столбцы химических соединений
Switch between samples	Переключение между образцами
Switch between compounds	Переключение между химическими соединениями
Manually integrate	Интегрировать в ручном режиме
Compound name	Наименование химического соединения
Search	Поиск
Page number	Номер страницы поиска
Page 1 of 1 pages	Страница 1 из 1 страниц
Compound information	Информация о химическом соединении
Peak width ≥ 0.01 (min)	Ширина пика $\geq 0,01$ (мин)
Peak area ≥ 0	Площадь пика ≥ 0
Relative height of start-end points ≤ 0.1	Относительная высота начальной и конечной точек $\leq 0,1$
Relative area ≥ 0.1	Относительная площадь ≥ 0
Start point slope ≤ 0.01	Наклон в начальной точке $\leq 0,01$
End point slope ≤ 0.01	Наклон в конечной точке $\leq 0,01$
Peak height ≥ 0	Высота пика ≥ 0
Relative peak height ≥ 0.1	Относительная площадь пика $\geq 0,1$
cps	импульсов в секунду
min	мин
Have 35(OH)VD2-1: 6 levels, use 6 levels, have 6 points, use 6 points	Имеем 35(OH)VD2-1: 6 уровней, используем 6 уровней, имеем 6 точек, используем 6 точек
Response (%)	Отклик (%)
Relative response	Относительный отклик
Time, min	Время, мин
Concentration, ng/nl	Концентрация, нг/нл

4) Проверка отклонений

При пакетной обработке образцов программное обеспечение автоматически проверяет подозрительные данные на основе настроек отклонений. Если по итогам проверки во втором столбце информации об образце отображается значок , то это означает, что в данной строке выборки имеется отклонение. При этом он отмечен разными цветами в таблице серии для напоминания пользователю о необходимости просмотреть данные. Если значение отклонения высокое, то ячейка отмечена красным цветом; если значение отклонения низкое, то ячейка отмечена синим цветом.

Можно нажать значок  для отображения выборочной информации для различных отклонений. Если необходимо изменить настройки отклонений, введите количественный метод для редактирования параметров, а затем повторно запустите пакетную обработку образцов (рисунок 5.91.).

Функции в правой части таблицы серии будут доступны при нажатии на следующие значки:

- ✓  – отобразятся только образцы с высокими/низкими отклонениями в пакете обработки;
- ✓  – отобразятся только образцы с высокими отклонениями в пакете обработки;
- ✓  – отобразятся только образцы с низкими отклонениями в пакете обработки;
- ✓  – отобразятся только образцы без отклонений в пакете обработки.

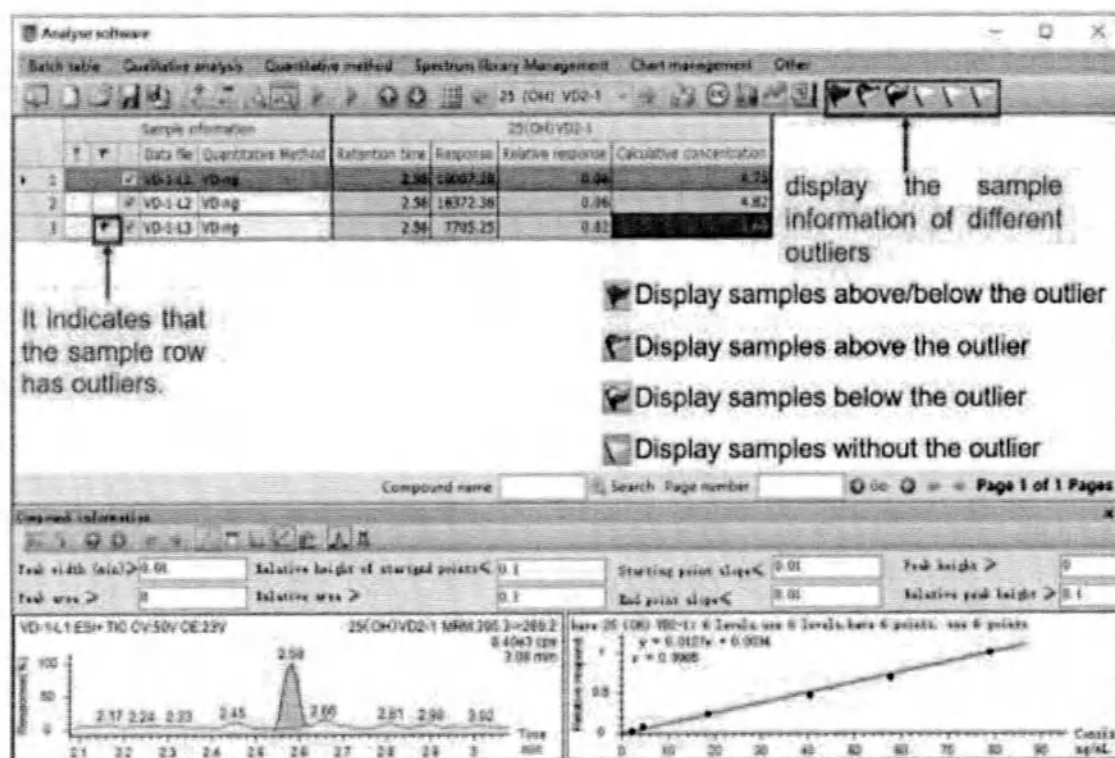


Рисунок 5.91. Интерфейс проверки отклонений.

ДЛЯ РИСУНКА 5.91.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analyse software	Программное обеспечение для анализа
Batch table	Таблица серии
Qualitative analysis	Качественный анализ
Quantitative method	Количественный метод
Spectrum library management	Управление библиотекой спектров
Chart management	Управление картой
Other	Другое
Sample information	Информация об образце
Data file	Файл данных
Quantitative method	Количественный метод
Retention time	Время удержания
Response (%)	Отклик (%)
Relative response	Время удержания
Calculative concentration	Расчетная концентрация
Display the sample information of different outliers	Отобразить информацию об образце с различными выбросами

ДЛЯ РИСУНКА 5.91.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Display samples above/below the outlier	Отобразить образцы выше/ ниже выброса
Display samples above the outlier	Отобразить образцы выше выброса
Display samples below the outlier	Отобразить образцы ниже выброса
Display samples without the outlier	Отобразить образцы без выброса
It indicates that the sample row has outliers	Это означает, что строка образцов содержит выбросы
Compound name	Наименование химического соединения
Search	Поиск
Page number	Номер страницы поиска
Page 1 of 1 pages	Страница 1 из 1 страниц
Compound information	Информация о химическом соединении
Peak width ≥ 0.01	Ширина пика $\geq 0,01$
Peak area ≥ 0	Площадь пика ≥ 0
Relative height of start-end points ≤ 0.1	Относительная высота начальной и конечной точек $\leq 0,1$
Relative area ≥ 0.1	Относительная площадь ≥ 0
Start point slope ≤ 0.01	Наклон в начальной точке $\leq 0,01$
End point slope ≤ 0.01	Наклон в конечной точке $\leq 0,01$
Peak height ≥ 0	Высота пика ≥ 0
Relative peak height ≥ 0.1	Относительная площадь пика $\geq 0,1$
cps	импульсов в секунду
min	мин
Have 35(OH)VD2-1: 6 levels, use 6 levels, have 6 points, use 6 points	Имеем 35(OH)VD2-1: 6 уровней, используем 6 уровней, имеем 6 точек, используем 6 точек
Response (%)	Отклик (%)
Relative response	Относительный отклик
Time, min	Время, мин
Concentration, ng/nl	Концентрация, нг/нл

5) Статистика данных

Нажмите на иконку , отобразится статистика по образцам в таблице серии, а статистические результаты отобразятся в нижней части строки образцов. Результаты включают минимальное (Min), максимальное (Max), среднее (AVG), стандартное отклонение (SD) и относительное стандартное отклонение (RSD) для каждого столбца соединения для всех образцов в текущем списке. Эта функция подходит для сортировки данных выборок или повторяемости данных восстановления, при ее использовании необходимо удалять нерелевантные выборки, иначе статистические результаты будут неточными, как показано на рисунке 5.92.

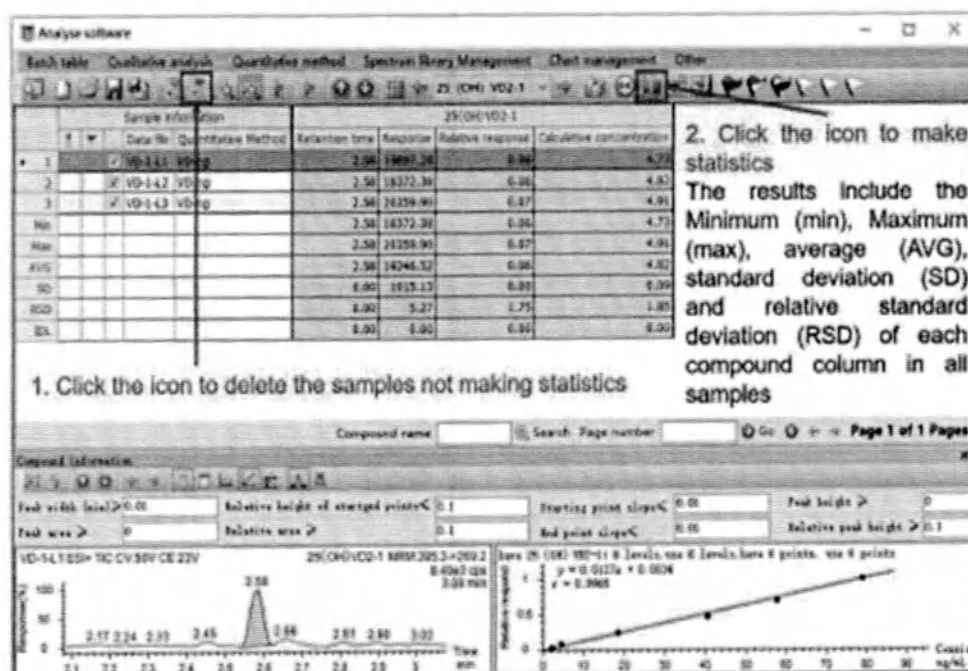


Рисунок 5.92. Интерфейс статистики данных.

ДЛЯ РИСУНКА 5.92.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analyse software	Программное обеспечение для анализа
Batch table	Таблица серии
Qualitative analysis	Качественный анализ
Quantitative method	Количественный метод
Spectrum library management	Управление библиотекой спектров
Chart management	Управление картой
Other	Другое
Sample information	Информация об образце
Data file	Файл данных
Quantitative method	Количественный метод
Retention time	Время удержания
Response (%)	Отклик (%)
Relative response	Время удержания
Calculated concentration	Расчетная концентрация
Compound name	Наименование химического соединения
Search	Поиск
Page number	Номер страницы поиска
Page 1 of 1 pages	Страница 1 из 1 страниц
Compound information	Информация о химическом соединении
Peak width ≥ 0.01	Ширина пика $\geq 0,01$
Peak area ≥ 0	Площадь пика ≥ 0
Relative height of start-end points ≤ 0.1	Относительная высота начальной и конечной точек $\leq 0,1$
Relative area ≥ 0.1	Относительная площадь ≥ 0
Start point slope ≤ 0.01	Наклон в начальной точке $\leq 0,01$
End point slope ≤ 0.01	Наклон в конечной точке $\leq 0,01$
Peak height ≥ 0	Высота пика ≥ 0
Relative peak height ≥ 0.1	Относительная площадь пика $\geq 0,1$
cps	импульсов в секунду
min	мин
Have 35(OH)VD2-1: 6 levels, use 6 levels, have 6 points, use 6 points	Имеем 35(OH)VD2-1: 6 уровней, используем 6 уровней, имеем 6 точек, используем 6 точек
Response (%)	Отклик (%)
Relative response	Относительный отклик
Time, min	Время, мин
Concentration, ng/nl	Концентрация, нг/нл
1. Click the icon to delete the samples not making statistics	1. Нажмите на пиктограмму, чтобы удалить образцы, не составляющие статистику
2. Click the icon to make statistics. The results include the Minimum (min), Maximum (max), average (AVG), standard deviation (SD) and relative standard deviation (RSD) of each compound column in all samples	2. Нажмите на пиктограмму, чтобы сформировать статистику. Результаты включают минимальное (min), максимальное (max), среднее (AVG) значение, стандартное отклонение (SD) и относительное стандартное отклонение (RSD) для столбца каждого химического соединения для всех образцов

6) Сохранение и экспорт результатов

Нажмите на иконку , чтобы сохранить текущий список образцов или нажмите на иконку , чтобы сохранить текущий список образцов. Список ранее сохраненных образцов можно открыть позже, нажав на иконку . Нажмите на иконку  для экспорта результатов серии в Excel (для изменения типа сохраненных данных необходимо обратиться к уполномоченному представителю производителя на территории Российской Федерации (РФ)) (рисунок 5.93.).

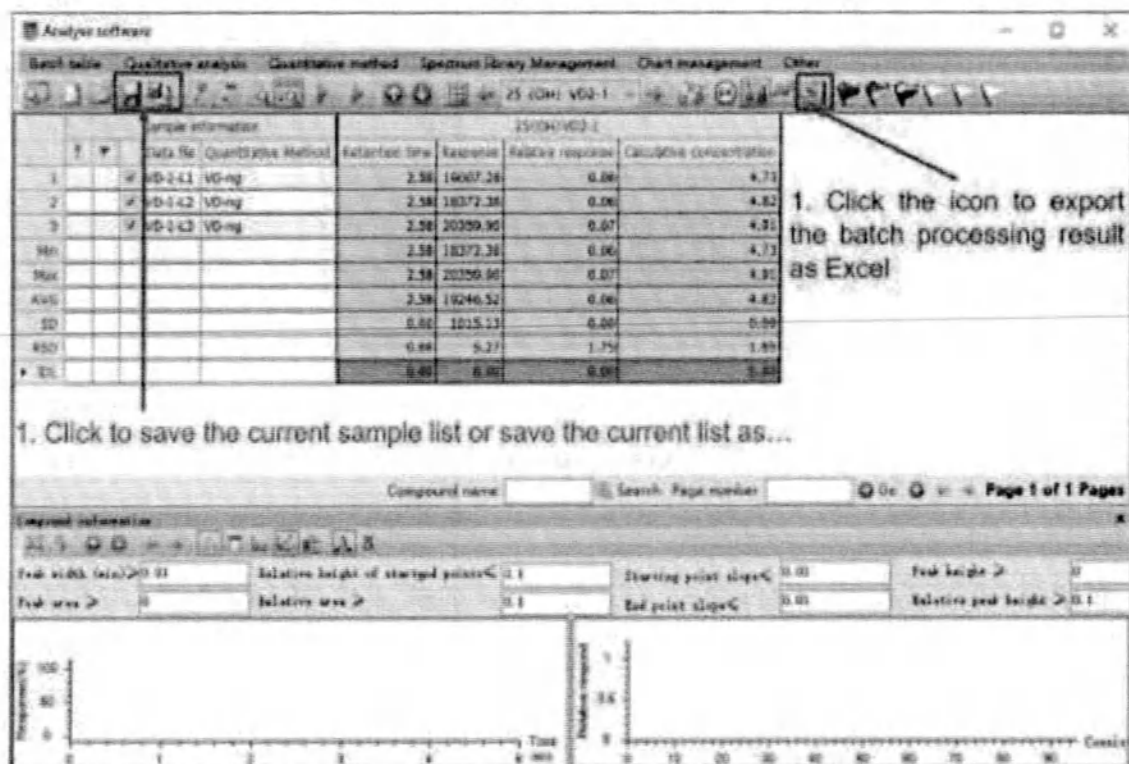


Рисунок 5.93. Интерфейс функций сохранения и экспорта результатов.

ДЛЯ РИСУНКА 5.93.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analyse software	Программное обеспечение для анализа
Batch table	Таблица серии
Qualitative analysis	Качественный анализ
Quantitative method	Количественный метод
Spectrum library management	Управление библиотекой спектров
Chart management	Управление картой
Other	Другое
Sample information	Информация об образце
Data file	Файл данных
Quantitative method	Количественный метод
Retention time	Время удержания
Response (%)	Отклик (%)
Relative response	Время удержания
Calculative concentration	Расчетная концентрация
Compound name	Наименование химического соединения
Search	Поиск
Page number	Номер страницы поиска
Page 1 of 1 pages	Страница 1 из 1 страниц
Compound information	Информация о химическом соединении
Peak width ≥ 0.01	Ширина пика $\geq 0,01$
Peak area ≥ 0	Площадь пика ≥ 0
Relative height of start-end points ≤ 0.1	Относительная высота начальной и конечной точек $\leq 0,1$
Relative area ≥ 0.1	Относительная площадь ≥ 0
Start point slope ≤ 0.01	Наклон в начальной точке $\leq 0,01$
End point slope ≤ 0.01	Наклон в конечной точке $\leq 0,01$
Peak height ≥ 0	Высота пика ≥ 0
Relative peak height ≥ 0.1	Относительная площадь пика $\geq 0,1$
Response (%)	Отклик (%)
Relative response	Относительный отклик
Time, min	Время, мин
1. Click the icon to export the batch processing result as Excel	1. Нажмите на пиктограмму, чтобы экспортировать результат обработки серии в формате Excel
1. Click to save the current sample list or save the current list as...	1. Нажмите, чтобы сохранить текущий перечень образцов или сохранить текущий перечень как...

5.12. Вывод отчета

Нажмите на иконку , появится окно Report setting («Параметры отчета»), далее выберите операцию «Выбрать» шаблон отчета, откройте «Шаблон отчета», выберите соответствующий шаблон (с суффиксом gerx) и импортируйте его. После этого выберите путь хранения отчета и введите имя отчета, далее выберите тип вывода отчета (PDF/XLX/xt), после чего выведите отчет или нажмите «Предварительный просмотр отчета», чтобы проверить, является ли отчет удовлетворительным, а затем выведите отчет (рисунки 5.94–5.95).

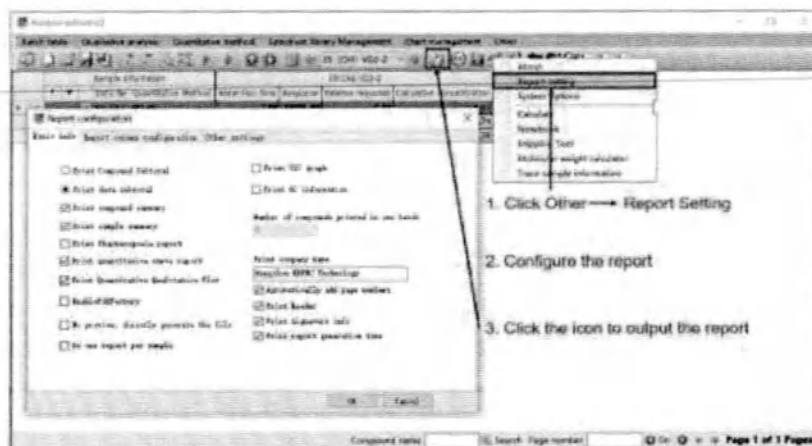


Рисунок 5.94. Интерфейс настройки вывода отчета.

ДЛЯ РИСУНКА 5.94.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analyse software	Программное обеспечение для анализа
Batch table	Таблица серии
Qualitative analysis	Качественный анализ
Quantitative method	Количественный метод
Spectrum library management	Управление библиотекой спектров
Chart management	Управление картой
Other	Другое
Sample information	Информация об образце
Data file	Файл данных
Quantitative method	Количественный метод
Retention time	Время удержания
Response (%)	Отклик (%)
Relative response	Время удержания
Calculative concentration	Расчетная концентрация
Compound name	Наименование химического соединения
Search	Поиск
Page number	Номер страницы поиска
Page 1 of 1 pages	Страница 1 из 1 страниц
Report configuration	Конфигурация отчета
Basic info	Основная информация
Report column configuration	Конфигурация столбцов отчета
Other settings	Другие настройки
Print compound subtotal	Печатать итог по химическому соединению
Print data subtotal	Печатать итог по данным
Print compound summary	Печатать краткую информацию по химическому соединению
Print sample summary	Печатать краткую информацию по образцу
Print Pharmacopoeia report	Печатать отчет по фармакопее
Print quantitative curve report	Печатать отчет о количественной кривой
Print quantitative qualitative plot	Печатать количественный и качественный отчет
Enable PdfFactory	Привести в действие PdfFactory
No preview, directly generate the file	Без предварительного просмотра, прямо генерировать файл
In one report per sample	В одном отчете на образец
Print TIC graph	Печатать график полного ионного тока
Print GC information	Печатать информацию о газовом хроматографе
Number of compounds printed in one batch	Количество химических соединений, печатаемых в одной серии
Print company name – Hangzhou EXPEC Technology	Печатать наименование компании – Ханчжоу ЭКСПЕК Текнолоджи
Automatically add page numbers	Автоматически добавлять номера страниц
Print header	Печатать заголовок
Print signature info	Печатать информацию о подписи

ДЛЯ РИСУНКА 5.94.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Print report generation time	Печатать время генерирования отчета
OK	Подтвердить
Cancel	Отменить
About	О:
Report setting	Настройка отчета
System options	Опции системы
Calculate	Рассчитать
Notebook	Блокнот
Snipping tool	Ножницы
Molecular weight calculator	Калькулятор молекулярной массы
Trace sample information	Информация о прослеживании образца
1. Click Other → Report setting	1. Нажать Другое → Настройка отчета
2. Configure the report	2. Конфигурировать отчет
3. Click the icon to output the report	3. Нажать на пиктограмму для выпуска отчета

Hangzhou EXPEC Technology		Sample report		Page 1 of 3 Pages
Data file	Sample vial number	LC sample vol.	Operator	
VD-1-L1	267	25	Inner	
VD-1-L2	268	25	Inner	
VD-1-L3	167	25	Inner	

Data file	Compound name	Retention time	Response	ISTD response	Relative response	Peak height	Calculated concentration	Concentration	Collection time	ISTD deviation
VD-1-L1	25 (OH) V D2-1	2.58	19007.28	296478.00	0.06	8174.05	4.73	ng/ml	2021-06-25 18:43	0
VD-1-L2	25 (OH) V D2-1	2.58	18372.38	283327.50	0.06	8071.40	4.82	ng/ml	2021-06-25 18:49	0
VD-1-L3	25 (OH) V D2-1	2.58	18578.71	308724.70	0.06	8225.78	4.71	ng/ml	2021-06-25 20:28	0

Рисунок 5.95. Интерфейс предварительного просмотра отчета.

ДЛЯ РИСУНКА 5.95.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Hangzhou EXPEC Technology	Ханчжоу ЭКСПЕК Текнолоджи
Data file	Файл данных
Sample vial number	Номер виалы с образцом
LC sample vol.	Объем образца для жидкостного хроматографа
Operator	Оператор
Inner	Внутренний
Compound file	Файл химического соединения
Compound name	Наименование химического соединения
Retention time	Время удержания
Response	Отклик
ISTD response	Отклик на внутренний стандарт
Relative response	Относительный отклик
Peak height	Высота пика
Calculated concentration	Расчетная концентрация
Concentration, ng/ml	Концентрация, нг/мл
Collection time	Время отбора
ISTD deviation	Отклонение от внутреннего стандарта

5.13. Журнал аудита

Журнал использования программного обеспечения можно запросить в журнале аудита, как показано на рисунке 5.96.:



Рисунок 5.96. Интерфейс журнала аудита.

ДЛЯ РИСУНКА 5.96.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
MassExpert (default) (default)	MassExpert («МассЭксперт») (по умолчанию)
User	Пользователь
Analysis	Анализ
Advance setting	Дополнительная настройка
System	Система
Advanced options	Дополнительные опции
Alarm information	Информация о сигналах тревоги
File manager	Менеджер файлов
GMP log	Журнал надлежащей производственной практики
Online/LCMSMS configuration	Онлайн/Конфигурация жидкостной хроматограф – масс-спектрометр
Help	Помощь
Open method	Открыть метод
Run sequence	Запуск последовательности
Stop sequence	Остановка последовательности
LC control	Управление жидкостным хроматографом
MS control	Управление масс-спектрометром
Vacuum control	Управление вакуумом
Real-time monitor	Монитор в реальном времени
Analysis software	Программное обеспечение для анализа
Method sequence	Последовательность метода
Real-time Chart	Карта в реальном времени
Chromatogram	Хроматограмма
Mass spectrogram	Масс-спектрограмма
Sequence run list	Список выполнения последовательности
Load sequence	Загрузить последовательность

ДЛЯ РИСУНКА 5.96.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Remove sequence	Удалить последовательность
Move up	Двигаться вверх
Move down	Двигаться вниз
Project name	Наименование проекта
Default	По умолчанию
Sequence name	Наименование последовательности
Running state	Состояние выполнения
Not running	Не выполняется
Completion time	Время завершения
Import sequence editing	Импортировать редактирование последовательности
Display settings	Отобразить настройки
Sample tray	Держатель для образцов
Data name	Наименование данных
Note	Примечание
Mass tune file	Файл настройки массы
Method file	Файл метода
LC Vial No. – 1A1	Номер вials для жидкостного хроматографа – 1A1
LC sample vol. – 0	Объем образца для жидкостного хроматографа – 0
Initial pressure	Начальное давление
Acquire data time	Время получения данных
Progress	Прогресс
Estimated time, min	Расчетное время, мин
Running time, min	Текущее время, мин
LC	Жидкостной хроматограф
MS	Масс-спектрометр
Unconnected	Не подключен
Alarm	Тревога
Monitor information	Информация монитора
Pump A pressure	Давление насоса А
Pump B pressure	Давление насоса В
Flow rate (mL/min)	Скорость потока (мл/мин)
Pump A proportion	Пропорция насоса А
Pump B ratio (%)	Соотношение насоса В (%)
Column oven temperature	Температура термостата колонок
Switch valve status	Статус переключения клапана
Sync signal	Синхронный сигнал
Stop	Стоп

Если есть связанные программные операции, они будут отображаться на этой странице.

5.14. Выключение прибора



- 1) Нажмите на иконку  в главном интерфейсе управляющего программного обеспечения, откройте интерфейс управления вакуумом и нажмите кнопку «Режим ожидания», чтобы перевести масс-спектрометр в режим ожидания;
- 2) Нажмите кнопку «Сбросить вакуум», молекулярный насос начнет снижать скорость, внутренняя часть масс-спектрометра начнет вентилироваться, и скорость молекулярного насоса постепенно уменьшится, и весь процесс займет 10–15 мин. Когда скорость молекулярного насоса ниже 50 Гц, вакуумный насос можно отключить;
- 3) Выключите хост масс-спектрометра;
- 4) Закройте управляющее программное обеспечение, затем выключите персональный компьютер;
- 5) При использовании баллона с азотом также закройте вентиль газового баллона. Если вы используете генератор азота, выключите генератор азота;
- 6) Выключите выключатель питания автосемплера, насоса бинарного ультравысокого давления и термостата колонок.



Примечание. При повседневном использовании не нажимайте кнопку «Сбросить вакуум», не отключайте основной источник питания прибора и источник газообразного азота.

6. Управление медицинским изделием для диагностики *in vitro* и настройка параметров

6.1. Модуль управления масс-спектрометром

Нажмите на иконку  в главном интерфейсе, программное обеспечение откроет интерфейс управления масс-спектрометром. В этом интерфейсе можно задавать определенные параметры прибора, выполнять настройку системы и калибровку оси масс на уровне разрешения, а также собирать масс-спектрометрические данные в режиме реального времени и оптимизировать, как показано на рисунке 6.1.

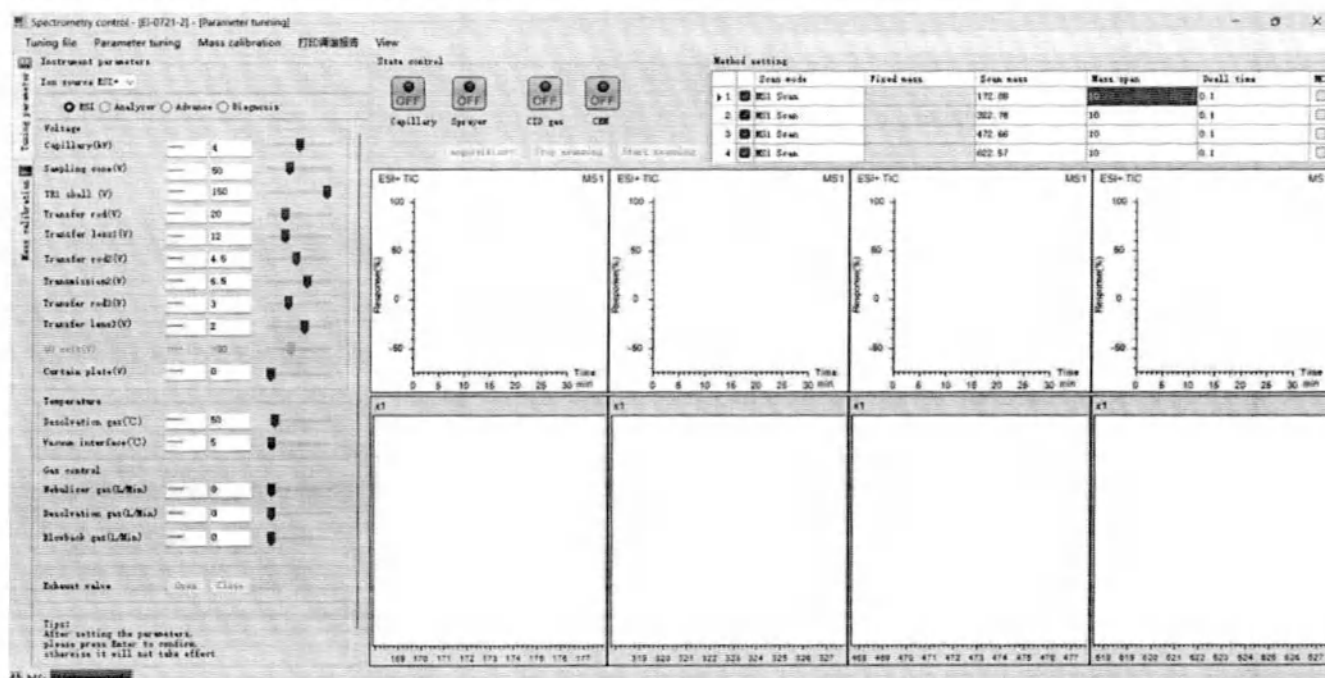


Рисунок 6.1. Интерфейс управления масс-спектрометром.

ДЛЯ РИСУНКА 6.1.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Spectrometry control (EI-0721-2)-(Parameter tuning)	Контроль спектрометрии (EI-0721-2)-(Настройка параметров)
Mass calibration	Калибровка масс
Tuning parameter	Параметр настройки
Tuning file	Файл настройки
Parameter tuning	Настройка параметров
View	Вид
Instrument parameter	Параметр инструмента
Ion source ESI+	Источник ионов ESI+
ESI	Ионизация электроспреем
Analyzer	Анализатор
Advance	Дополнительно
Diagnosis	Диагностика
Voltage	Напряжение
Capillary (kV)	Капиллярный (кВ)
Sampling cone (V)	Конус для отбора проб (В)
TR1 shell (V)	Оболочка TR1 (В)
Transfer rod 1/2/3 (V)	Передающий стержень 1/2/3 (В)
Transfer lens 1/2/3 (V)	Передающая линза 1/2/3 (В)
Transmission 2 (V)	Трансмиссия 2 (В)
QO exit (V)	Выход QO (В)
Curtain plate (V)	Напряжение на дефлекторе (В)
Temperature	Температура
Desolvation gas (°C)	Газ десольватации (°C)
Vacuum interface (°C)	Вакуумный интерфейс (°C)
Gas control	Управление газом
Nebulizer gas (L/min)	Распыляющий газ (л/мин)
Desolvation gas (L/min)	Газ десольватации (л/мин)

ДЛЯ РИСУНКА 6.1.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Blowback gas (L/min)	Газ обратной продувки (л/мин)
Exhaust valve	Выпускной клапан
Open	Открыть
Close	Заккрыть
Tips: After setting the parameters, please press Enter to confirm, otherwise it will not take effect.	Подсказка: После настройки параметров нажмите «Ввод», чтобы подтвердить, иначе они не вступят в действие
MS: Unconnected	Масс-спектрометр: Не подключен
OFF	Отключено
Capillary	Капиллярный
Sprayer	Распылитель
CID gas	Газ диссоциации, вызванной столкновением
Acquisition	Получение данных
Stop scanning	Остановить сканирование
Start scanning	Начать сканирование
Method setting	Настройка метода
Scan mode	Режим сканирования
MS1 Scan	Скан MS1
Fixed mass	Фиксированная масса
Scan mass	Сканируемая масса
Mass span	Диапазон масс
Dwell time	Минимальное время измерения
MCA	Многоканальный анализатор
Response (%)	Отклик (%)
Time, min	Время, мин
ESI+ TIC	Ионизация электроспреем + полный ионный ток

В интерфейсе управления масс-спектрометром параметры масс-спектрометра делятся на два типа: источник ионов и анализатор. В параметрах источника ионов можно контролировать высокое напряжение капилляра, конус для отбора проб, наружную стенку трансмиссионного стержня 1, трансмиссионный стержень 1, трансмиссионный стержень 2, трансмиссионный стержень 3, передающую линзу 1, передающую линзу 2, передающую линзу 3, напряжение на пред-стержне MS1 и напряжение перегородки можно оптимизировать и регулировать. Температуру газа десольватации и вакуумного интерфейса, а также скорость потока газа-распылителя, газа десольватации и газа обратной промывки можно оптимизировать. В параметрах анализатора можно настроить разрешение MS1 и MS2, энергию ионов (эВ), напряжение на пред-стержне, а также отрегулировать входное напряжение ячейки столкновений, энергию столкновения и выходное напряжение, поток газа столкновений. Входное напряжение детектора, напряжение множителя и напряжение отклонения также можно регулировать.



Примечание. Если операция автонастройки не удалась, запишите аварийное сообщение и свяжитесь с сервисным инженером.

6.2. Модуль управления хроматографией



Нажмите на иконку  в главном интерфейсе, программное обеспечение откроет интерфейс управления хроматографом. В этом интерфейсе можно задавать параметры жидкостного хроматографа (LC) и напрямую управлять насосом бинарным ультравысокого давления, автосемплером и термостатом колонок (рисунок 6.2.).

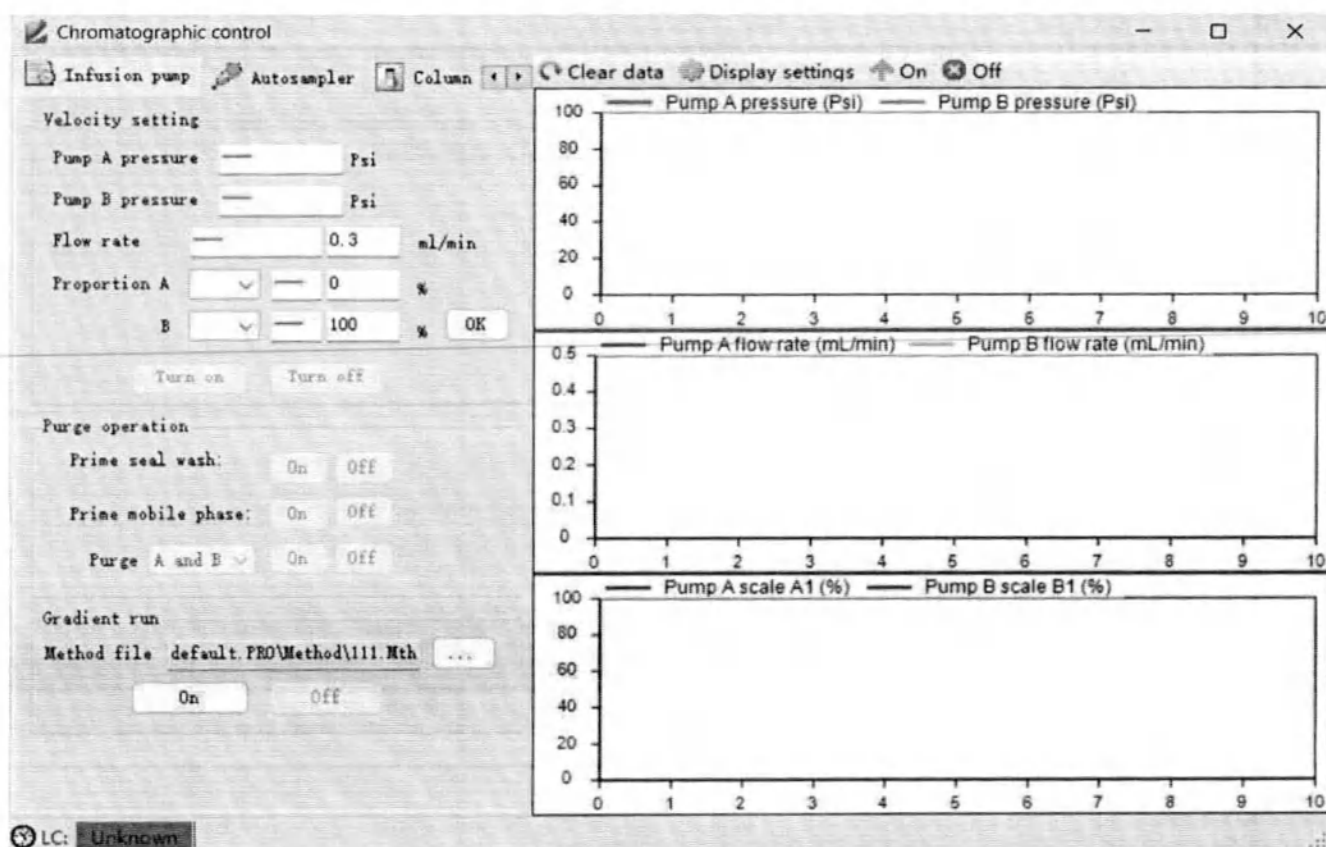


Рисунок 6.2. Интерфейс управления хроматографом (управление бинарным насосом высокого давления).

ДЛЯ РИСУНКА 6.2.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Chromatographic control	Управление хроматографией
Infusion pump	Инфузионный насос
Autosampler	Автосемплер
Column	Колонка
Clear data	Удалить данные
Display settings	Настройки дисплея
On/ Off	Включено/ Выключено
Velocity setting	Настройка скорости
Pump A pressure, psi	Давление насоса А, фунтов/ кв. дюйм
Pump B pressure, psi	Давление насоса В, фунтов/ кв. дюйм
Pump A flow rate (mL/min)	Скорость потока насоса А (мл/мин)
Pump B flow rate (mL/min)	Скорость потока насоса В (мл/мин)
Pump A scale A1 (%)	Соотношение насоса А, А1 (%)
Pump B scale B1 (%)	Соотношение насоса В, В1 (%)
Flow rate, mL/min	Скорость потока, мл/мин
Proportion A, B (%)	Пропорция А, В (%)
Turn on / Turn off	Включить/ Выключить
Purge operation	Операция продувки
Prime seal wash, On/Off	Первичная промывка уплотнения, Вкл./Выкл.
Prime mobile phase, On/ Off	Первичная мобильная фаза, Вкл./Выкл.
Purge A and B, On/ Off	Промывка А и В, Вкл./Выкл.
Gradient run	Градиентный поток
Method file default.PRO/ Method/111.Mth	Файл метода default.PRO/ Method/111.Mth
LC: Unknown	Жидкостная хроматография: Неизвестно

Нажмите клавишу Enter («Ввод») в соответствующем поле ввода, чтобы установить скорость потока и соотношение фаз, далее нажмите соответствующую кнопку запуска, чтобы выполнить операции по очистке уплотнения, подвижной фазы и очистке. Градиентные методы можно выполнить, импортировав файл метода и нажав «Выполнить» (рисунок 6.3.).

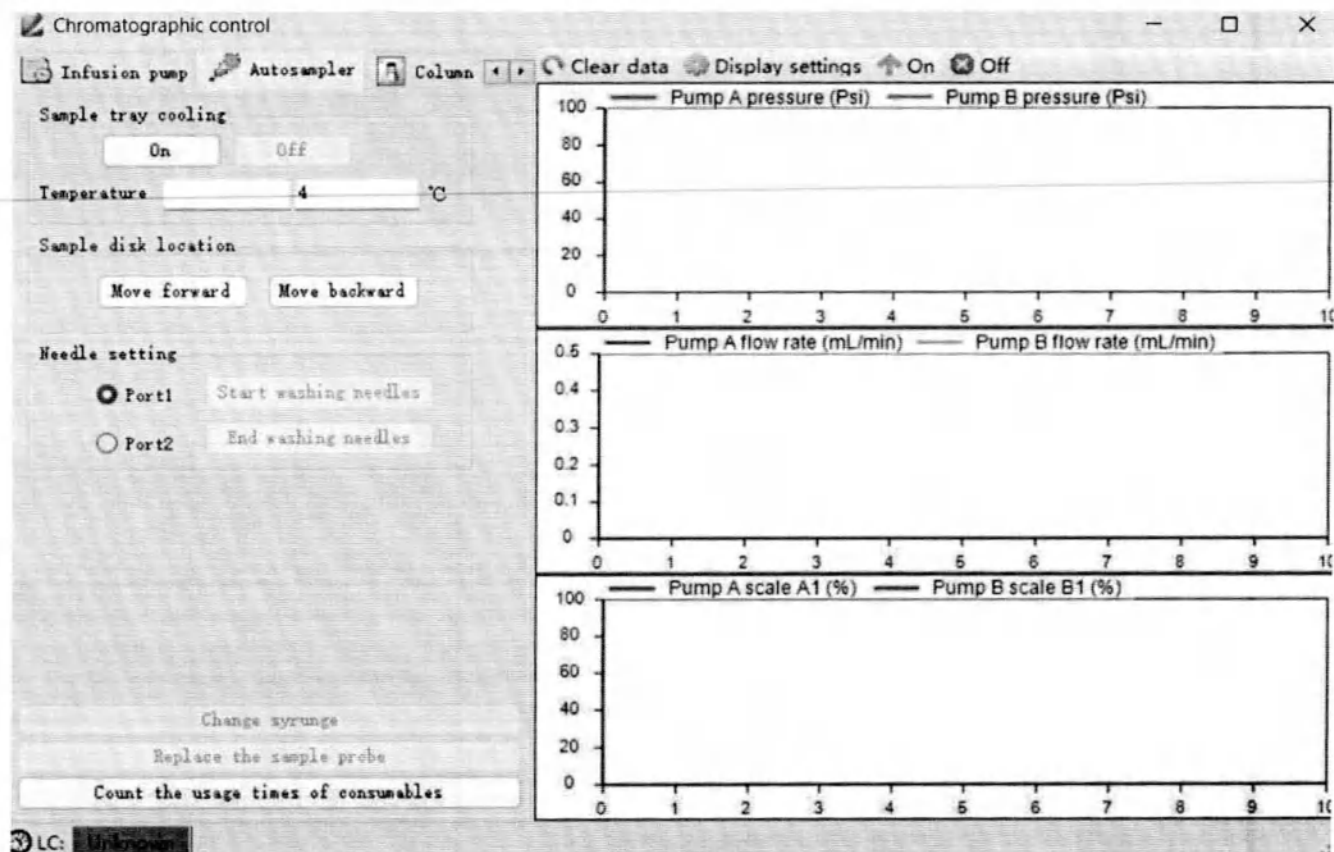


Рисунок 6.3. Интерфейс управления хроматографом (управление автосемплером).

ДЛЯ РИСУНКА 6.3.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Chromatographic control	Управление хроматографией
Infusion pump	Инфузионный насос
Autosampler	Автосемплер
Column	Колонка
Clear data	Удалить данные
Display settings	Настройки дисплея
On/ Off	Включено/ Выключено
Sample tray cooling On/Off	Охлаждение держателя для образцов Вкл./Выкл.
Temperature, °C	Температура, °C
Sample disk location	Расположение диска с образцами
Move forward	Двигать вперед
Move backward	Двигать назад
Needle setting	Настройка иглы
Port 1 – Start washing needles	Порт 1 – Начать промывку игл
Port 2 – End washing needles	Порт 2 – Закончить промывку игл
Change syringe	Заменить шприц
Replace the sample probe	Заменить зонд для отбора проб
Count the usage times of consumables	Подсчет количества использований расходных компонентов
Pump A pressure, psi	Давление насоса А, фунтов/ кв. дюйм
Pump B pressure, psi	Давление насоса В, фунтов/ кв. дюйм
Pump A flow rate (mL/min)	Скорость потока насоса А (мл/мин)
Pump B flow rate (mL/min)	Скорость потока насоса В (мл/мин)
Pump A scale A1 (%)	Соотношение насоса А, А1 (%)
Pump B scale B1 (%)	Соотношение насоса В, В1 (%)
LC: Unknown	Жидкостная хроматография: Неизвестно

Для автосемплеров с встроенной опцией охлаждения держателя для образцов температуру держателя для образцов можно регулировать, а положение держателя для образцов можно перемещать. Также может быть выполнена операция промывки иглы выбранного порта (рисунок 6.4.).

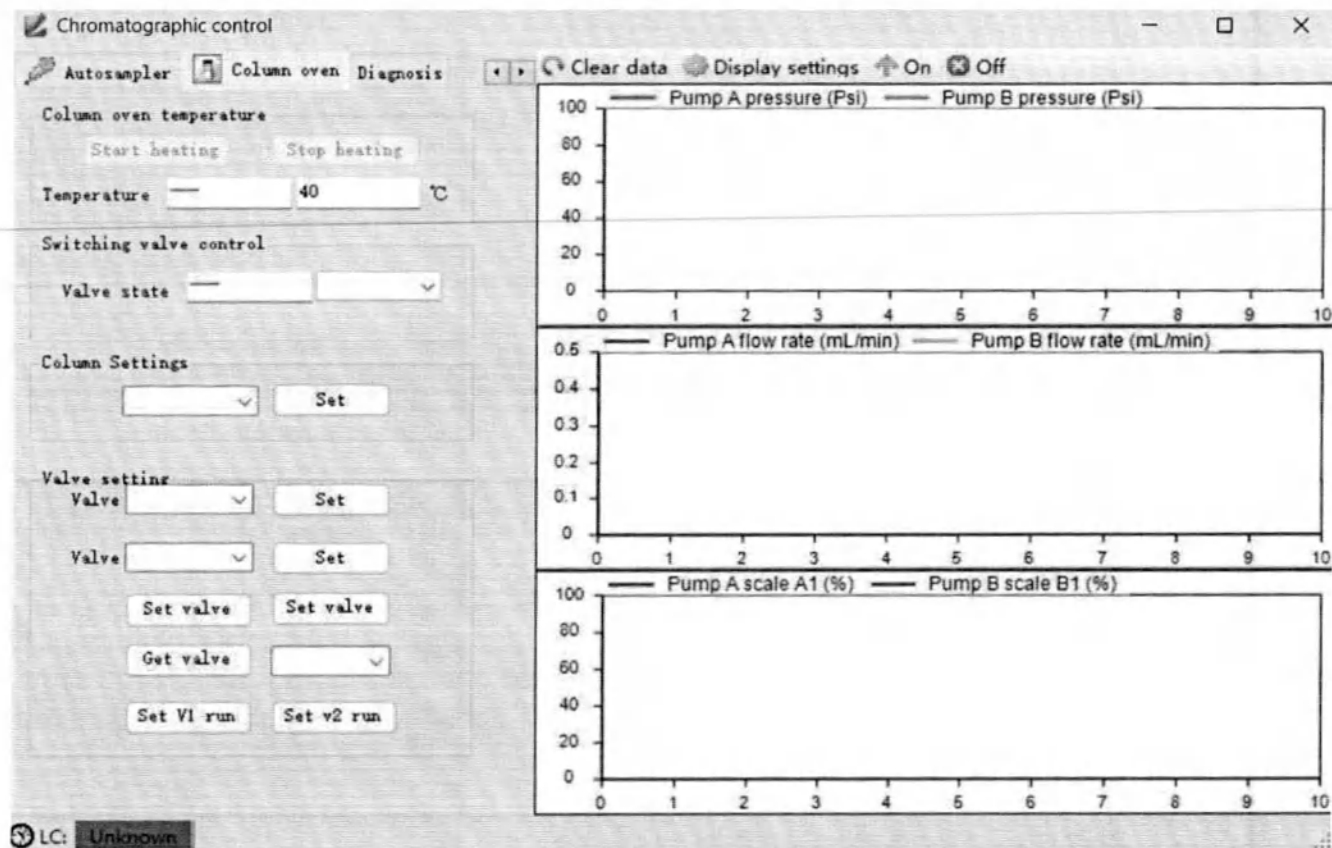


Рисунок 6.4. Интерфейс управления хроматографом (управление термостатом колонки).

ДЛЯ РИСУНКА 6.4.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Chromatographic control	Управление хроматографией
Autosampler	Автосемплер
Column oven	Колонка
Diagnosis	Диагностика
Clear data	Удалить данные
Display settings	Настройки дисплея
On/Off	Включено/ Выключено
Column oven temperature	Температура термостата колонок
Start heating	Начать нагрев
Stop heating	Остановить нагрев
Temperature, °C	Температура, °C
Switching valve control	Управление включением клапана
Valve state	Состояние клапана
Column settings	Настройки колонки
Set	Настроен
Valve setting	Настройка клапана
Valve set	Клапан настроен
Set valve	Настроить клапан
Get valve	Использовать клапан
Set V1 run	Настроен ход V1
Set V2 run	Настроен ход V2
Pump A pressure, psi	Давление насоса А, фунтов/ кв. дюйм
Pump B pressure, psi	Давление насоса В, фунтов/ кв. дюйм
Pump A flow rate (mL/min)	Скорость потока насоса А (мл/мин)
Pump B flow rate (mL/min)	Скорость потока насоса В (мл/мин)
Pump A scale A1 (%)	Соотношение насоса А, А1 (%)
Pump B scale B1 (%)	Соотношение насоса В, В1 (%)
LC: Unknown	Жидкостная хроматография: Неизвестно

Установка температуры: нажмите, чтобы начать нагрев, и термостат колонки нагреется до заданной температуры; нажмите, чтобы выключить нагрев, термостат перестанет нагреваться (рисунок 6.5.).

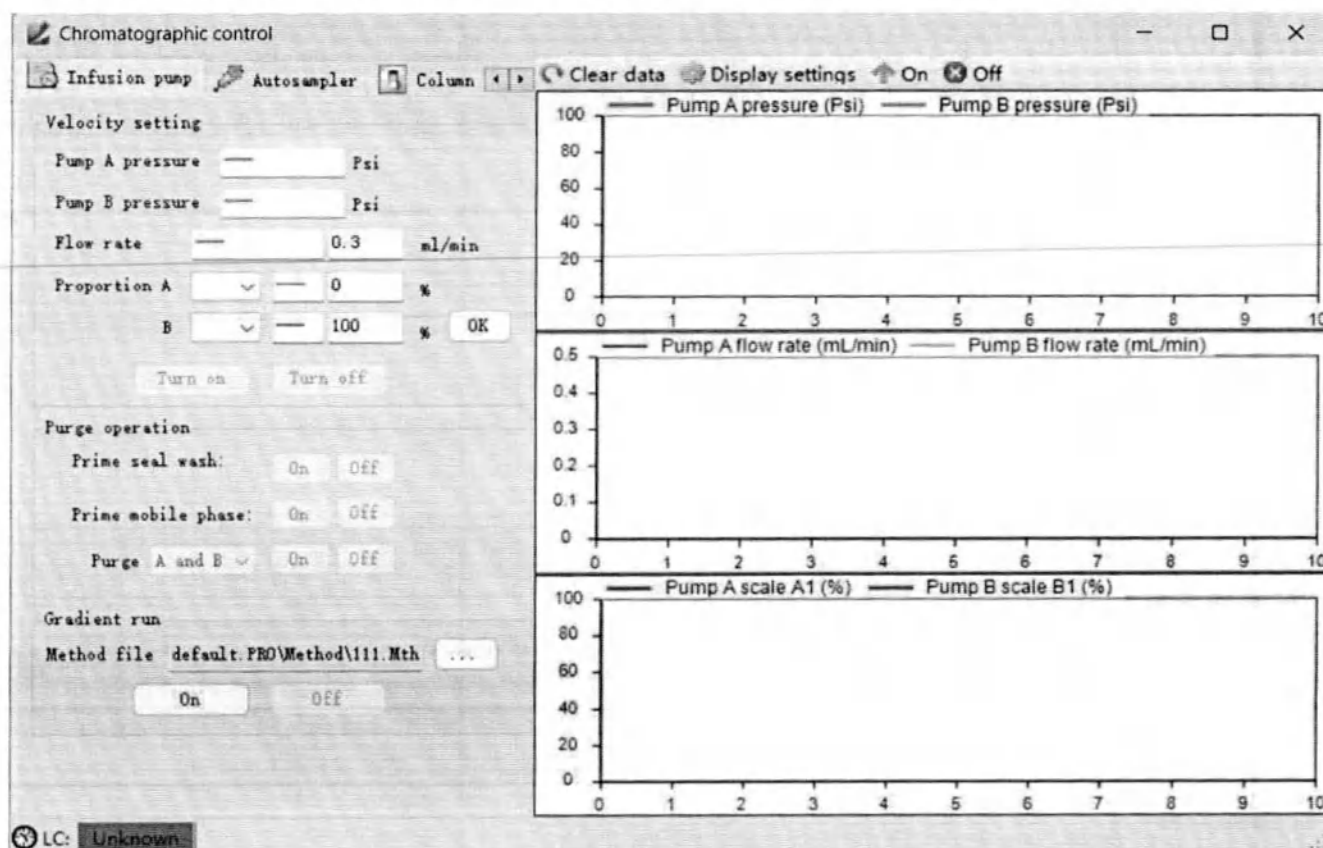


Рисунок 6.5. Интерфейс управления хроматографом (диагностика).

ДЛЯ РИСУНКА 6.5.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Chromatographic control	Управление хроматографией
Infusion pump	Инфузионный насос
Autosampler	Автосемплер
Column	Колонка
Clear data	Удалить данные
Display settings	Настройки дисплея
On/Off	Включено/ Выключено
Velocity setting	Настройка скорости
Pump A pressure, psi	Давление насоса А, фунтов/ кв. дюйм
Pump B pressure, psi	Давление насоса В, фунтов/ кв. дюйм
Pump A flow rate (mL/min)	Скорость потока насоса А (мл/мин)
Pump B flow rate (mL/min)	Скорость потока насоса В (мл/мин)
Pump A scale A1 (%)	Соотношение насоса А, А1 (%)
Pump B scale B1 (%)	Соотношение насоса В, В1 (%)
Flow rate, mL/min	Скорость потока, мл/мин
Proportion A, B (%)	Пропорция А, В (%)
Turn on/Turn off	Включить/Выключить
Purge operation	Операция продувки
Prime seal wash, On/Off	Первичная промывка уплотнения, Вкл./Выкл.
Prime mobile phase, On/Off	Первичная мобильная фаза, Вкл./Выкл.
Purge A and B, On/Off	Промывка А и В, Вкл./Выкл.
Gradient run	Градиентный поток
Method file default.PRO/ Method/111.Mth	Файл метода default.PRO/ Method/111.Mth
LC: Unknown	Жидкостная хроматография: Неизвестно

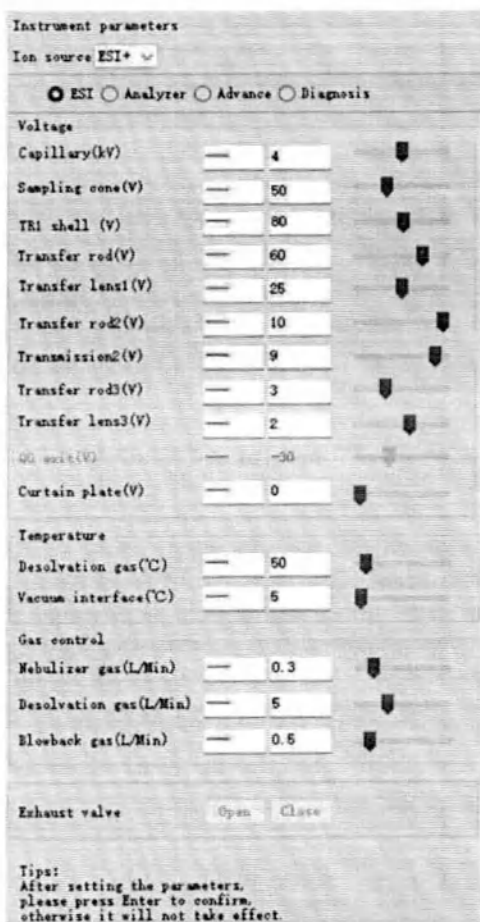
Сброс ошибки модуля: нажмите соответствующую кнопку, чтобы сбросить аварийный сигнал насоса бинарного ультравысокого давления, автосемплера и термостата колонок и вывести его из состояния аварийного сигнала.

6.3. Настройка параметров режима сканирования MS и MSMS

Масс-спектрометрия имеет свои специфические условия оптимизации для конкретных образцов. Это ключ к пониманию характеристик образца, как выбрать источник ионизации, подвижную фазу и добавки подвижной фазы, чтобы образец можно было ионизировать. Общие параметры настройки можно использовать для анализа большинства образцов. Большинство параметров не нуждаются в настройке после их установки. Настройка мало влияет на сигнал. Для некоторых образцов, особенно в случае чрезвычайно низкого содержания, необходимо пройти настройку для оптимизации оптимальных параметров. На примере стандартного раствора резерпина с концентрацией 100 пг/мкл показано, как выполнять настройку масс-спектрометра в режиме сканирования MS («МС») или MSMS («МС-МС»).

6.3.1. Режим сканирования MS («МС»)

- 1) Дважды нажмите на иконку  в главном интерфейсе управляющего программного обеспечения и откройте интерфейс управления вакуумом, нажмите кнопку «Возобновить», после этого масс-спектрометр будет находиться в рабочем состоянии, которое отображается как «В режиме ожидания».
- 2) Нажмите на иконку  в главном интерфейсе управляющего программного обеспечения и откройте интерфейс управления масс-спектрометром.
- 3) Соблюдайте параметры мониторинга, чтобы убедиться, что масс-спектрометр находится в рабочем состоянии (данные на рисунке ниже отображаются при нормальных условиях), и с помощью шприца введите раствор резерпина (1 пг/мкл) в масс-спектрометр через шприцевой насос со скоростью потока 20–30 мкл/мин. Проверьте, что объем иглы для ввода автосемплера достаточен и может непрерывно вводиться в течение более 10 минут (рисунок 6.6.).



The screenshot shows the 'Instrument parameters' window. At the top, 'Ion source' is set to 'ESI+'. Below this, there are radio buttons for 'ESI' (selected), 'Analyzer', 'Advance', and 'Diagnosis'. The 'Voltage' section includes settings for Capillary (4 kV), Sampling cone (50 V), TR1 shell (80 V), Transfer rod (60 V), Transfer lens1 (25 V), Transfer rod2 (10 V), Transmission2 (9 V), Transfer rod3 (3 V), Transfer lens3 (2 V), QO exit (-30 V), and Curtain plate (0 V). The 'Temperature' section includes Desolvation gas (50 °C) and Vacuum interface (5 °C). The 'Gas control' section includes Nebulizer gas (0.3 L/min), Desolvation gas (5 L/min), and Blowback gas (0.5 L/min). At the bottom, there is an 'Exhaust valve' control with 'Open' and 'Close' buttons. A tip at the bottom left states: 'Tip: After setting the parameters, please press Enter to confirm, otherwise it will not take effect.'

ДЛЯ РИСУНКА 6.6.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Instrument parameters	Параметры инструмента
Ion source ESI+	Источник ионов ESI+
ESI	Ионизация электроспреем
Analyzer	Анализатор
Advance	Дополнительно
Diagnosis	Диагностика
Voltage	Напряжение
Capillary (kV)	Капиллярный (кВ)
Sampling cone (V)	Конус для отбора проб (В)
TR1 shell (V)	Оболочка TR1 (В)
Transfer rod 1/2/3 (V)	Трансмиссионный стержень 1/2/3 (В)
Transfer lens 1/2/3 (V)	Трансмиссионная линза 1/2/3 (В)
Transmission 2 (V)	Трансмиссия 2 (В)
QO exit (V)	Выход QO (В)
Curtain plate (V)	Напряжение на дефлекторе (В)
Temperature	Температура
Desolvation gas (°C)	Газ десольватации (°C)
Vacuum interface (°C)	Вакуумный интерфейс (°C)
Gas control	Управление газом
Nebulizer gas (L/min)	Распыляющий газ (л/мин)
Desolvation gas (L/min)	Газ десольватации (л/мин)
Blowback gas (L/min)	Газ обратной продувки (л/мин)
Exhaust valve	Выпускной клапан
Open	Открыть
Close	Закрыть
Tips: After setting the parameters, please press Enter to confirm, otherwise it will not take effect.	Подсказка: После настройки параметров нажмите «Ввод», чтобы подтвердить, иначе они не вступят в действие

Рисунок 6.6. Настройка параметров режима сканирования MS («МС»).

- 4) На странице настройки параметров установите параметры масс-спектрометра в части источника ионов во время его настройки и сохраните их. В таблице 12.1. приведены рекомендуемые параметры масс-спектрометра в режиме положительных ионов.

Таблица 12.1. Рекомендуемые параметры масс-спектрометра в режиме положительных ионов

Секция источника ионов	Установка значения	Секция источника ионов	Установка значения
Капилляр высокого напряжения (кВ)	5,5	Передающая линза 3 (В)	0,5
Напряжение на конусе для отбора проб (В)	50	Предварительное напряжение MS1 (В)	18
Наружная стенка трансмиссионного стержня 1 (В)	80	Напряжение перегородки (В)	800
Трансмиссионный стержень 1 (В)	15	Температура десольватации (°C)	200
Передающая линза 1 (В)	12	Температура интерфейса вакуума (°C)	110
Трансмиссионный стержень 1 (В)	8	Распыляющий газ (л/мин)	0,1
Передающая линза 2 (В)	7	Газ десольватации (л/мин)	3
Трансмиссионный стержень 3 (В)	0,8	Газ обратной продувки (л/мин)	2

- 5) На странице анализатора выберите режим сканирования MS («МС»), и программа автоматически восстановит параметры по умолчанию в режиме сканирования MS («МС»).
- 6) Проверьте строку в окне Method setting («Настройка метода») и установите режим сканирования MS2 Scan («Скан МС2»), качество сканирования – 609, Mass span («Диапазон масс») – 10, Dwell time («Минимальное время измерения») – 0,1 с, Scan span («Диапазон сканирования») – от 604 а.е.м. до 614 а.е.м. [(609±5) а.е.м.], скорость сканирования – 100 а.е.м./с, затем нажмите кнопку Start scanning «Начать сканирование» (рисунок 6.7.).

	Scan mode	Fixed mass	Scan mass	Mass span	Dwell time	MCA
1	☒ MS2 Scan		172	10	0.1	☐
2	☐ MS2 Scan		322	60	0.1	☐
3	☐ MS2 Scan		472	60	0.1	☐
4	☐ MS2 Scan		622	60	0.1	☐

Рисунок 6.7. Настройки окна сканирования режима сканирования MS («МС»).

ДЛЯ РИСУНКА 6.7.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Scan mode	Режим сканирования
MS2 Scan	Скан MS2
Fixed mass	Фиксированная масса
Scan mass	Сканируемая масса
Mass span	Диапазон масс
Dwell time	Минимальное время измерения
MCA	Многоканальный анализатор *

- 7) В контекстном меню в окне спектра выберите «Показать спектр ТИС». При регулировке положения распылительного сопла ESI и длины выдвижения капилляра (по умолчанию 0,5–1,0 мм) интенсивность сигнала пика масс-спектра 609 становится больше.
- 8) Отрегулируйте высокое напряжение в капилляре, конус для отбора проб, наружную стенку стержня переноса 1, стержень переноса 1, линзу переноса 1, стержень переноса 1, линзу переноса 2, стержень переноса 3, линзу переноса 3, напряжение пред-стержне MS1, напряжение перегородки, температуру десольватирующего газа, температуру вакуумного интерфейса, поток распыляющего газа, поток десольватирующего газа и поток газа обратной промывки для увеличения интенсивности сигнала пика 609.
- 9) Отрегулируйте интенсивность сигнала и разрешение резерпина, отрегулировав низкое (LM) и высокое массовое разрешение (HM) MS1 и энергию ионов, если это необходимо.
- 10) Сохраните этот файл настройки в качестве исходных параметров для последующих режимов сканирования MS («МС»).

6.3.2. Режим сканирования MSMS (MC-MC)

- 1) Используя тот же метод, сначала подготовьтесь к настройке в соответствии с шагами 1–4 в п.6.3.1, после чего выберите режим сканирования MSMS («МС–МС») на странице анализатора, и программа автоматически вызовет параметры по умолчанию в режиме сканирования MSMS («МС–МС»), как показано на рисунке 6.8.

Instrument parameters
Ion source ESI+

☐ ESI ☒ Analyzer ☐ Advance ☐ Diagnosis

MS1

Low mass resolution 144

High mass resolution 194

Ion energy (eV) 0

Pre-pole voltage (V) 15

Scanning mode: ☐ MC ☒ MSMS

CID cell

Entrance voltage (V) 3

Collision energy (eV) 45

collision energy gradient Enabled

Exit voltage (V) 0

Collision gas (mL/Min) 0.4

CID cell (Torr)

MS2

Pre-pole voltage (V) 10

Low mass resolution 150

High mass resolution 150

Ion energy (eV) 2

CEM

Entrance voltage (V) 6000

Deflection voltage (V) -350

CEM voltage (V) 2400

MS1DC K 0 B 0

MS2DC K 0 B 0

ДЛЯ РИСУНКА 6.8.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Instrument parameters	Параметры инструмента
Ion source ESI+	Источник ионов ESI+
ESI	Ионизация электроспреем
Analyzer	Анализатор
Advance	Дополнительно
Diagnosis	Диагностика
Low mass resolution	Низкое массовое разрешение
High mass resolution	Высокое массовое разрешение
Ion energy (eV)	Энергия ионов (эВ)
Pre-pole voltage (V)	Предполюсное напряжение (В)
Scanning mode: MS/MSMS	Режим сканирования: MS/MSMS
CID cell	Ячейка CID (диссоциации, вызванной столкновением)
Entrance voltage (V)	Напряжение на входе (В)
Collision energy (eV)	Энергия столкновений (эВ)
Collision energy gradient	Градиент энергии столкновений
Exit voltage (V)	Напряжение на выходе (В)
Collision gas (mL/min)	Газ столкновений (мл/мин)
CID cell (Torr)	Ячейка CID (диссоциации, вызванной столкновением) (Торр)
Pre-pole voltage (V)	Предполюсное напряжение (В)
Low mass resolution	Низкое массовое разрешение
High mass resolution	Высокое массовое разрешение
Ion energy (eV)	Энергия ионов (эВ)
Entrance voltage (V)	Напряжение на входе (В)
Deflection voltage (V)	Отклоняющее напряжение (В)
CEM voltage (V)	Напряжение CEM (В)
MS1DC	—
MS2DC	—

Рисунок 6.8. Настройки режима сканирования MSMS («MC–MC»).

- Включите переключатель газа столкновений, установите поток газа столкновений на 0,2–0,3 мл/мин, подождите около 10 с, после этого давление камере столкновений стабилизируется на уровне примерно $4\text{E-}3$ Торр (рисунок 6.9.).

Scanning mode: ☐ MS ☒ MSMS

CID cell

Entrance voltage (V) 3

Collision energy (eV) 45

collision energy gradient Enabled

Exit voltage (V) 0

Collision gas (mL/Min) 0.4

CID cell (Torr)

Scan mode switch
Scan mode switching

Collision gas flow setup
Collision gas flow settings

Рисунок 6.9. Настройки потока газа столкновений.

ДЛЯ РИСУНКА 6.9.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Scanning mode: MS/MSMS	Режим сканирования: MS/MSMS
CID cell	Ячейка CID (диссоциации, вызванной столкновением)
Entrance voltage (V)	Напряжение на входе (В)

ДЛЯ РИСУНКА 6.9.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Collision energy (eV)	Энергия столкновений (эВ)
Collision energy gradient	Градиент энергии столкновений
Exit voltage (V)	Напряжение на выходе (В)
Collision gas (mL/min)	Газ столкновений (мл/мин)
CID cell (Torr)	Ячейка CID (диссоциации, вызванной столкновением) (Торр)
Scan mode switch	Включить режим сканирования
Scan mode switching	Включение режима сканирования
Collision gas flow setup	Настройка потока газа столкновений
Collision gas flow settings	Параметры потока газа столкновений

- 3) Проверьте строку в окне Method setting («Настройка метода» и установите режим сканирования – Product ion («Ион-продукт»), Fixed mass («Фиксированная масса») – 609, Product ion («Ион-продукт») – 609, Scan mass («Сканируемая масса») – 192, Mass span («Диапазон масс») – 10, Scan span («Диапазон сканирования») – от 187 а.е.м. до 197 а.е.м. [(192±5) а.е.м.], Dwell time («Минимальное время измерения») – 0,1, затем нажмите кнопку Start scanning («Начать сканирование») (рисунок 6.10.).

Method setting						
	Scan mode	Fixed mass	Scan mass	Mass span	Dwell time	MCA
1	☒ Product ion	609	192	10	0.1	☐
2	☐ MS2 Scan		322	60	0.1	☐
3	☐ MS2 Scan		472	60	0.1	☐
4	☐ MS2 Scan		622	60	0.1	☐

Рисунок 6.10. Настройки окна сканирования режима сканирования MSMS («МС–МС»).

ДЛЯ РИСУНКА 6.10.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Method setting	Настройка метода
Scan mode	Режим сканирования
Product ion	Ион-продукт
MS2 Scan	Сканирование MS2
Fixed mass	Фиксированная масса
Scan mass	Сканируемая масса
Mass span	Диапазон масс
Dwell time	Минимальное время измерения
MCA	Многоканальный анализатор

- 4) Отрегулируйте энергию столкновений ячейки столкновений и напряжение на пред-стержне MS2, чтобы увеличить интенсивность сигнала пика 192. При необходимости отрегулируйте низкое (LM) и высокое массовое разрешение (HM) MS2, а также энергию ионов, чтобы отрегулировать интенсивность сигнала и разрешение пика резерпина 192, как показано на рисунке 6.11.

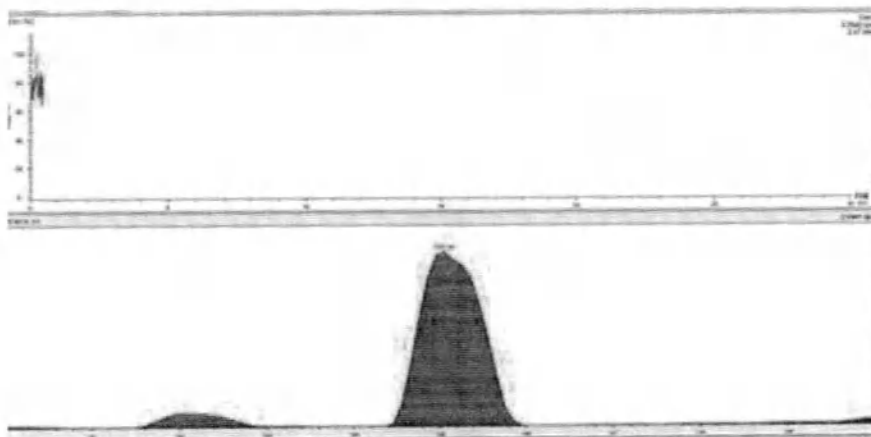


Рисунок 6.11. Масс-спектр в режиме Product ion («Ион-продукт»).

- 5) Сохраните файл настройки в качестве исходных параметров в режиме сканирования Daughter Scan («Сканирование дочерних ионов»).
- 6) Проверьте строку в окне «Настройка метода» и установите режим сканирования Parents Scan («Сканирование ионов-предшественников»), Fixed mass («Фиксированная масса») – 192, Product ion («Ион-продукт») – 609, Scan mass («Сканируемая масса») – 609, Mass span («Диапазон масс») – 10, Scan span («Диапазон сканирования») – от 604 а.е.м. до 614 а.е.м. [(609±5) а.е.м.], Dwell time («Минимальное время измерения») – 0,1 с, затем нажмите кнопку Start scanning «Начать сканирование».
- 7) Отрегулируйте энергию столкновений ячейки столкновений и напряжение на пред-стержне MS2, чтобы увеличить интенсивность сигнала пика 609. При необходимости отрегулируйте низкое (LM) и высокое массовое разрешение (HM) MS2, а также энергию ионов, чтобы отрегулировать интенсивность сигнала и разрешение пика резерпина 609, как показано на рисунке 6.12.

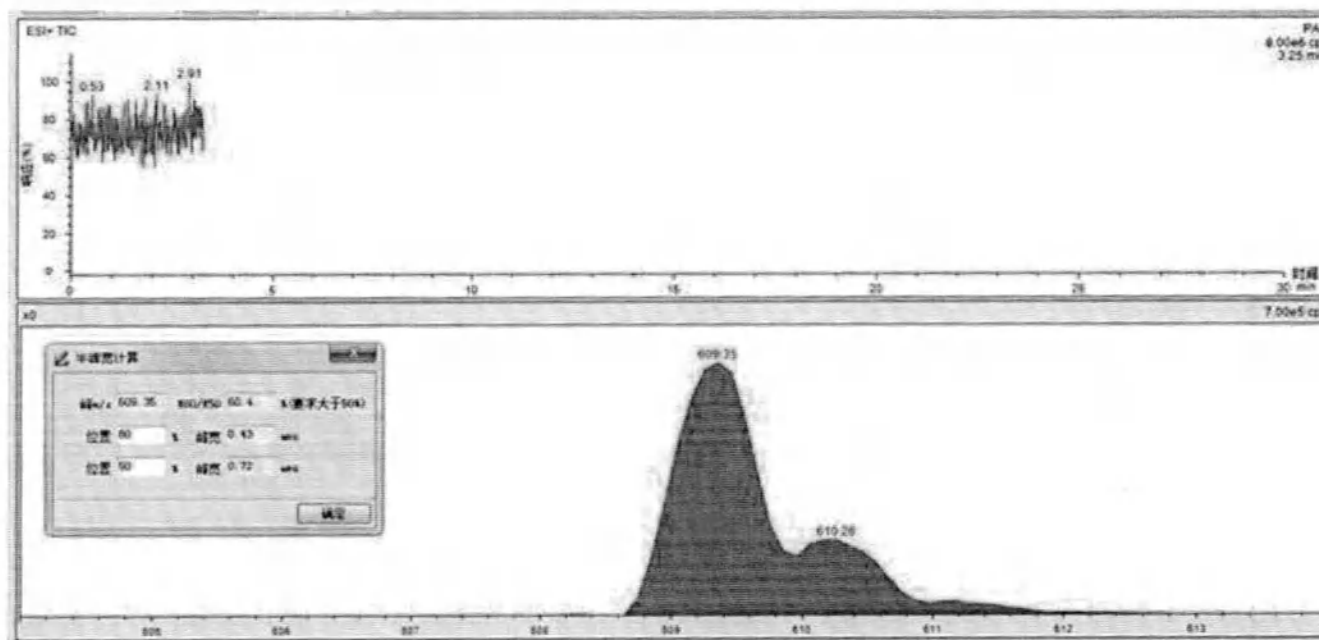


Рисунок 6.12. Режим сканирования Parents Scan («Сканирование ионов-предшественников») масс-спектра.

- 8) Сохраните файл настройки в качестве исходных параметров в режиме сканирования Parents Scan («Сканирование ионов-предшественников»).
- 9) Метод настройки параметров сканирования нейтральных потерь аналогичен двум вышеуказанным методам.

6.4. Оптимизация параметров MRM (мониторинга множественных реакций)

Оптимизация параметров составного MRM разделена на три части:

1. Найдите ион-продукт соединения в режиме сканирования MS1 и определите его точную массу и оптимальное напряжение на конусе.
2. В режиме сканирования Daughter Scan («Сканирование дочерних ионов») выберите 2 иона-продукта, образующихся в результате фрагментации родительского иона, с наибольшим значением массы и определите их точные массовые числа.
3. В режиме MRM (мониторинга множественных реакций) отрегулируйте энергию столкновений, чтобы оптимизировать интенсивность отклика ионов-продукта.
В зависимости от сложности ионизации соединения рекомендуемый диапазон концентраций составляет от 0,5 мкг/мл до 5 мкг/мл.

На примере резерпина проводится оптимизация параметров MRM в режиме положительных ионов ESI, который также применим к режиму отрицательных ионов ESI:

- 1) Процесс оптимизации требует использования насоса бинарного ультравысокого давления и автосемплера. Рекомендуется использовать двустороннее или более короткое соединение хроматографической колонки между жидкостным хроматографом и масс-спектрометром, что может повысить скорость оптимизации.

Концентрация стандартного раствора резерпина – 100 нг/мл, режим сканирования масс-спектрометра – сканирование MS1, диапазон сканирования – от 400 а.е.м. до 800 а.е.м., время сканирования – 1 с (диапазон сканирования определяется в соответствии с молекулярной массой оптимизированного соединения: в данном примере молекулярная масса резерпина составляет 609) (рисунок 6.13.).

	Compound name	Begin mass	End mass	Retention time	Cone voltage	Resolution
► 1	reserpine	400	800	1	40	Unit

Рисунок 6.13. Настройки оптимизации параметров MRM (мониторинга множественных реакций).

ДЛЯ РИСУНКА 6.13.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Compound name	Наименование химического соединения
Begin mass	Начальная масса
End mass	Конечная масса
Retention time	Время сканирования
Cone voltage	Напряжение на конусе
Resolution	Разрешение
Reserpine	Резерпин
Unit	Единица

2) Запустите сканирование в соответствии с условиями, указанными в таблице 12.2.

Таблица 12.2. Условия параметров MRM (мониторинга множественных реакций)

Модуль	Параметр	Установка значения
Жидкостной хроматограф	Мобильная фаза	Метанол:вода = 90:10 (об./об.)
	Скорость потока (мл/мин)	0,4
Масс-спектрометр	Напряжение на капилляре (кВ)	5
	Напряжение на конусе для отбора проб (В)	40
	Температура интерфейса вакуума (°C)	110
	Расход распыляющего газа (л/мин)	1,5
	Газ десольватации (л/мин)	5
	Температура десольватации (°C)	400
	Газ обратной промывки (л/мин)	2
	Режим разрешения	–

Примечание. Все используемые растворители должны быть чистоты «Для хроматографии» или выше.

В масс-спектре полного сканирования чаще всего самый высокий пик является целевым пиком (родительским ионом). Для режима положительных ионов обычно $[M+H]^+$, для режима отрицательных ионов обычно $[M-H]^-$. Взяв в качестве примера резерпин, целевой пик составляет 609,16, как показано на рисунке 6.14.

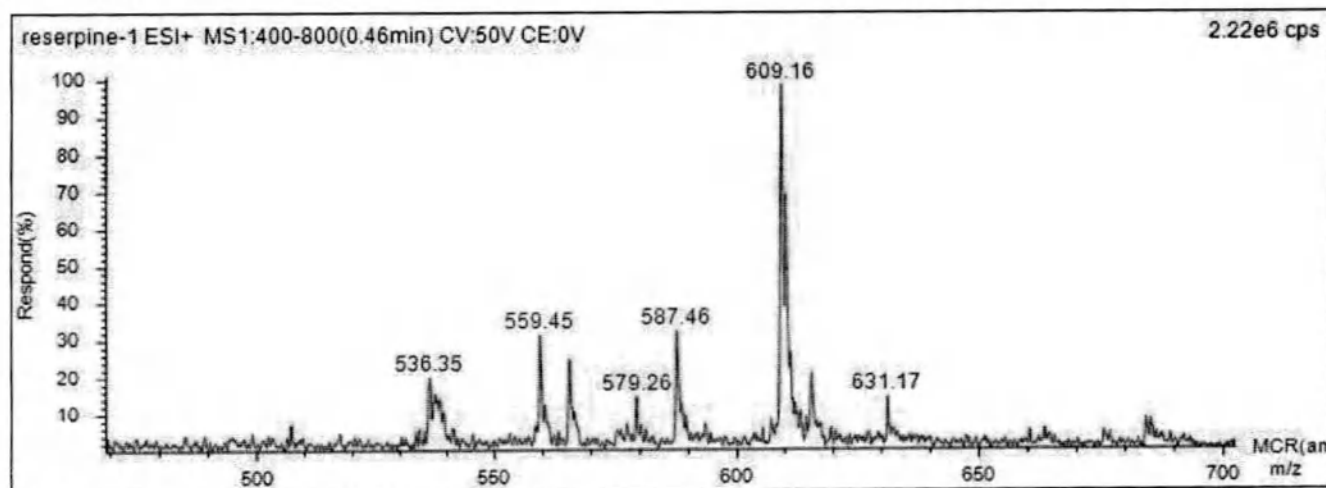


Рисунок 6.14. Спектр резерпина.

ДЛЯ РИСУНКА 6.14.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
cps	Импульсов в секунду
MCR (array) m/z	MCR (матрица) масса/заряд
Response, %	Отклик, %
Reserpine	Резерпин

- 3) Чтобы определить точную массу родительского иона резерпина, необходимо сузить диапазон сканирования для достижения точных результатов сканирования (рисунок 6.15.).

	Compound name	Begin mass	End mass	Retention time	Cone voltage	Resolution ratio
1	reserpine	604	614	0.1	40	Unit

Рисунок 6.15. Уменьшение диапазона сканирования для определения точной массы родительского иона.

ДЛЯ РИСУНКА 6.15.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Compound name	Наименование химического соединения
Begin mass	Начальная масса
End mass	Конечная масса
Retention time	Время удержания
Cone voltage	Напряжение на конусе
Resolution	Разрешение
Reserpine	Резерпин
Unit	Единица

Просканируйте еще раз, и из масс-спектра можно получить точную массу резерпина как 609,25, как показано на рисунке 6.16.

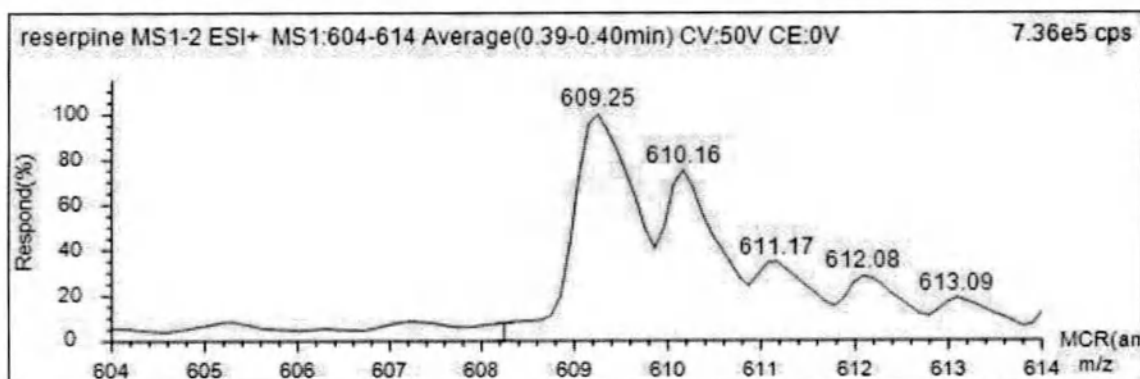


Рисунок 6.16. Точный спектр резерпина.

ДЛЯ РИСУНКА 6.16.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
cps	Импульсов в секунду
MCR (array) m/z	MCR (матрица) масса/заряд
Response, %	Отклик, %
Reserpine	Резерпин
Average	Среднее

- 4) Следующим шагом является оптимизация напряжения на конусе, чтобы максимизировать отклик родительского иона 609. При оптимизации неизвестного соединения рекомендуется сначала увеличить размер шага, расширить диапазон оптимизации и предварительно определить оптимальный диапазон напряжения, а затем уменьшить размер шага для точной оптимизации напряжения.
 Задайте условия: режим сканирования – MS1 Scan («Скан MC1»), качество сканирования – 609,25, Scan span («Диапазон сканирования») – 0, Dwell time («Минимальное время измерения») – 0,1 с. После этого нажмите кнопку «Добавить» для установки 10 каналов сканирования и поочередного изменения напряжения на конусе. В данном примере оптимальный диапазон напряжения на конусе – от 20 В до 65 В, шаг оптимизации – 5 В (рисунок 6.17.).

	Compound name	Scan mass	Mass span	Retention time	Cone voltage	Resolution
1	reserpine	609.25	0	0.1	20	Unit
2	reserpine	609.25	0	0.1	25	Unit
3	reserpine	609.25	0	0.1	30	Unit
4	reserpine	609.25	0	0.1	35	Unit
5	reserpine	609.25	0	0.1	40	Unit
6	reserpine	609.25	0	0.1	45	Unit
7	reserpine	609.25	0	0.1	50	Unit
8	reserpine	609.25	0	0.1	55	Unit
9	reserpine	609.25	0	0.1	60	Unit
10	reserpine	609.25	0	0.1	65	Unit

Рисунок 6.17. Оптимизация напряжения на конусе.

ДЛЯ РИСУНКА 6.17.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Compound name	Наименование химического соединения
Scan mass	Сканируемая масса
Mass span	Диапазон масс
Retention time	Время удержания
Cone voltage	Напряжение на конусе
Resolution	Разрешение
Reserpine	Резерпин
Unit	Единица

На хроматограмме в реальном времени нажмите «Показать», выберите «Канал», далее выберите и «Все каналы» для извлечения и отображения 10 каналов сканирования в спектре, как показано на рисунке 6.18.

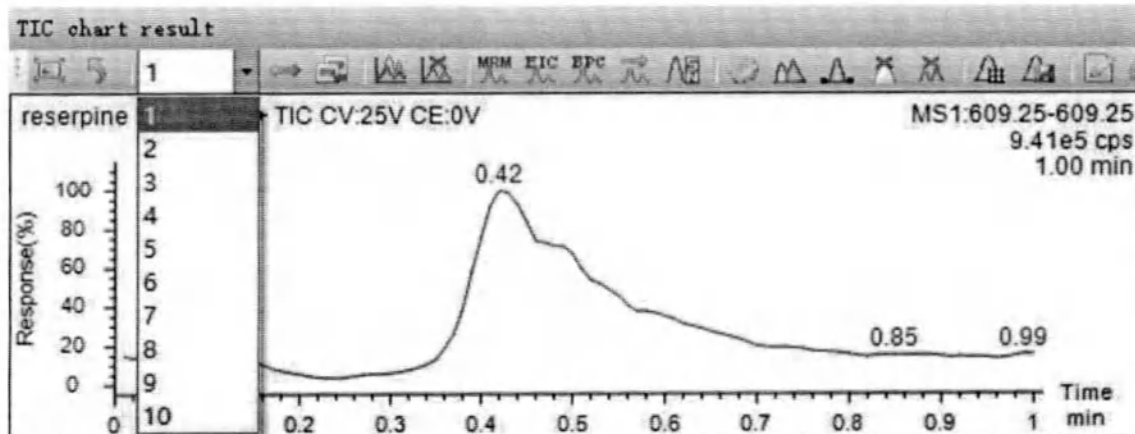


Рисунок 6.18. Выбор канала.

ДЛЯ РИСУНКА 6.18.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
cps	Импульсов в секунду
min	Минут
Time, min	Время, минут
TIC chart result	Результат карты полного ионного тока
Response, %	Отклик, %
Reserpine	Импульсов в секунду

Необходимо обратить внимание на значение отклика в правом верхнем углу каждого спектра, и на напряжение, соответствующее самому высокому значению, которое является оптимальным напряжением на конусе. В этом примере оптимальное напряжение на конусе – 40 В.

Примечание. В верхней части спектра приведены параметры напряжения на конусе, используемые при регистрации данного спектра (рисунок 6.19.).

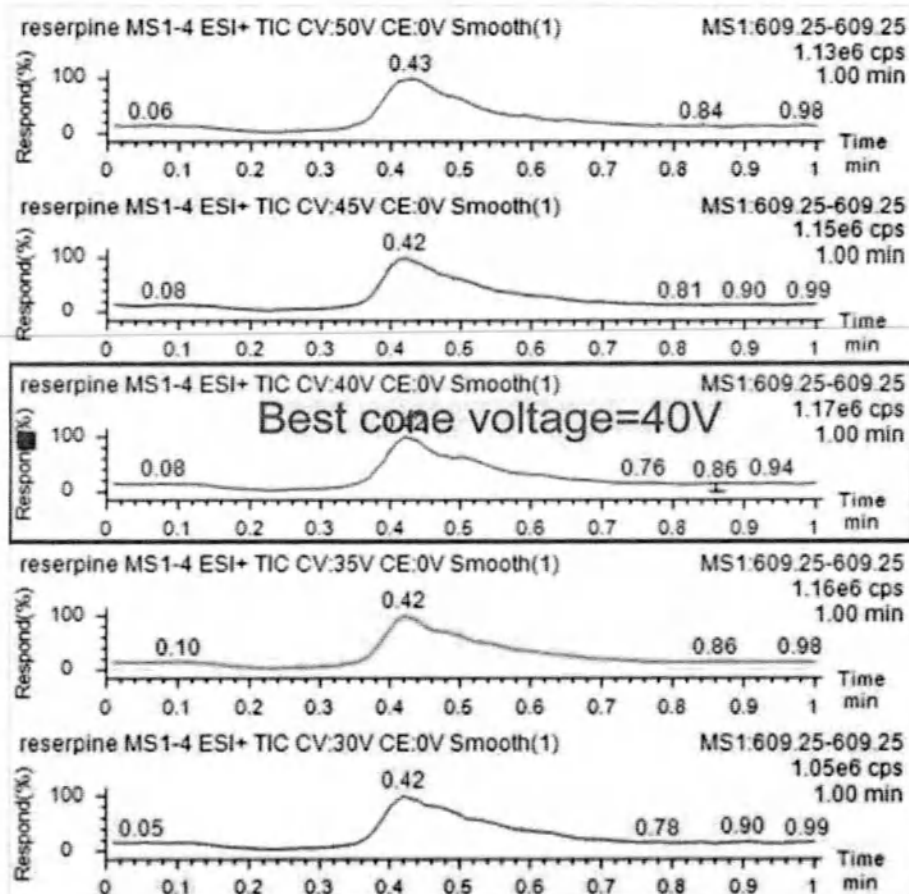


Рисунок 6.19. Оптимальное напряжение на конусе.

ДЛЯ РИСУНКА 6.19.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
cps	Импульсов в секунду
min	Минут
Time, min	Время, минут
Response, %	Отклик, %
Reserpine	Импульсов в секунду
Best cone voltage= 40V	Оптимальное напряжение на конусе = 40В

- 5) Переключите режим сканирования на Daughter Scan («Сканирование дочерних ионов»), установите родительский ион MS1 – 609,3, диапазон сканирования MS2 – от 100 а.е.м. до 600 а.е.м., Retention time («Время сканирования») – 0,5 с, Cone voltage («Напряжение на конусе») – 40 В, Collision energy («Энергия столкновений») – 40 В, как показано на рисунке 6.20.

Примечание. Перед включением режима сканирования Daughter Scan («Сканирование дочерних ионов») в интерфейсе управления масс-спектрометром должен быть включен газ в ячейке столкновений.

	Method fragment information	Start time(min)	End time(min)	Ionization mode	Scan mode
► 1		0	5	ESI+	Product ion

	Compound name	Precursor ion weight	Begin mass	End mass	Retention time	Cone voltage	Collision energy	Resolution ratio
► 1	reserpine	609.3	100	600	0.5	40	40	Unit-Unit

Рисунок 6.20. Метода настройки (фрагмент).

ДЛЯ РИСУНКА 6.20.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Method fragment information	Информация о фрагменте метода
Start time (min)	Время начала (минут)
End time (min)	Конечное время (мин)
Ionization mode ESI+	Режим ионизации ESI+
Scan mode	Режим сканирования
Product ion	Ион-продукт
Compound name	Наименование химического соединения
Precursor ion weight	Масса иона-предшественника
Begin mass	Начальная масса
End mass	Конечная масса
Retention time	Время сканирования
Cone voltage	Напряжение на конусе
Collision energy	Энергия столкновений
Resolution ratio	Соотношение разрешения
Unit-Unit	Единица-Единица

Откройте масс-спектр и выберите два наиболее интенсивных фрагментных иона (ионы-продукты) 195,01 и 397,17, как показано на рисунке 6.21.

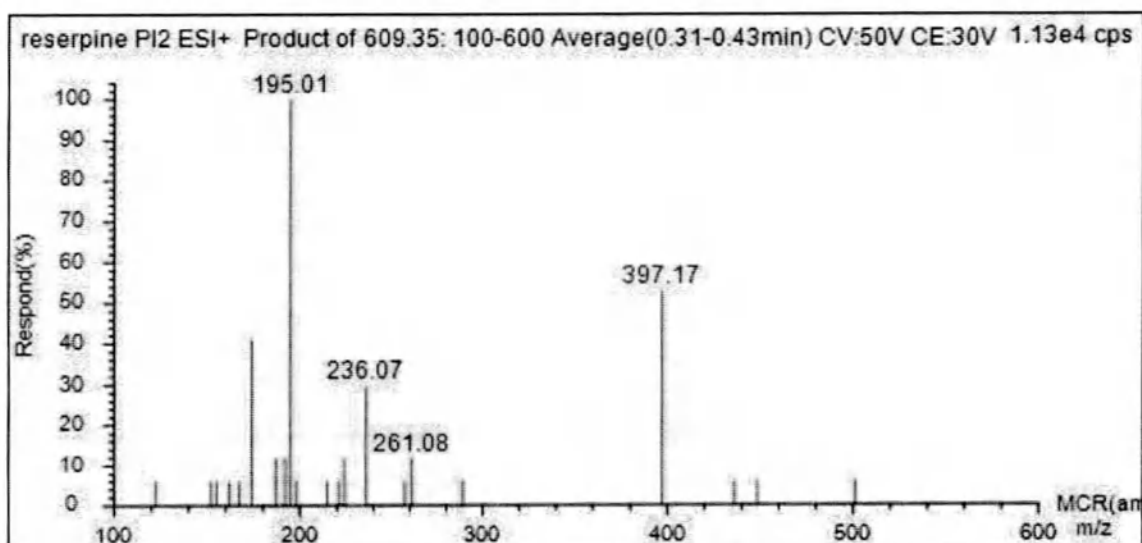


Рисунок 6.21. Просмотр спектра масс.

ДЛЯ РИСУНКА 6.21.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
cps	Импульсов в секунду
MCR (array) m/z	MCR (матрица) масса/заряд
Response, %	Отклик, %
Reserpine	Резерпин
Product of	Продукт
Average	Среднее

В соответствии с условиями, показанными на рисунке ниже, установите диапазон сканирования массы указанных выше ионов-продуктов на 10 а.е.м., время сканирования на 0,1 с и повторите сканирование, чтобы определить точные массовые числа этих ионов-продуктов (рисунок 6.22.).

	Compound name	Precursor ion weight	Scan mass	Mass span	Retention time	Cone voltage	Collision energy	Resolution ratio
1	reserpine	609.3	195	10	0.1	40	40	Unit-Unit
2	reserpine	609.3	397	10	0.1	40	40	Unit-Unit

Рисунок 6.22. Определение точной массы иона-продукта.

ДЛЯ РИСУНКА 6.22.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Compound name	Наименование химического соединения
Precursor ion weight	Масса иона-предшественника
Scan mass	Сканируемая масса
Mass span	Диапазон масс
Retention time	Время удержания
Cone voltage	Напряжение на конусе
Collision energy	Энергия столкновений
Resolution ratio	Соотношение разрешения
Unit-Unit	Единица-Единица

Точные массы для двух ионов-продуктов из масс-спектра 195,05 и 397,25, как показано на рисунке 6.23.

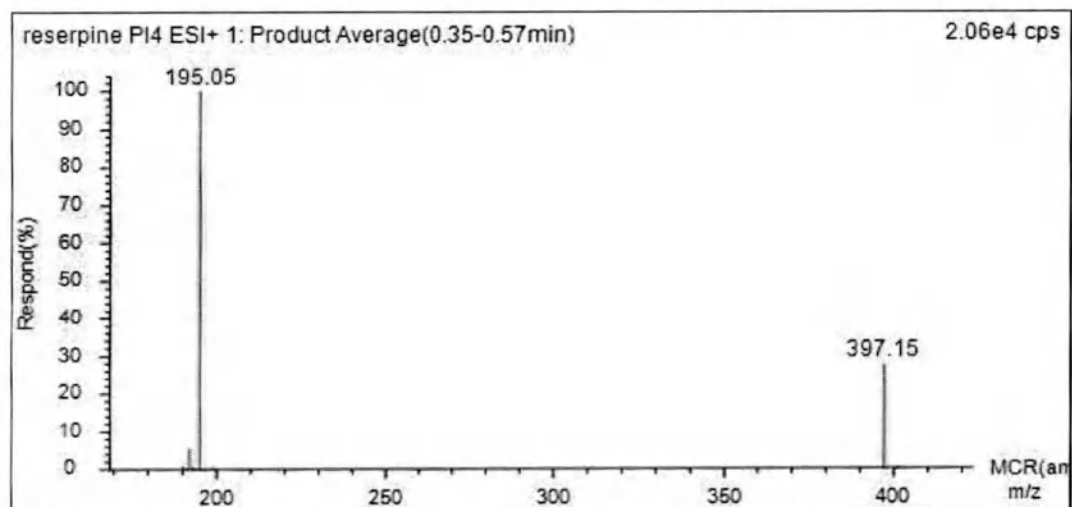


Рисунок 6.23. Получение точной массы ионов-продуктов.

ДЛЯ РИСУНКА 6.23.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
cps	Импульсов в секунду
MCR (array) m/z	MCR (матрица) масса/заряд
Response, %	Отклик, %
Reserpine	Резерпин
Product of	Продукт
Average	Среднее

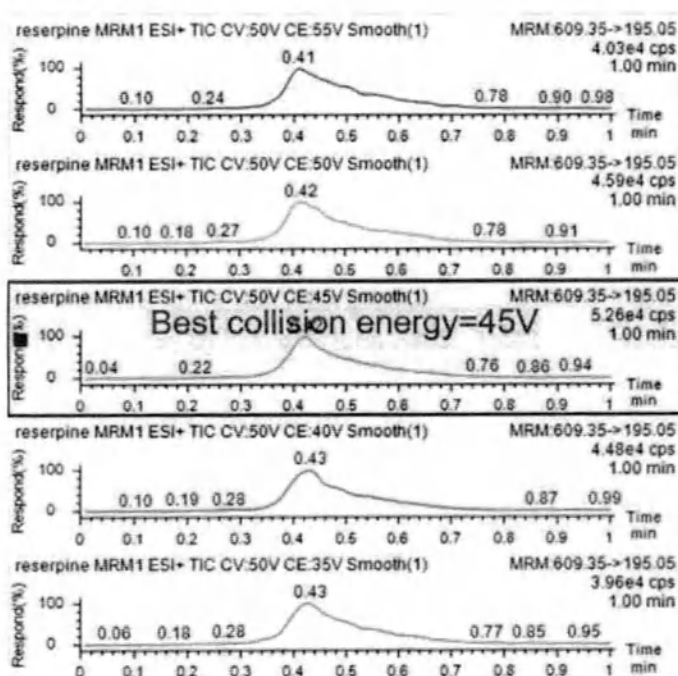
- 6) Переключите режим сканирования в режим MRM (мониторинга множественных реакций), установите переход MRM (один переход содержит один ион-предшественник и один ион-продукт), рекомендуется одновременно оптимизировать только один переход MRM, сначала оптимизируйте канал 609,3→195, сканирование. Исходный ион – 609,35, ион-продукт – 195, время сканирования – 0,1 с, Cone voltage («Напряжение на конусе») – 40 В. После этого нажмите кнопку «Добавить» для установки 8 каналов сканирования и поочередного изменения напряжения на конусе. В данном примере диапазон оптимизации энергии столкновения – от 30 В до 65 В, шаг оптимизации – 5 В (рисунок 6.24.).

	Compound name	Precursor ion weight	Product ion weight	Retention time	Cone voltage	Collision energy	Resolution ratio
1	reserpine	609.3	195.05	0.1	40	30	Unit-Unit
2	reserpine	609.3	195.05	0.1	40	35	Unit-Unit
3	reserpine	609.3	195.05	0.1	40	40	Unit-Unit
4	reserpine	609.3	195.05	0.1	40	45	Unit-Unit
5	reserpine	609.3	195.05	0.1	40	50	Unit-Unit
6	reserpine	609.3	195.05	0.1	40	55	Unit-Unit
7	reserpine	609.3	195.05	0.1	40	60	Unit-Unit
8	reserpine	609.3	195.05	0.1	40	65	Unit-Unit

Рисунок 6.24. Оптимизация энергии столкновений.

ДЛЯ РИСУНКА 6.24.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Compound name	Наименование химического соединения
Reserpine	Резерпин
Precursor ion weight	Масса иона-предшественника
Product ion weight	Масса иона-продукта
Retention time	Время сканирования
Cone voltage	Напряжение на конусе
Collision energy	Энергия столкновений
Resolution ratio	Соотношение разрешения
Unit-Unit	Единица-Единица

На хроматограмме в реальном времени нажмите «Показать», выберите «Канал», далее и выберите «Все каналы» для извлечения и отображения 8 каналов сканирования в спектре. Необходимо обратить внимание на значение отклика в правом верхнем углу каждого спектра и на напряжение, соответствующее самому высокому значению, которое является оптимальной энергией столкновений. В этом примере оптимальное напряжение на конусе – 45 В, как показано на рисунке 6.25.



ДЛЯ РИСУНКА 6.25.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
cps	Импульсов в секунду
min	Минут
Time, min	Время, минут
Response, %	Отклик, %
Reserpine	Резерпин
Best collision energy= 45 V	Оптимальная энергия столкновений = 45 В

Рисунок 6.25. Оптимизация энергии столкновения.

- 7) После выполнения вышеуказанных шагов параметры MRM перехода 609→195 для резерпина были оптимизированы, повторите описанные выше шаги для оптимизации перехода 609→397 и сохраните оптимизированные параметры (рисунок 6.26.).

	Compound name	Precursor ion weight	Product ion weight	Retention time	Cone voltage	Collision energy	Resolution ratio
1	reserpine	609.3	195.05	0.1	40	45	Unit-Unit
2	reserpine	609.3	397.15	0.1	40	30	Unit-Unit

Рисунок 6.26. Оптимизация энергии столкновений.

ДЛЯ РИСУНКА 6.26.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Compound name	Наименование химического соединения
Reserpine	Резерпин
Precursor ion weight	Масса иона-предшественника
Product ion weight	Масса иона-продукта
Retention time	Время сканирования
Cone voltage	Напряжение на конусе
Collision energy	Энергия столкновений
Resolution ratio	Соотношение разрешения
Unit-Unit	Единица- Единица

6.5. Калибровка разрешения и оси масс

Целью калибровки разрешения и оси масс является обеспечение точности масс-спектрометр во время использования. После установки и обслуживания прибора необходимо калибровать масс-спектрометр один раз в шесть месяцев. Когда масс-спектрометр откалиброван, создается отчет о калибровке, который сохраняется для последующего вызова. Шаги для калибровки разрешения и оси масс *следующие*:

- 1) Нажмите на иконку  в главном интерфейсе управляющего программного обеспечения, откройте интерфейс управления вакуумом и нажмите кнопку «Возобновить», чтобы масс-спектрометр перешел в рабочее состояние.
- 2) Нажмите на иконку  в главном интерфейсе управляющего программного обеспечения, откройте интерфейс управления масс-спектрометром («MS»).
- 3) Нажмите кнопку Mass calibration («Калибровка масс») (рисунок 6.27.).

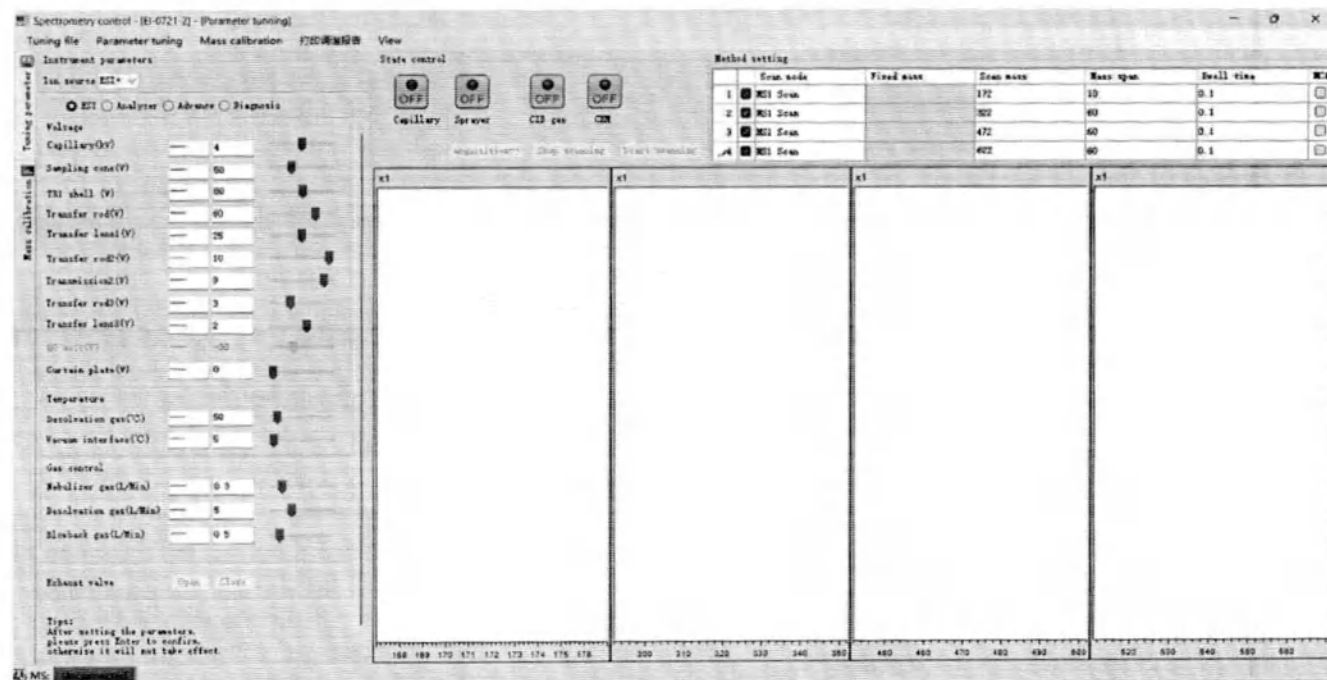


Рисунок 6.27. Интерфейс калибровки массы интерфейса управления.

ДЛЯ РИСУНКА 6.27.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Spectrometry control (EI-0721-2)-(Parameter tuning)	Контроль спектрометрии (EI-0721-2)-(Настройка параметров)
Mass calibration	Калибровка масс
Tuning parameter	Параметр настройки
Tuning file	Файл настройки
Parameter tuning	Настройка параметров
Mass calibration	Калибровка масс
View	Вид
Instrument parameter	Параметр инструмента
Ion source ESI+	Источник ионов ESI+
ESI	Ионизация электроспреем

ДЛЯ РИСУНКА 6.27.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analyzer	Анализатор
Advance	Предварительный
Diagnosis	Диагностика
Voltage	Напряжение
Capillary (kV)	Капиллярный (кВ)
Sampling cone (V)	Конус для отбора проб (В)
TR1 shell (V)	Оболочка TR1 (В)
Transfer rod 1/2/3 (V)	Трансмиссионный стержень 1/2/3 (В)
Transfer lens 1/2/3 (V)	Трансмиссионная линза 1/2/3 (В)
Transmission 2 (V)	Трансмиссия 2 (В)
QO exit (V)	Выход QO (В)
Curtain plate (V)	Напряжение на дефлекторе (В)
Temperature	Температура
Desolvation gas (°C)	Газ десольватации (°C)
Vacuum interface (°C)	Вакуумный интерфейс (°C)
Gas control	Управление газом
Nebulizer gas (L/min)	Распыляющий газ (л/мин)
Desolvation gas (L/min)	Газ десольватации (л/мин)
Blowback gas (L/min)	Газ обратной продувки (л/мин)
Exhaust valve	Выпускной клапан
Open	Открыть
Close	Закрыть
Tips: After setting the parameters, please press Enter to confirm, otherwise it will not take effect.	Подсказка: После настройки параметров нажмите «Ввод», чтобы подтвердить, иначе они не вступят в действие
MS: Unconnected	Масс-спектрометр: Не подключен
OFF	Отключено
Capillary	Капиллярный
Sprayer	Распылитель
CID gas	Газ диссоциации, вызванной столкновениями
Acquisition	Получение данных
Stop scanning	Остановить сканирование
Start scanning	Начать сканирование
Method setting	Настройка метода
Scan mode	Режим сканирования
MS1 Scan	Скан MS1
Fixed mass	Фиксированная масса
Scan mass	Сканируемая масса
Mass span	Диапазон масс
Dwell time	Минимальное время измерения
MCA	Многоканальный анализатор

- 4) Войдите в интерфейс калибровки масс и выберите соответствующий референсный файл масс в соответствии с полярностью положительных и отрицательных ионов. По умолчанию референсный файл масс для режима положительных ионов – NaI_Pos, для режима отрицательных ионов – NaI_Neg (рисунок 6.28.).

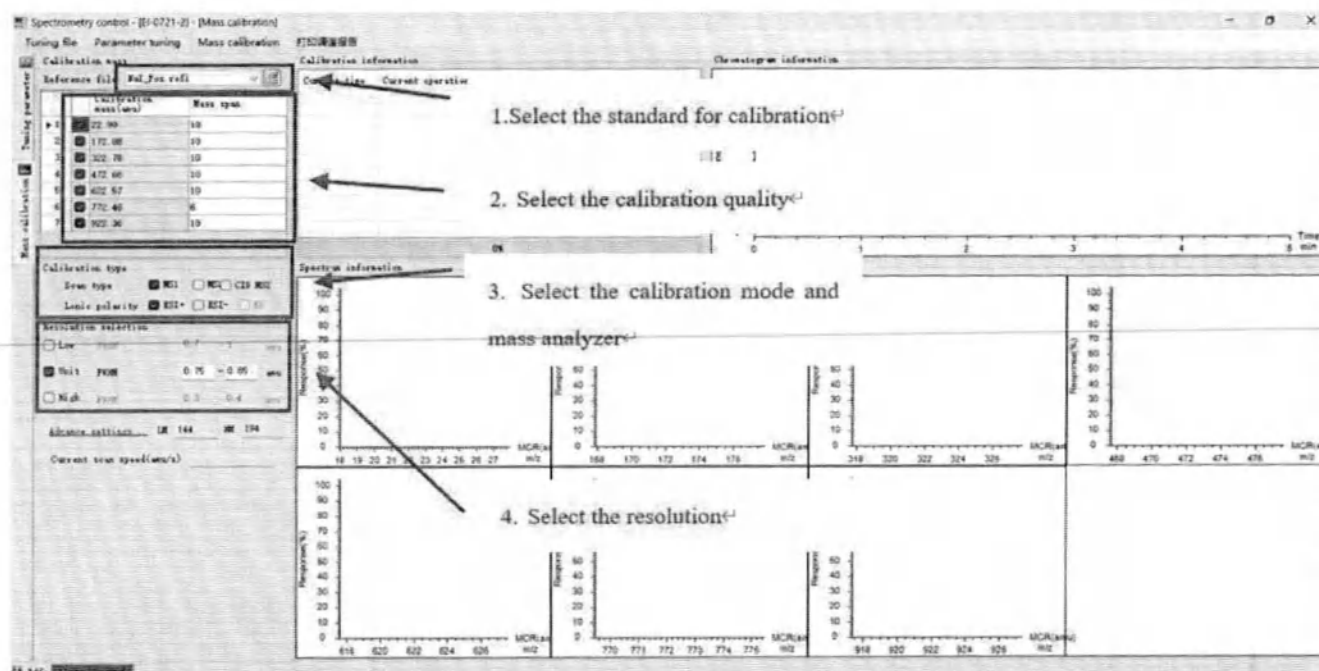


Рисунок 6.28. Интерфейс калибровки масс.

ДЛЯ РИСУНКА 6.28.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Spectrometry control (EI-0721-2)-(Parameter tuning)	Контроль спектрометрии (EI-0721-2)-(Настройка параметров)
Mass calibration	Калибровка масс
Calibration mass, amu	Калибровка масс, атомные единицы массы (а.е.м.)
Reference file NaI_Pos.refi	Референсный файл NaI_Pos.refi
Mass span	Диапазон масс
Calibration type	Тип калибровки
Scan type MS1/ MS2 CID MS2	Тип сканирования MS1/ MS2 CID MS2
Ionic polarity ESI+ ESI- EI	Полярность ионов ESI+ ESI- EI
Resolution selection	Выбор разрешения
Low	Низкая
Unit	Единицы
High	Высокая
amu	Атомная единица массы (а.е.м.)
Advance settings LM HM	Дополнительные настройки: низкое массовое разрешение (LM), высокое массовое разрешение (HM)
Current scan speed	Текущая скорость сканирования
Calibration information	Информация о калибровке
Current time	Текущее время
Current operation	Текущая операция
Chromatogram information	Информация о хроматограмме
Response %	Отклик %
Time, min	Время, минут
MCR (array) m/z	MCR (матрица) масса/заряд
1. Select the standard for calibration	1. Выбрать стандарт для калибровки
2. Select the calibration quality	2. Выбрать качество калибровки
3. Select the calibration mode and mass analyzer	3. Выбрать режим калибровки и масс-анализатор
4. Select the resolution	4. Выбрать разрешение
MS: Unconnected	Масс-спектрометр: Не подключен

- С помощью шприца введите 1 мл калибровочного раствора йодида натрия (NaI) в масс-спектрометр через шприцевой насос со скоростью потока 10 мкл/мин. Проверьте, что объем иглы для ввода автосемплера достаточен и может непрерывно вводиться в течение более 20 минут
- Нажмите на иконку  во всплывающем окне, выберите массу, которую необходимо откалибровать. Если необходимо откалибровать массу в диапазоне от 20 а.е.м. до 1100 а.е.м., отметьте семь ионов (22,99, 172,88, 322,78, 472,67, 622,57, 772,46, 922,36 и 1072,25) и нажмите «ОК», чтобы закрыть окно (рисунки 6.29–6.30.).

Reference information[NaI_Neg]

Sample name: NaI

Add Delete

	Reference mass	Response strength	Charge number	Whether use or not
1	126.9	0	1	☒
2	276.8	0	1	☒
3	426.69	0	1	☒
4	576.59	0	1	☒
5	726.48	0	1	☒
6	876.376	0	1	☐
7	1026.265	0	1	☐
8	1176.164	0	1	☐
9	1326.058	0	1	☐
10	1475.953	0	1	☐
11	1625.847	0	1	☐
12	1775.741	0	1	☐
13	1925.635	0	1	☐
14	2075.53	0	1	☐

Import... Save as... Confirm Cancel

Рисунок 6.29. Калибровка масс.

Calibration mass

Reference file: NaI_Neg.refi

	Calibration mass(amu)	Mass span
1	☒ 126.9	6
2	☒ 276.8	20
3	☒ 426.69	20
4	☒ 576.59	30
5	☒ 726.48	30

Рисунок 6.30. Референсный файл калибровки масс.

ДЛЯ РИСУНКА 6.30.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Calibration mass	Калибровка масс
Reference file NaI_Neg.refi	Справочная информация NaI_Neg.refi
Calibration mass (amu)	Калибровка масс (атомные единицы массы)
Mass span	Диапазон масс

Выберите референсный файл масс йодида натрия (NaI) для режима положительных ионов (диапазон масс – от 20 а.е.м. до 1100 а.е.м.) (рисунок 6.31.).

- Выберите тип квадруполя, который необходимо откалибровать (MS1 или MS2), ионную полярность (положительную или отрицательную). В текущей версии программного обеспечения режимы положительных и отрицательных ионов можно откалибровать одновременно, но рекомендуется сначала проверить, являются ли сигналы ионов в режимах положительных и отрицательных ионов нормальными в интерфейсе настройки параметров, то есть соответствующая ось масс, подлежащая калибровке, является ли самым высоким пиком в пределах установленного диапазона.

Calibration type

Scan type ☒ MS1 ☐ MS2 ☐ CID MS2

Ionic polarity ☒ ESI+ ☐ ESI- ☐ EI

Рисунок 6.31. Типы калибровки.

ДЛЯ РИСУНКА 6.31.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Calibration type	Тип калибровки
Scan type MS1/ MS2 CID MS2	Тип сканирования MS1/MS2 CID MS2
Ionic polarity ESI+ ESI- EI	Полярность ионов ESI+ ESI- EI

- 8) Выберите соответствующий режим разрешения (можно независимо устанавливать ширину на полувысоте пика (FWHM) в разных режимах разрешения, режим единиц измерения по умолчанию равен 0,7–0,9 а.е.м., режим High по умолчанию равен 0,4–0,6 а.е.м.).

Рекомендуется сначала отрегулировать разрешение характеристических ионов йодида натрия (NaI), изменив низкое (LM) и высокое массовое разрешение (HM) в интерфейсе настройки параметров, чтобы они примерно соответствовали значению ширины на полувысоте пика (FWHM), далее запустите автоматическую настройку разрешения (рисунок 6.32.).

Resolution selection

☐ Low FWHM 0.7 – 1 amu

☒ Unit FWHM 0.75 – 0.85 amu

☐ High FWHM 0.3 – 0.4 amu

Рисунок 6.32. Выбор разрешения.

ДЛЯ РИСУНКА 6.32.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Resolution selection	Выбор разрешения
Low	Низкая
Unit	Единицы
High	Высокая
FWHM	Ширина пика на полувысоте
amu	Атомная единица массы (а.е.м.)

- 9) Нажмите на иконку  – система автоматически запустит настройку разрешения и калибровку оси масс (весь процесс длится 10–15 мин) (рисунок 6.33.).

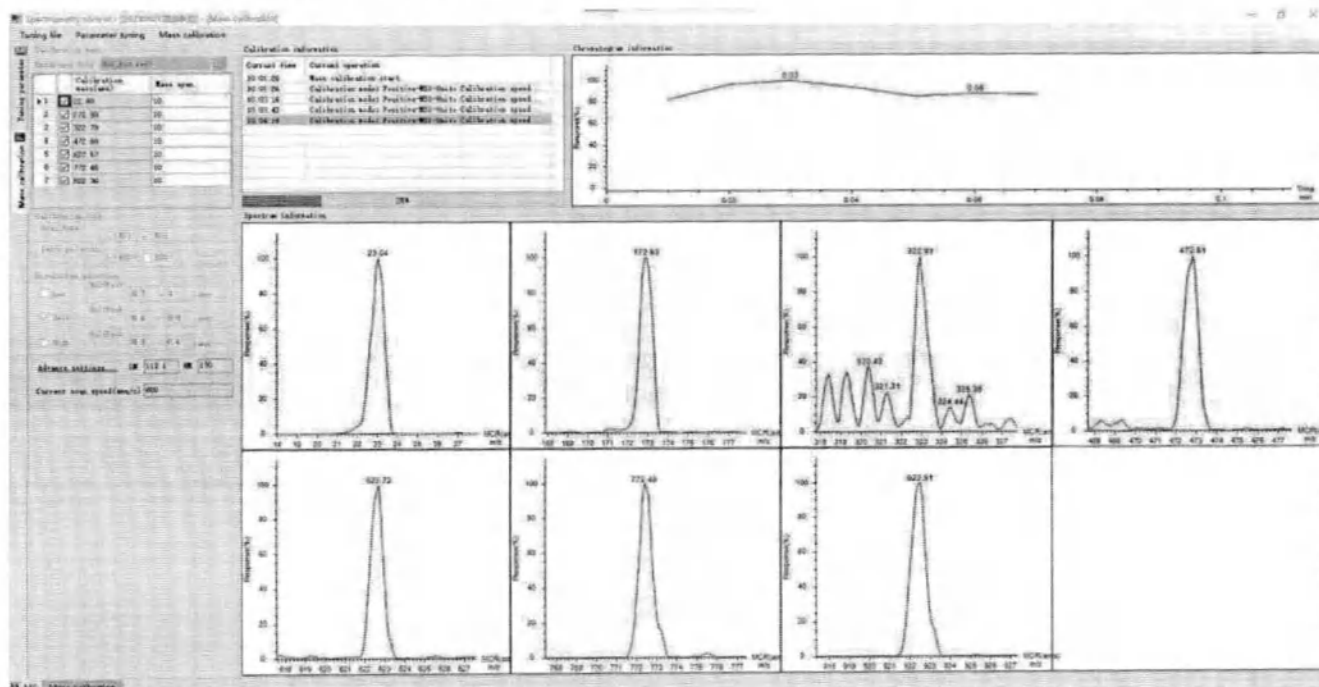


Рисунок 6.33. Процесс калибровки масс.

ДЛЯ РИСУНКА 12.31.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Spectrometry control (EI-0721-2)-(Parameter tuning)	Контроль спектрометрии (EI-0721-2)-(Настройка параметров)
Mass calibration	Калибровка масс

ДЛЯ РИСУНКА 12.31.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Calibration mass, amu	Калибровка масс, атомные единицы массы (а.е.м.)
Reference file NaI_Pos.refi	Референсный файл NaI_Pos.refi
Mass span	Диапазон масс
Calibration type	Тип калибровки
Scan type MS1/MS2 CID MS2	Тип сканирования MS1/MS2 CID MS2
Ionic polarity ESI+ ESI- EI	Полярность ионов ESI+ ESI- EI
Resolution selection	Выбор разрешения
Low	Низкая
Unit	Единицы
High	Высокая
amu	Атомная единица массы (а.е.м.)
Advance settings LM HM	Дополнительные настройки: низкое массовое разрешение (LM), высокой массовое разрешение (HM)
Current scan speed	Текущая скорость сканирования
Calibration information	Информация о калибровке
Current time	Текущее время
Current operation	Текущая операция
Mass calibration start	Начало калибровки массы
Calibration mode: Positive – MS1- Unit+ Calibration speed...	Режим калибровки: Положительный – MS1- Единица+ Скорость калибровки...
Spectrum information	Информация о спектре
Chromatogram information	Информация о хроматограмме
Response %	Отклик %
Time, min	Время, минут
MCR (array) m/z	MCR (матрица) масса/заряд
1. Select the standard for calibration	1. Выбрать стандарт для калибровки
2. Select the calibration quality	2. Выбрать качество калибровки
3. Select the calibration mode and mass analyzer	3. Выбрать режим калибровки и масс-анализатор
4. Select the resolution	4. Выбрать разрешение
MS: Unconnected	Масс-спектрометр: Не подключен

- 10) Когда калибровка оси масс завершена, появится всплывающее окно отчета о калибровке, и можно просмотреть отклонение оси масс и ширину на полувысоте пика (FWHM) при различных скоростях сканирования. Когда отклонение оси масс всех ионов меньше 0,1 а.е.м., значение FWHM находится в пределах установленного диапазона, и результат калибровки является приемлемым. Нажмите «Сохранить как», чтобы сохранить текущий файл калибровки для последующего использования. Если результаты калибровки не удовлетворены, необходимо принять следующие общие меры:
- Измените количество аппроксимаций кривой в отчете о калибровке (по умолчанию – одно применение);
 - Отмените отдельные аномальные точки при текущей скорости в отчете о калибровке – программное обеспечение перестроит кривую.
- Примечание.** Каждое изменение повлияет на калибровочную кривую при других скоростях.
- Увеличьте количество сборов в параметрах калибровки и повторите калибровку (рисунок 6.34.).

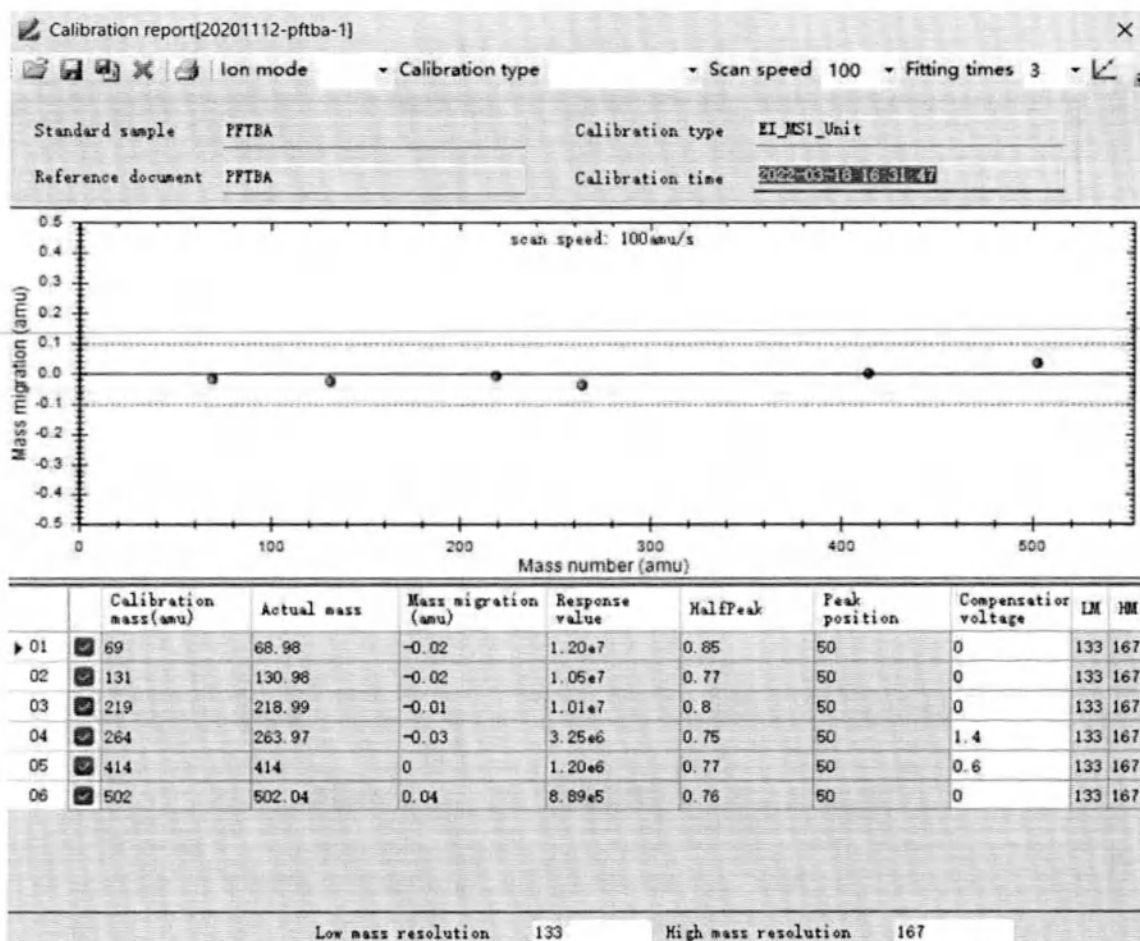


Рисунок 6.34. Отчет о калибровке масс (пример).

ДЛЯ РИСУНКА 6.34.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Calibration report (20201112-pftba-1)	Отчет о калибровке (20201112-pftba-1)
Ion mode	Режим ионизации
Calibration type	Тип калибровки
Scan speed 100	Скорость сканирования 100
Fitting times 3	Количество применений 3
Standard sample PFTBA	Стандартный образец PFTBA
Reference document PFTBA	Справочный документ PFTBA
Calibration type EI MSI Unit	Тип калибровки EI MSI Единица
Calibration time 2022-03-13 16:31:47	Время калибровки 2022-03-13 16:31:47
Mass migration (amu)	Миграция массы (атомных единиц массы)
Scan speed: 100 amu/s	Скорость сканирования: 100 атомных единиц массы/с
Mass number (amu)	Массовое число (атомных единиц массы)
Calibration mass (amu)	Калибровка масс (атомные единицы массы)
Actual mass	Фактическая масса
Mass migration (amu)	Миграция массы (атомных единиц массы)
Response value	Величина отклика
Halfpeak	Полупик
Peak position	Позиция пика
Compensation voltage	Компенсирующее напряжение
Low mass resolution	Низкое массовое разрешение
High mass resolution	Высокое массовое разрешение

6.6. Настройка положительного и отрицательного времени переключения

Нажмите Advanced options («Дополнительные опции») в окне System («Системе»), чтобы войти в его интерфейс. Можно установить различное положительное и отрицательное время переключения в соответствии с практическими задачами. Чаще всего по умолчанию значение составляет 50 мс, если нет требований к положительному и отрицательному времени переключения, рекомендуется его не изменять (рисунок 6.35.).

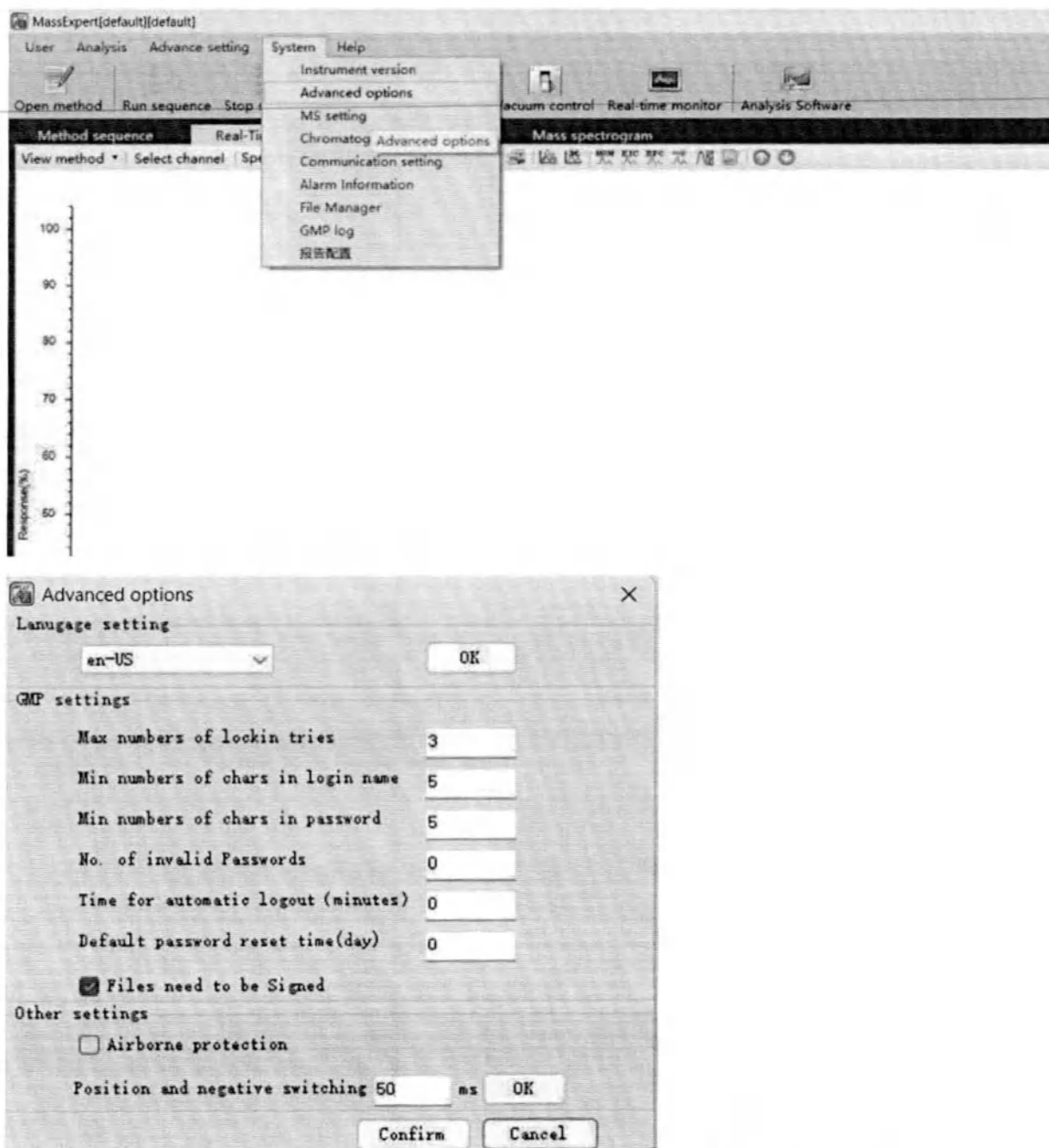


Рисунок 6.35. Интерфейс положительного и отрицательного времени переключения.

ДЛЯ РИСУНКА 6.35.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
MassExpert (default) (default)	MassExpert («МассЭксперт») (по умолчанию)
User	Пользователь
Analysis	Анализ
Advance setting	Предварительная настройка
System	Система
Instrument version	Версия инструмента
Advanced options	Дополнительные опции
Chromatography	Хроматография
Communication setting	Настройка коммуникации

ДЛЯ РИСУНКА 6.35.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Alarm information	Информация о сигналах тревоги
File manager	Менеджер файлов
GMP log	Журнал надлежащей производственной практики
Open method	Открыть метод
Run sequence	Запуск последовательности
Stop sequence	Остановка последовательности
LC control	Управление жидкостным хроматографом
MS control	Управление масс-спектрометром
Vacuum control	Управление вакуумом
Real-time monitor	Монитор в реальном времени
Analysis software	Программное обеспечение для анализа
Method sequence	Последовательность метода
Real-time Chart	Карта в реальном времени
Chromatogram	Хроматограмма
Mass spectrogram	Масс-спектрограмма
View method	Метод просмотра
Select channel	Выбрать канал
Response (%)	Отклик (%)
Advanced options	Дополнительные опции
Language setting: en-US – OK	Настройка языка – английский (США) – Подтверждено
GMP settings	Настройки надлежащей производственной практики
Max numbers of locking tries -3	Максимальное число попыток блокировки -3
Min numbers of chars in login name -5	Минимальное количество знаков в имени логина -5
Min numbers of chars in password -5	Минимальное количество знаков в пароле -5
No. of invalid passwords -0	Число недействительных паролей -0
Time for automatic logout (minutes) -0	Время автоматического выхода из системы (минут) -0
Default password reset time (day) -0	Время сброса пароля по умолчанию (дней) - 0
Files need to be signed	Файлы, требующие подписания
Other settings	Другие настройки
Airborne protection	Защита от частиц, взвешенных в воздухе
Position and negative switching 50 ms - OK	Положительное и отрицательное переключение 50 мс – Подтверждено
Confirm	Подтвердить
Cancel	Отменить

7. Плановое техническое обслуживание медицинского изделия для диагностики *in vitro*

В этом разделе приведены общие инструкции по техническому обслуживанию Системы.

Система HELICON® Inspero 5200 является прецизионным прибором, и оператор должен проводить регулярные проверки и техническое обслуживание в соответствии требованиями, указанными в таблице 7.1.

Таблица 7.1. Детали технического обслуживания Системы HELICON® Inspero 5200

№, п/п	Проект технического обслуживания	Замена/периодичность технического обслуживания
1	Замена капилляра ESI	Замена при использовании обычных условиях – каждые 2 года; периодичность технического обслуживания – каждые 6 месяцев.
2	Очистка конуса для отбора проб	Периодичность технического обслуживания – каждые 6 месяцев.
3	Очистка трансмиссионного стержня	Периодичность технического обслуживания – каждые 6 месяцев.
4	Очистка источника ионов	При необходимости (поверхность стекла ионного источника загрязнена); периодичность технического обслуживания – каждые 6 месяцев.
5	Технический осмотр сливной трубки	Замена при использовании обычных условиях – каждые 5 лет; периодичность осмотра – не менее 1 раза в месяц.

7.1. Очистка поверхности инструментов, техническое обслуживание и дезинфекция

Дезинфекция поверхностей Системы: в соответствии с WS/T 367-2012 «Технические условия для дезинфекции медицинских учреждений» п.5.2.3-с) в сочетании требованиями из Приложения В, В.11.2.3., «протирать чистой мягкой тканью, смоченной в 75%-ном медицинском спирте (протирать 2 раза по 3 минуты)».

Типы дезинфицирующих средств, которых следует избегать: надуксусная кислота, дезинфицирующее средство 84 (раствор NaClO), перекись водорода, перманганат калия и другие дезинфицирующие средства, обладающие высокой окислительной способностью.

Обратите внимание:

- 1) При утечке опасных веществ на поверхность прибора или попадании их внутрь оборудования прибор необходимо продезинфицировать.
Предупреждение. При попадании загрязнения внутрь прибора необходимо обратиться к уполномоченному представителю производителя в Российской Федерации (РФ).
- 2) Не используйте дезинфицирующие или чистящие средства, которые химически реагируют с частями прибора или материалами, содержащимися в нем, тем самым представляя опасность.
- с) В случаях сомнений о совместимости дезинфицирующих или чистящих средств с частями прибора или материалами, содержащимися в нем, необходимо обратиться к уполномоченному представителю производителя в Российской Федерации (РФ).

7.2. Обслуживание капилляров ESI

Обычный цикл замены капилляра составляет каждые два года, и для замены необходимо обратиться к уполномоченному представителю производителя в Российской Федерации (РФ).

Если во время использования прибора давление насоса бинарного ультравысокого давления оказывается ненормально высоким, то необходимо провести промывку жидкой фазой с высокой скоростью потока (1 мл/мин), непосредственно подключенной к источнику ионов, минуя хроматографическую колонку, и формирование стабильной струйной формы является нормальным явлением.

Если промывка при высокой скорости потока неэффективна или кончик капилляра ESI неровный, замените капилляр новым *следующим* образом:

Шаг 1. Снимите ручку регулировки капилляра, далее снимите соединение PEEK и шестигранное соединение (часть, которая устанавливает капилляр) в целом, не забудьте вытащить его перпендикулярно горизонтальной плоскости в процессе удаления, как показано на рисунке 7.1 (а);

Шаг 2. Ослабьте шестигранный фитинг на штуцере из полиэфирэфиркетона (PEEK), снимите старый капилляр, вставьте конец нового капилляра (толстый конец) через шестигранный штуцер, вставьте его в отверстие штуцера из PEEK, а затем затяните его вручную и окончательно затяните еще на пол-оборота гаечным ключом;

Шаг 3. Выверните модуль, установленный на шаге 2, совместите капиллярную трубку с отверстием датчика и закрутите регулировочную ручку, чтобы наконечник капилляра выступал на 0,5–1 мм, как показано на рисунке 7.1 (б).

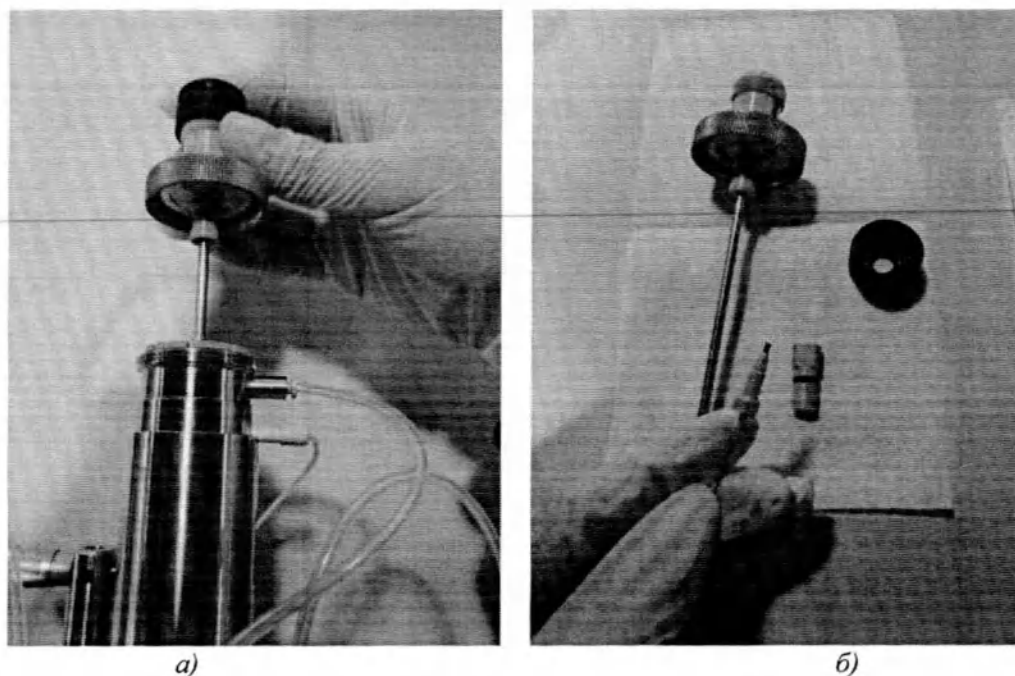


Рисунок 7.1. Замена капилляра ESI.

Основные этапы обслуживания капилляров ESI указаны в таблице 7.2.

Таблица 7.2. Основные этапы обслуживания капилляров ESI

№, п/п	Наименование	Примечание	Внешний вид источника ионов
1	Ручка регулировки	Отрегулируйте количество капиллярного расширения	
2	PEEK блок	Подсоедините инъекционную линию и капилляр	
3	Шестигранный соединитель	Закрепите капилляр	
4	Капилляр	Образует спрей	
5	Датчик	Комплект для монтажа капилляра	

7.3. Очистка конуса для отбора проб

Оператор всегда должен проверять чистоту поверхности конусного отверстия. Чаще всего конус для отбора проб и перегородку необходимо чистить каждые шесть месяцев после запуска прибора.

Если на поверхности появляются черные или маленькие белые кристаллы, детали необходимо очистить *следующим* образом:

Шаг 1. Установите температуру вакуумного интерфейса на 25 °С, подождите, пока значение обратной связи температуры вакуумного интерфейса будет равно (25±2)°С, нажмите кнопку «Режим ожидания» на приборе, удалите источник ионов, снимите перегородку, используйте для очистки метанол:сверхчистая вода = 1:1 (об./об.). Все используемые растворители должны быть чистоты «Для хроматографии» или выше;

Шаг 2. Используйте чистую безворсовую бумагу, чтобы вытереть пятна от воды, а затем используйте азот высокой чистоты, чтобы полностью высушить поверхность перегородки;

Шаг 3. Используйте смесь метанол:сверхчистая вода = 1:1 (об./об.) для очистки конуса для отбора проб, и используйте безворсовую бумагу для удаления пятен от воды, как показано на рисунке 7.2;

Шаг 4. Поместите очищенную перегородку обратно в вакуумный порт, переустановите источник ионов, нажмите кнопку «Восстановить» для восстановления нормальной работы прибора.

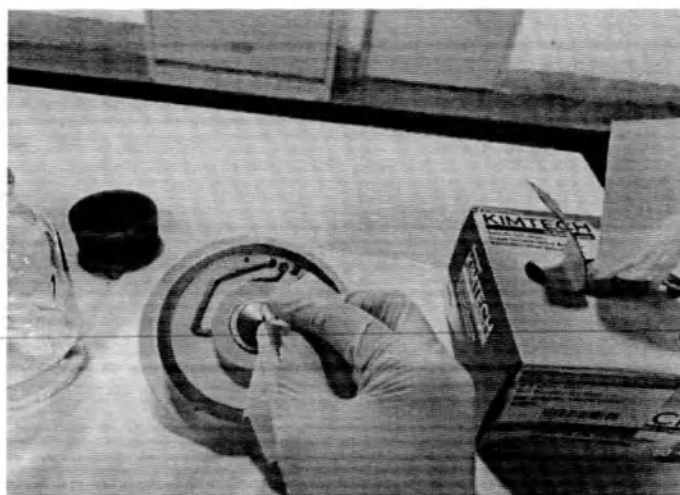


Рисунок 7.2. Очистка конуса для отбора проб.

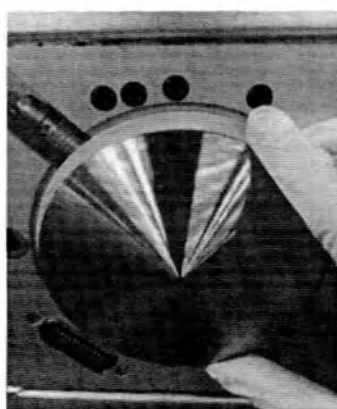
7.4. Очистка трансмиссионного стержня

Для обеспечения работоспособности прибора рекомендуется очищать трансмиссионный стержень каждые шесть месяцев *следующим* образом:

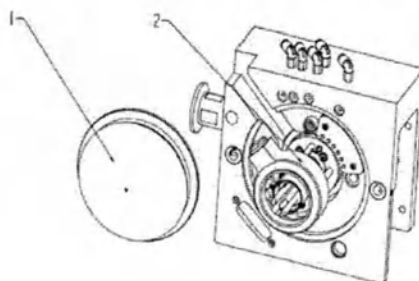
Шаг 1. Нажмите на кнопку «Режим ожидания» в программном обеспечении, затем нажмите на кнопку «Сбросить вакуум», и когда скорость молекулярного насоса упадет до 50 Гц, выключите вакуумный насос и выключите прибор (подробности в п. «Выключение прибора»);

Шаг 2. Снимите источник ионов (рисунок 7.3, а), затем снимите перегородку и вакуумный интерфейс, отсоедините разъем на трансмиссионном стержне и вытащите его горизонтально (рисунок 7.3, б);

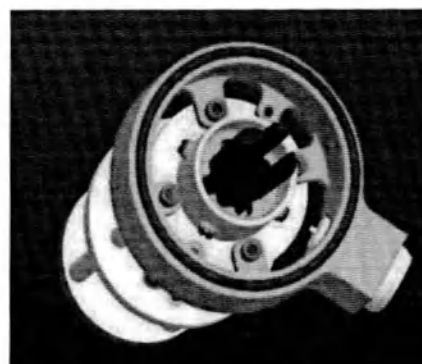
Шаг 3. Используйте метанол:сверхчистая вода = 1:1 (об./об.) в качестве очищающего раствора, протрите трансмиссионный стержень чистой бумагой, смоченной в очищающей жидкости, затем высушите его сухим азотом и установите обратно в прибор (рисунок 7.3, в).



а)



б)



в)

Рисунок 7.3. Очистка трансмиссионного стержня (1/2/3).

7.5. Техническое обслуживание сливной трубки

Трубки для жидкой фазы необходимо проверять не менее одного раза в месяц, чтобы убедиться, что соединения не ослаблены и не появились утечки. Утечка жидкости может привести к некорректной работе прибора (подробности в п. Ежедневная работа медицинского изделия для диагностики *in vitro*, чтобы использовать чистый метанол в качестве подвижной фазы для начала ввода насосом бинарным ультравысокого давления). Через определенное время протрите интерфейс сухой бумагой для проверки наличия/отсутствия утечек. Если жидкость протекает, остановите ввод и выключите насос бинарный ультравысокого давления. После повторного подключения и отключения повторно проверьте наличие/отсутствие утечек. Если проблема не устранена, необходимо связаться с уполномоченным представителем производителя в Российской Федерации (РФ). Трубку необходимо заменять каждые пять лет.

7.6. Замена предохранителя

7.6.1. Замена предохранителя насоса бинарного ультравысокого давления

Выключите переключатель питания, отсоедините шнур питания, нажмите и удерживайте зажимы на обоих концах предохранителя насоса, затем медленно потяните и вытащите поврежденный предохранитель.

тель, далее вставьте новый предохранитель в исходное положение, после чего он должен нормально включиться (рисунок 7.4).



Рисунок 7.4. Предохранители насоса бинарного ультравысокого давления.

7.6.2. Замена предохранителя автосемплера с опцией охлаждения

Выключите переключатель питания, отсоедините шнур питания, нажмите и удерживайте защелки на обоих концах предохранителя автосемплера, затем медленно вытащите поврежденный предохранитель, далее вставьте новый предохранитель в исходное положение, после чего он должен нормально включиться (рисунок 7.5).



Рисунок 7.5. Предохранитель автосемплера.

7.6.3. Замена предохранителя термостата колонок

Выключите переключатель питания, отсоедините шнур питания, защелкните нижний конец предохранителя термостата колонок, затем медленно вытащите его, вытащите поврежденный предохранитель, далее вставьте новый предохранитель в исходное положение, после чего он должен нормально включиться (рисунок 7.6).

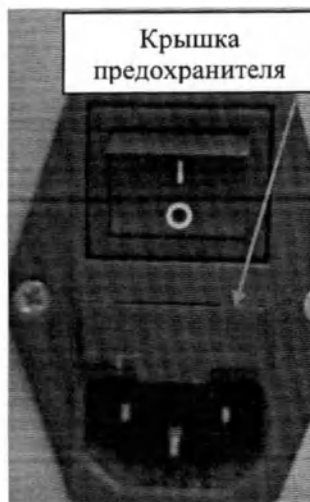


Рисунок 7.6. Предохранитель термостата колонок.

7.7. Техническое обслуживание вакуумного насоса

Масло вакуумного насоса необходимо проверять каждый месяц, чтобы убедиться, что граница раздела масла в насосе находится между максимальной и минимальной линиями шкалы (рисунок 7.7.).

Когда уровень масла ниже минимального значения или цвет становится желтым, масло в насосе необходимо заменить (рисунок 7.8.).

Примечание. Для замены масла прибор должен быть переведен в состояние полного отключения.

Замена масла выполняется *следующим* образом:

Шаг 1. Разгрузите прибор под вакуумом (величина вакуума в ячейке столкновений >760 Торр);

Шаг 2. Поднимите вакуумный насос примерно на 20 см, поместите стакан на 2000 мл под отверстие для слива масла, откройте отверстие для масла и дайте маслу насоса полностью стечь в стакан;

Шаг 3. Закройте отверстие для слива масла, откройте отверстие для заливки масла, залейте чистое масло насоса в отверстие для заливки масла, пока уровень масла не приблизится к положению MAX, затем закройте отверстие для заливки масла;

Шаг 4. Верните вакуумный насос в исходное положение, затем запустите вакуумный насос, запустите прибор.

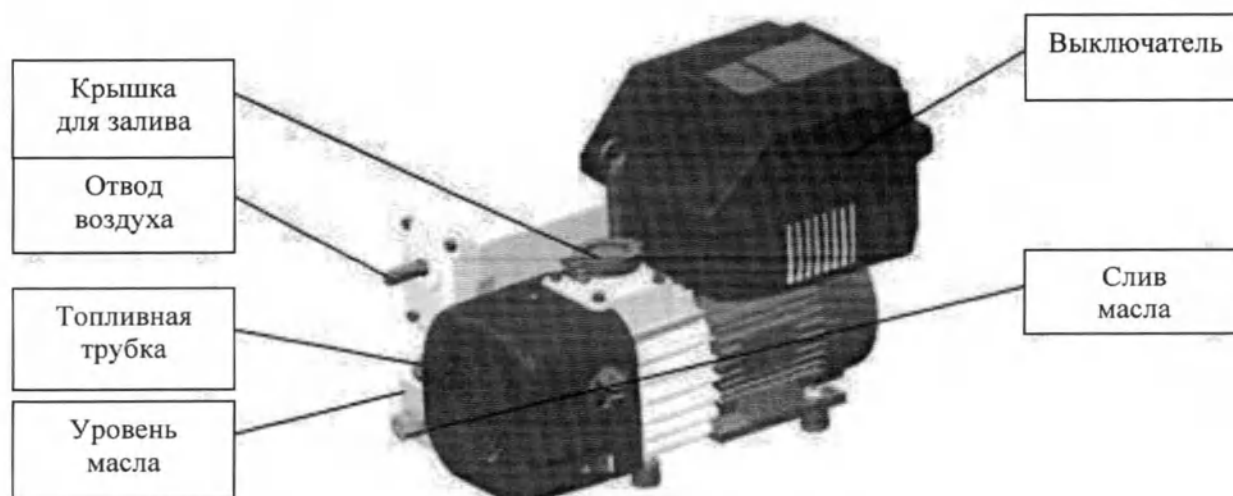


Рисунок 7.7. Вакуумный насос.

Нормальный цвет масла	Легкое загрязнение	Требуется замена масла	Полное загрязнение

Рисунок 7.8. Таблица цветов масла в вакуумном насосе.

7.8. Очистка источника ионов

Каждые 6 месяцев или при обнаружении пятен на смотровом окне источника ионов источник ионов необходимо очищать, а также очищать должным образом, чтобы обеспечить нормальную работу прибора:

Шаг 1. Остановите ввод образца, нажмите кнопку «Ожидание» и переместите ручки с обеих сторон источника ионов вверх в горизонтальное положение;

Шаг 2. Вытащите источник ионов в поступательном движении, снимите источник ионов и поместите на рабочем столе;

Шаг 3. Используйте метанол:сверхчистая вода = 1:1 (об./об.) в качестве чистящего раствора, смочите чистящий раствор чистой бумагой и протрите внутреннюю часть источника ионов, как показано на рисунке 7.9.

Шаг 4. После очистки снова установите источник ионов.

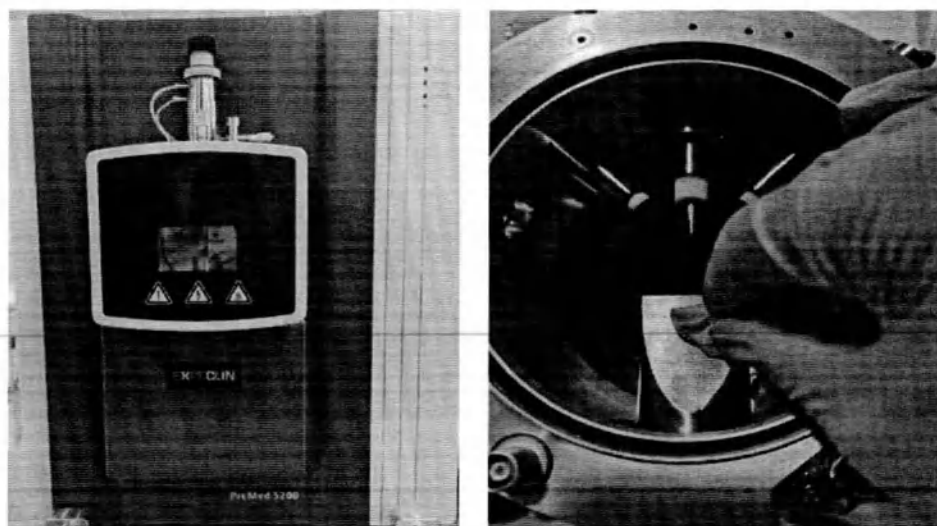


Рисунок 7.9. Очистка источника ионов.

7.9. Замена азота

Чтобы обеспечить нормальную подачу газа к прибору, газовый баллон необходимо заменить, когда давление в баллоне с азотом ниже 0,2 МПа (25°C) *следующим* образом:

Шаг 1. Закройте впускной клапан на редукционном клапане (направление закрытия – против часовой стрелки; закрытое состояние, когда ручка ослаблена);

Шаг 2. Закройте ручку над цилиндром, выключите переключатель цилиндра по часовой стрелке, затем с помощью разводного ключа снимите редукционный клапан с цилиндра;

Шаг 3. Используйте мыльную воду, чтобы проверить, есть ли утечка в заменяемом газовом баллоне. Убедившись в отсутствии утечки, затяните газовый баллон и редукционный клапан. Убедитесь, что переключатель редукционного клапана находится в закрытом состоянии. Сначала медленно включите переключатель на газовом баллоне против часовой стрелки перед регулировкой. Ручка редукционного клапана обеспечивает соответствие давления воздуха на выходе газового баллона требованиям (0,2 МПа, 0,6 МПа).

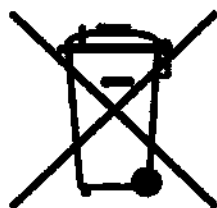
Примечание. Перед использованием газового баллона необходимо проверить информацию на газовом баллоне, чтобы убедиться что газовый баллон в норме.

7.10. Проверка безопасности и техническое обслуживание

Пользователь должен принять меры безопасности в качестве первого требования в процессе эксплуатации и технического обслуживания, а проверка безопасности прибора должна проводиться не менее одного раза в месяц. Проверка и техническое обслуживание включает *следующие* элементы:

1. Проверьте, является ли поверхность для размещения прибора прочной и надежной, а также устойчиво ли установлен сам прибор. Можно использовать визуальный осмотр и ручную проверку. Следите за тем, чтобы все опорные ножки прибора соприкасались с поверхностью, и сила была равномерной (прибор не должен качаться от прикосновения руками). Проверьте ножки прибора – на них не должно быть деформации. Соединительные части прибора должны быть плотно и прочно соединены;
2. Проверка заземления прибора должна проверяться не менее одного раза в год;
Метод проверки должен соответствовать новым требованиям к сопротивлению заземления менее или равному 1 Ом. После этого сопротивление заземления необходимо проверять не менее одного раза в год, чтобы убедиться, что сопротивление заземления должно быть менее 4 Ом (предпочтительно менее 2 Ом). Если заземление не соответствует требованиям, следует немедленно выполнить операцию отключения питания и уведомить соответствующих специалистов для выяснения причин плохого заземления. При необходимости заземляющий провод необходимо перестроить в соответствии с требованиями;
3. Проверка всей машины, пользователь должен проводить проверку всего прибора каждые шесть месяцев: внешний вид должен быть без ржавчины и повреждений, соединения не должны быть выступающими и острыми, а также не должны быть увеличены. Не должно быть расшатывания, коррозии и подгорания каких-либо интерфейсов. Если требования не соблюдены и прибор необходимо выключить, обратитесь к уполномоченному представителю производителя на территории Российской Федерации (РФ);
4. Техническое обслуживание и очистку интерфейса прибора следует выполнять при отключенном источнике питания и категорически избегать проведения осмотра и технического обслуживания при включенном питании.

8. Утилизация отходов



Обращение с расходными материалами, относящимися к прибору: Расходные материалы, такие как наконечники пипеток и вials для проб, могут быть загрязнены биологическим материалом, который могут быть заражены инфекционными источниками. Они должны быть отсортированы и помещены в герметичные контейнеры, подвергнуты автоклавированию, а затем переупакованы в пластиковые пакеты высокого давления с цветовой маркировкой для сжигания. В частности, централизованная и безвредная обработка отходов осуществляется в соответствии с «Правилами обращения с медицинскими отходами».

Очистка отработанных газов прибора: В этом продукте используется азот высокой чистоты. Во время анализа и работы прибора большая часть выхлопных газов представляет собой азот, а небольшое количество – органические отработанные газы. После сброса выхлопных газов их следует отводить по специальному трубопроводу, проведя испытания в соответствии с национальными стандартами выбросов для соответствующих загрязнителей воздуха.

Обработка отработанной жидкости прибора: Отработанная жидкость, образующаяся во время работы прибора, должна классифицироваться и собираться в специальные емкости для отработанной жидкости и обрабатываться ежедневно. Жидкие отходы могут быть сконцентрированы во временном хранилище жидких отходов, соответствующем стандарту, и своевременно обработаны специальным лицом. Конкретные требования должны выполняться в соответствии с «Правилами обращения с медицинскими отходами».

Утилизация основного блока прибора: Этот продукт содержит электронные отходы или электронное оборудование. Его нельзя утилизировать вместе с несортированными бытовыми отходами, его необходимо собирать отдельно в соответствии с применимыми национальными или ведомственными правилами в отношении отходов электронного оборудования.

9. Общая информация об ошибках при эксплуатации медицинского изделия для диагностики *in vitro*

Общие способы устранения неполадок указаны в таблице 9.1.

Таблица 9.1. Общие способы устранения неполадок

Проблема	Возможная причина	Решение
Тип: Не удалось подключить		
Компьютер потерял связь с масс-спектрометром (MS)	Сетевой кабель неправильно подключен	Проверьте, надежно ли соединение сетевого кабеля между хостом компьютера и хостом масс-спектрометра. Проверьте, горит ли индикатор порта в 8-портовом высокоскоростном сетевом коммутаторе.
	После замены программного обеспечения программный адрес не настраивается	Установите IP-адрес программного обеспечения на тот же сегмент сети 172.29.4.0~255, что и IP-адрес узла масс-спектрометра (в зависимости от IP-адреса конкретного прибора). При необходимости перезагрузите компьютер и масс-спектрометр.
Компьютер потерял связь с жидкостным хроматографом (LC)	Кабель последовательного порта неправильно подключен	Проверьте, правильно ли подключены хост компьютера и кабель последовательного порта жидкостного хроматографа.
	Модуль жидкостной хроматографии выключен	Проверьте исправность автосемплера, насоса бинарного ультравысокого давления, термостата колонок и источника питания.
Тип: Проблема с вакуумом		
После включения вакуумного насоса давление воздуха в ячейке столкновений составляет >2 Торр	Винты крышки вакуумной камеры и винты уплотнения вакуумного порта не затянуты	Проверьте, затянуты ли винты крышки вакуумной камеры и уплотнительные винты вакуумного интерфейса.
	Неисправность уплотнительного кольца конуса автосемплера	Проверьте уплотнительные кольца на предмет деформации и других отклонений.
Через 48 часов после включения молекулярного насоса давление в камере анализа составляет <4E-6Торр	Загрязнение вакуумной камеры водяным паром	Если после 48 часов работы молекулярного насоса проблема с вакуумом сохраняется, обратитесь к соответствующему специалисту по послепродажному обслуживанию.
	Не затянут фланец соединения газа	Проверьте крепежный фланец.
Тип: Проблема с сигналом		
Интенсивность пика на масс-спектре не стабильна	Настройка напряжения не соответствует норме	Проверьте, все ли настройки напряжения на интерфейсе в норме.
	Капилляр заблокирован	С помощью лазерной указки проверьте, не является ли распыление нестабильным, если нет, замените капилляр.
	Неправильное положение датчика	Отрегулируйте горизонтальное положение датчика по центру и отрегулируйте вертикальное положение в соответствии с рекомендуемым значением; Отрегулируйте капиллярное растяжение до 1-2 мм.
	Настройки газа атомайзера не в норме.	Проверьте настройку распыляющего газа и обратную связь, нормальный диапазон составляет 0-1 л/мин.
	Настройка скорости потока шприцевого насоса. Значение слишком маленькое	Проверьте, не превышает ли скорость потока шприцевого насоса более 5 мкл.
	Впускной фитинг ионного источника из	Убедитесь, что фитинги из PEEK затянуты, а концы трубок из PEEK плоские.

Проблема	Возможная причина	Решение
	РЕЕК установлен неправильно.	
Отсутствие сигнала, сила θ_{cps}	Настройка скорости потока шприцевого насоса. Значение слишком маленькое.	Проверьте, не превышает ли скорость потока шприцевого насоса более 5 мкл.
	Капилляр заблокирован	При выключенном высоком давлении используйте лазерную указку, чтобы проверить наконечник датчика на наличие жидкости. Если жидкости нет, проверьте, не забит ли капилляр, или попробуйте заменить капилляр.
	Температура десольватации слишком высока	При вводе образцов с низкой скоростью потока (5мкл–20мкл/мин температура газа десольватации не должна быть слишком высокой, что может привести к отсутствию распыления. Попробуйте снизить температуру или отключить газ десольватации.
	Настройка напряжения не соответствует норме	Проверьте, все ли настройки напряжения на интерфейсе в норме.
Отсутствие сигнала, сила θ_{cps}	Неправильная настройка газовой трубки	Убедитесь, что параметры распыляющего газа, газа десольватации, газа обратной продувки и газа столкновения соответствуют норме.
	Неправильная настройка температуры	Проверьте правильность настроек температуры газа десольватации и температуры вакуумного интерфейса.
	Дефлектор, пробоотборный конус	Проверьте, не загрязнены ли перегородка и конус для отбора проб, и очистите его.
	Капиллярная настройка высокого давления нецелесообразна	Отрегулируйте капиллярное высокое давление.
	Низкое напряжение детектора	Попробуйте увеличить напряжение детектора.
Повышенный базовый шум на графике TIC (> 500 нмп/с)	Повышенный химический шум	Установите энергию ионов MS1 и MS2 на максимальное значение, если уровень шума значительно снижается, это проблема химического шума: очистка конуса для отбора проб, проблемы с системой ЖХ, загрязнение подвижной фазы
	Повышенный электрический шум	Установите энергию ионов MS1 и MS2 на максимальное значение, если уровень шума существенно не меняется, это проблема электрического шума. Пожалуйста, проверьте, нормальное ли напряжение детектора, или обратитесь к соответствующему персоналу по послепродажному обслуживанию.
Тип: Разное		
Колебания базовой линии	Попадание пузырьков воздуха в инжекцию	Проверьте путь потока пробы
	Нестабильный нагрев	Проверьте, нормальная ли температура обратной связи нагрева
Раздвоение пиков	Ионный ток слишком высок	Уменьшите напряжение детектора или концентрацию образца
	Изменение мертвого объема в жидкостном хроматографе	Устранение неполадок в путях потока жидкостного хроматографа
	Снижение эффективности колонки	Проверить наличие проблем с хроматографической колонкой

Проблема	Возможная причина	Решение
Сбой программного обеспечения	Сбой, вызванный открытием слишком большого количества окон из-за слишком быстрой работы мыши	Перезапустите программное обеспечение
Нижний компьютер зависает	Слишком много данных	Перезагрузите хост масс-спектрометра
Индикатор включения прибора не горит	Блок питания отключен и напряжение не соответствует требованиям	1. Проверьте, соответствует ли входное напряжение требованиям. 2. Проверьте, не плохой ли контакт в гнезде питания тестера и не перегорел ли предохранитель, при необходимости устраните плохой контакт или замените предохранитель на предохранитель той же спецификации.

Примечание. РЕЕК – полиэфирэфиркетон.

10. Дополнительная информация о медицинском изделии для диагностики *in vitro*

Коды сигналов ошибок указаны в таблице 10.1.

Таблица 10.1. Коды сигналов ошибок

Код ошибки	Содержание ошибки	Решение
0x01	Аномалия вакуума	1. Проверьте молекулярный насос. 2. Проверьте вакуумную камеру на утечку воздуха. 3. Проверьте вакуумметр.
0x03	Сбой скорости молекулярного насоса	1. Проверьте молекулярный насос. 2. Проверьте вакуумный насос.
0x04	Молекулярный насос отображает сигнал ERROR.	1. Получено путем просмотра руководства по молекулярному насосу. 2. Получение информации.
0x05	Превышена температура вакуумного интерфейса	1. Проверьте проводку. 2. Проверьте цепь контроля температуры.
0x06	Превышена температура газа десольватации	1. Проверьте проводку. 2. Проверьте цепь контроля температуры.
0x07	Превышен расход газа десольватации	1. Проверьте датчик потока. 2. Проверьте воздушный тракт.
0x08	Поток газа обратной продувки превышает предел	1. Проверьте датчик потока. 2. Проверьте воздушный тракт. 3. Проверьте схему измерения расхода.
0x09	Превышен воздушный поток при столкновении	1. Проверьте датчик потока. 2. Проверьте воздушный тракт. 3. Проверьте схему измерения расхода.
0x0A	Поток распыляющего газа превышает предел	1. Проверьте датчик потока. 2. Проверьте воздушный тракт.
0x0B	Связь между материнской платой и ПК нарушена	1. Проверьте конфигурацию сетевого порта программного обеспечения ПК. 2. Найдите локальную сеть. 3. Включите хост масс-спектрометра (MS). 4. Нажмите кнопку сброса на хосте масс-спектрометра (MS), чтобы перезапустить программное обеспечение более низкого уровня.
0x0C	Связь между платой управления микроклиматом и главной платой нарушена	1. Перезапустите плату среды. 2. Проверьте подключение.
0x0D	Связь вакуумметра с ячейкой столкновений нарушена	1. Проверьте вакуумметр. 2. Проверьте подключение. 3. Проверьте связь с материнской платой.
0x0E	Нарушение связи молекулярного насоса	1. Проверьте молекулярный насос. 2. Проверьте подключение. 3. Проверьте сообщения Совета по охране окружающей среды.
0x0F	Связь между пластиной и распыляющим газом MFC нарушена	1. Проверьте распыляющий газ MFC. 2. Проверьте подключение. 3. Проверьте сообщения Совета по охране окружающей среды.
0x10	Ошибка обнаружения шины FPGA	1. Заново подключите основную плату ARM. 2. Замените основную плату ARM.
0x11	Связь между пластиной и MFC обратной промывки нарушена	1. Проверьте обратную продувку MFC. 2. Проверьте подключение. 3. Проверьте сообщения Совета по охране окружающей среды.
0x12	Пластина и газ десольватации	1. Проверить десольватацию MFC.

Код ошибки	Содержание ошибки	Решение
	MFC неправильно обмениваются данными	2. Проверьте подключение. 3. Проверьте сообщения Совета по охране окружающей среды.
0x14	Нагрев вакуумного интерфейса и отказ нагрева	1. Проверить нагревательный провод. 2. Проверьте цепь контроля температуры.
0x15	Отказ нагрева газа десольватации	1. Проверить нагревательный провод. 2. Проверьте цепь контроля температуры.
0x81	Питание материнской платы +5VD ненормально	1. Проверьте блок питания (тестовые точки материнской платы: +5VD). 2. Проверьте ADC.
0x82	Напряжение питания материнской платы +1,2VD ненормально	1. Проверьте блок питания (тестовая точка материнской платы: +1.2VD). 2. Проверьте ADC.
0x83	Напряжение питания материнской платы +3,3VD ненормально	1. Проверьте блок питания (тестовые точки материнской платы: +3.3VD). 2. Проверьте ADC.
0x84	Блок питания материнской платы -5VA ненормальный	1. Проверьте блок питания (тестовые точки материнской платы: -5VA). 2. Проверьте ADC.
0x85	Блок питания материнской платы +5VA ненормальный	1. Проверьте блок питания (тестовые точки материнской платы: +5VA1). 2. Проверьте ADC.
0x86	Блок питания материнской платы -14VA ненормальный	1. Проверьте блок питания (тестовые точки материнской платы: -14VA1). 2. Проверьте ADC.
0x87	Блок питания материнской платы +14VA ненормальный	1. Проверьте блок питания (тестовые точки материнской платы: +14VA1). 2. Проверьте ADC.
0x8B	Аномальное напряжение источника питания PC	1. Проверьте блок питания (тестовые точки материнской платы: V_RF_MON1). 2. Проверьте ADC.
0x8D	Аномальная температура материнской платы	1. Отрегулируйте температуру окружающей среды до требуемого диапазона, а затем включите прибор. 2. Проверьте цепь измерения температуры.
0x91	Источник ионов не установлен	1. Установите источник ионов. 2. Проверьте ссылку обнаружения источника ионов.
0x92	Температура вакуумного интерфейса не достигает целевого значения	1. Проверьте параметры контроля температуры.
0x93	Температура газа десольватации не достигает целевого значения	1. Проверьте параметры контроля температуры.
0x94	Расход газа десольватации не достигает целевого значения	1. Проверьте воздушный тракт. 2. Проверить десольватацию MFC.
0x95	Расход газа обратной продувки не достигает целевого значения	1. Проверьте воздушный тракт. 2. Проверьте обратную продувку MFC. 3. Проверьте цепи управления потоком и обратной связи.
0x96	Воздушный поток при столкновении не достигает целевого значения	1. Проверьте воздушный тракт. 2. Проверьте газ в ячейке столкновений MFC. 3. Проверьте цепи управления потоком и обратной связи.
0x97	Расход распыляющего газа не достигает целевого значения	1. Проверьте воздушный тракт. 2. Проверьте распыляющий газ MFC.
0x98	Ненормальная температура окружающей среды	1. Отрегулируйте температуру окружающей среды до требуемого диапазона, а затем включите прибор. 2. Проверьте цепь измерения температуры.
0x9A	Электропитание платы окружающей среды -5VA ненормально	1. Проверьте источник питания (точка проверки платы окружающей среды: -5VA1). 2. Проверьте ADC.

Код ошибки	Содержание ошибки	Решение
0x9B	Электропитание платы окружающей среды +5VA ненормально	1. Проверьте источник питания (точка проверки платы окружающей среды: +5VA). 2. Проверьте ADC.
0x9E	Предупреждение о молекулярном насосе	1. Получено путем просмотра руководства по молекулярному насосу. 2. Получение информации.
0xA0	Аномальное напряжение на конусе для отбора проб	1. Проверьте источник питания платы напряжения передающей линзы. 2. Проверьте цепи управления напряжением и обратной связи.
0xA1	Энергия столкновений ненормальна	1. Проверьте источник питания платы напряжения передающей линзы.
0xA2	Входное напряжение ячейки столкновения не соответствует норме	2. Проверьте цепи управления напряжением и обратной связи.
0xA3	Выходное напряжение ячейки столкновений не соответствует норме	1. Проверьте источник питания платы напряжения передающей линзы.
0xA4	Ненормальное напряжение трансмиссионного стержня 3	2. Проверьте цепи управления напряжением и обратной связи.
0xA5	Напряжение передающей линзы 1 не соответствует норме (исходное)	1. Проверьте источник питания платы напряжения передающей линзы.
0xA6	Входное напряжение детектора не соответствует норме	1. Проверьте вход детектора в модуль высокого давления. 2. Проверьте цепи управления напряжением и обратной связи.
0xA7	Аномальное капиллярное напряжение давление	1. Проверьте капиллярный модуль высокого давления. 2. Проверьте цепи управления напряжением и обратной связи.
0xA9	Ненормальное напряжение множителя детектора	1. Убедитесь, что модуль высокого напряжения множителя детектора не соответствует норме. 2. Проверьте цепи управления напряжением и обратной связи.
0xAA	ms1 аномалия ионной энергии	1. Проверьте источник питания платы напряжения передающей линзы.
0xAB	ms2 аномалия ионной энергии	2. Проверьте цепи управления напряжением и обратной связи.
0xAC	мс2 Аномальное напряжение перед стержнем	1. Проверьте источник питания платы напряжения передающей линзы.
0xAD	Напряжение отклонения детектора не соответствует норме	2. Проверьте цепи управления напряжением и обратной связи.
0xAE	Отклонение напряжения передающей линзы 3	1. Проверьте источник питания платы напряжения передающей линзы.
0xAF	Ненормальное напряжение предварительного стержня ms1	2. Проверьте цепи управления напряжением и обратной связи.
0xB1	Аномальное напряжение на наружной стенке трансмиссионного стержня 1	1. Проверьте источник питания платы напряжения передающей линзы.
0xB2	Ненормальное напряжение на трансмиссионном стержне 1	2. Проверьте цепи управления напряжением и обратной связи.
0xB3	Ненормальное напряжение на трансмиссионном стержне 2	1. Проверьте источник питания платы напряжения передающей линзы.
0xB4	Отклонение напряжения передающей линзы 2	2. Проверьте цепи управления напряжением и обратной связи.
0xB6	qOut2 ненормальное напряжение	1. Проверьте источник питания платы напряжения передающей линзы.
0xB7	Ненормальное напряжение перегородки	1. Проверьте модуль высокого напряжения перегородки. 2. Проверьте цепи управления напряжением и обратной связи.

11. Калибровочные стандарты

Для калибровки необходимо использовать стандартный раствор Йодида натрия (NaI) с концентрацией 0,1 мг/мл и метанол:сверхчистая вода = 1:1 (об./об.). Все используемые растворители должны быть чистоты «Для хроматографии» или выше. Масса характеристического иона, представляющего собой комплексный ион NaI, показана в таблице 11.1.

Таблица 11.1. Калибровочные стандарты

Положительные ионы (m/z)		Отрицательные ионы (m/z)	
22,99	1072,25	126,90	1176,16
172,88	1222,14	276,80	1326,06
322,78	1372,04	426,70	1475,95
472,67	1521,93	576,59	1625,85
622,57	1671,83	726,48	1775,74
772,46	1821,72	876,38	1925,64
922,36	1971,61	1026,27	2075,53

Примечание. Для каждой дополнительной молекулы NaI масса увеличивается на 150 единиц.
m/z – масса/заряд.

12. Запасные части и расходные материалы прибора

Запасные части и расходные материалы Системы HELICON® Inspero 5200 указаны в таблице 12.1.

Таблица 12.1. Запасные части и расходные материалы Системы HELICON® Inspero 5200

Код запчасти	Название запчасти	Решение
1360400510	Капилляр источника ионов (PCS)	Цикл замены два года, техническое обслуживание каждые шесть месяцев, должно быть обеспечено производителем
1360901001	Соединитель шприца	Замена в случае утечки, должна быть обеспечена производителем
1440600192	1мл шприц	Шприцевой насос для инъекций на 1,5 мл, требуется производителем
1500101216	Масло для насоса (1 л / бутылка) (2 бутылки на единицу)	/
–	Тюнинговая жидкость (комплект)	Требуется производителем
–	Калибровочный раствор (набор)	Требуется производителем
–	Нагреваемые керамические трубки в сборе	Требуется производителем
1350200018	Электронный блок перемножения	/
1440600137	Флакон с растворителем подвижной фазы	Рекомендуется флакон с растворителем подвижной фазы объемом 1 л.
1360400108	Предварительно нарезанные трубки для хроматографии, наружный диаметр 1/16", внутренний диаметр 0,005", длина 50 см, 2 шт. в упаковке	Трубка для хроматографии. Предварительно нарезанный внешний диаметр 1/16", внутренний диаметр 0,005, рекомендуемая длина не менее 50 см.
1360900988	Стандартные фитинги из нержавеющей стали 1/16	Стандартные фитинги из нержавеющей стали 1/16
1440600174	Вials по 2 мл (упаковка по 100 шт., без прокладок)	Вials по 2 мл
1440600199	Крышки и прокладки для вials по 2 мл (100 шт. в коробке)	/
1360901000	Количественная петля 100 мкл	Требуется производителем
1440600197	15 мкл шприц	Требуется производителем

Код запчасти	Название запчасти	Решение
1360100190	250мкл шприц	Требуется производителем
1440600140	Стандартный держатель для образцов на 48 позиций	/
1360400509	C18 Колонка для жидкостной хроматографии высокого давления	/
1360400727	C18 Колонка для жидкостной хроматографии высокого давления	/
1360400514	Трубка из PEEK (3 м/упаковка)	/
1360900993	Фитинги из PEEK (5 шт./уп.)	/
1360901515	PEEK блок	/
1360900999	Штекер из PEEK	/
1360900342	Муфта из нержавеющей стали (используется только тогда, когда колонка не используется)	Требуется производителем
1420500007	Лазерный принтер	/
1240400003	Регулятор параметров переменного тока (15 кВА)	/
1240400106	Хост UPS&10кВА&265х514х455мм	/
1240300216	Батарея UPS & 38 Ач	/
1330300228	Батарейный шкаф UPS & А8	/
1350200037	Детектор УФ-матрицы (диапазон длин волн: 190–700 нм)	/
1360900999	Штекер из PEEK	/
1360900342	Муфта из нержавеющей стали (используется только тогда, когда колонка не используется)	Требуется производителем
1420500007	Лазерный принтер	/
1240400003	Регулятор параметров переменного тока (15 кВА)	/
1240300216	Батарея UPS & 38 Ач	/
1330300228	Батарейный шкаф UPS & А8	/
1350200037	Детектор УФ-матрицы (диапазон длин волн: 190–700 нм)	/

Примечание. PEEK – полиэфирэфиркетон.

13. Заявление производителя по электромагнитной совместимости (ЭМС)

Система соответствует требованиям по ограничению излучения для медицинского оборудования группы I, класса А, указанным в стандартах EN 61326-1, EN 61326-2-6.

При эксплуатации электрического оборудования необходимо принимать особые меры предосторожности в отношении электромагнитной совместимости (ЭМС). Его установка и запуск должны производиться в соответствии с данными ЭМС. Эти условия эксплуатации должны быть обеспечены пользователем Системы HELICON® Inspero 5200 (таблицы 13.1–13.3.).

Таблица 13.1. Электромагнитные помехи

Инструкции и заявление производителя: электромагнитные помехи		
Система предназначена для применения в электромагнитной среде, описанной ниже. Пользователь должен убедиться, что система применяется в указанной среде.		
Проверка уровня помех	Соответствие	Электромагнитная среда: рекомендации
РЧ-излучение CISPR 11 EN55011	Группа 1	РЧ-излучение используется только для внутренних функций системы. Поэтому уровни РЧ-излучения невелики, и вероятность того, что это излучение станет причиной возникновения помех в находящемся вблизи электронном оборудовании, крайне мала.
РЧ-излучение CISPR 11 EN55011	Класс А	Система подходит для работы в любых помещениях, а также для непосредственного подключения к бытовой электросети низкого напряжения, используемой для электроснабжения жилых помещений.
Гармонические излучения IEC 61000-3-2	Соответствует	
Колебания/выбросы напряжения IEC 61000-3-3	Соответствует	

Таблица 13.2. Помехозащищенность

Инструкции и заявление производителя: помехозащищенность			
Система предназначена для применения в электромагнитной среде, описанной ниже. Пользователь должен убедиться, что система применяется в указанной среде.			
Порт	Наименование электромагнитной помехи	Стандарт ЭМС	Значение параметра испытаний
Порт корпуса	Электростатический разряд	IEC 61000-4-2	2 кВ и 4 кВ (контактный разряд) 2 кВ, 4 кВ, 8 кВ (воздушный разряд)
	Электромагнитное поле	IEC 61000-4-3	3 В/м (от 80 МГц до 1 ГГц) 3 В/м (от 1,4 ГГц до 2 ГГц) 1 В/м (от 2,0 ГГц до 2,7 ГГц)
	Магнитное поле промышленной частоты	IEC 61000-4-8	3 А/м (50 Гц, 60 Гц)
Порт электропитания переменного тока (включая защитное заземление)	Провалы напряжения электропитания	IEC 61000-4-11	0% в течение 1-го периода 40% в течение 5 периодов 70% в течение 25 периодов
	Кратковременные прерывания напряжения электропитания	IEC 61000-4-11	Менее 5% в течение 250 периодов
	Наносекундные импульсные помехи	IEC 61000-4-4	1 кВ (5/50 нс, 5 кГц)
	Микросекундные импульсные помехи большой энергии	IEC 61000-4-5	1 кВ / 2 кВ
	Кондуктивные помехи, наведенные радиочастотными полями	IEC 61000-4-6	3 В (от 150 кГц до 80 МГц)
Порты ввода/вывода,	Наносекундные импульсные помехи	IEC 61000-4-4	0,5 кВ (5/50 нс, 5 кГц)

сигнальные порты и порты управления	Микросекундные импульсы большой энергии	IEC 61000-4-5	Не применяют
	Кондуктивные помехи, наведенные радиочастотными полями	IEC 61000-4-6	3 В (от 150 кГц до 80 МГц)

Таблица 13.3. Разделяющие расстояния

Инструкции и заявление производителя: помехозащищенность (расстояние зависит от максимальной выходной мощности радиопередающего оборудования)			
Система рассчитана на эксплуатацию в электромагнитной среде с контролируемым уровнем излучаемых радиочастотных помех. Оператор системы может содействовать предотвращению возникновения электромагнитных помех посредством поддержания необходимого минимального расстояния между переносным радиопередающим оборудованием (передатчиками) и системой в соответствии с рекомендациями, изложенными ниже.			
Максимальная расчетная выходная мощность передатчика (В×А)	Разделяющее расстояние в соответствии с частотой передатчика (м)		
	от 150 кГц до 80 МГц	от 80 до 800 МГц	от 800 МГц до 2,5 ГГц
0,01	0,12	0,12	0,23
0,1	0,38	0,38	0,73
1	1,2	1,2	2,3
10	3,8	3,8	7,4
100	12	12	23
Для передатчиков, значения максимальной расчетной выходной мощности, которых не приведены выше, рекомендованное разделяющее расстояние d в метрах (м) может быть вычислено по формуле, соответствующей частоте передатчика, где P – максимальная расчетная выходная мощность передатчика в ваттах (Вт), заявленная Производителем.			
Примечание 1: При частотах 80 МГц и 800 МГц применяется разделяющее расстояние, соответствующее более высокому частотному диапазону.			
Примечание 2: Приведенные указания применимы не ко всем ситуациям. На распространение электромагнитного излучения оказывает влияние его поглощение и отражение конструкциями, предметами, а также телами людей, находящихся вблизи системы.			

14. Руководство пользователя специальным модулем «NBS Analyst»

14.1. Общее описание

Специальный модуль «NBS Analyst» для анализа данных в ходе скрининга новорожденных в основном программном обеспечении включает *следующие* этапы:

1. Ввод в прибор соединения (внешние и внутренние стандарты для всех анализов) и указание режима сканирования и соответствующих ионов;
2. Добавление элементов анализа и указание требуемых результатов (например, дозирование, концентрация или уравнение), концентрации и относительного коэффициента отклика (RRF) внутреннего стандарта;
3. Определение количественного метода для пакетной обработки данных, добавление выводимых элементов анализа, вводимого объема образца и объема внутреннего стандарта, указание формы отчета;
4. Выбор количественного метода в списке пакетной обработки, добавление данных об образце, указание пути и формата итогового отчета и формирование отчета с результатами для к печати.



Дважды щелкните по иконке на рабочем столе, чтобы запустить специальный модуль «NBS Analyst», основной интерфейс которой представлен на рисунке 14.1.

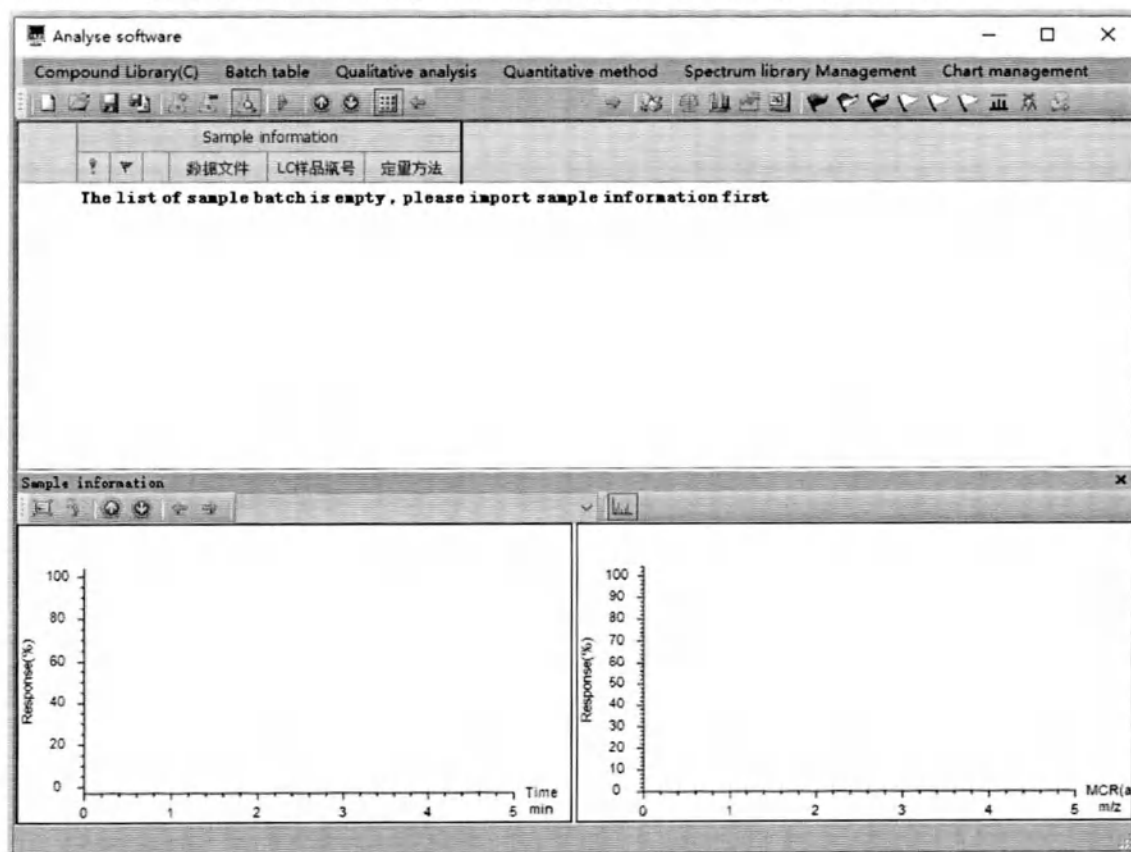


Рисунок 14.1. Основной интерфейс специального модуля «NBS Analyst».

ДЛЯ РИСУНКА 14.1.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Compound Library (C)	Библиотека соединений (C)
Batch table	Таблица серий
Qualitative analysis	Количественный анализ
Spectrum Library Management	Управление библиотекой спектров
Chart Management	Управление графиками
The list of sample batch is empty, please import sample information first.	Список образцов для пакетной обработки пуст. Для начала выполните импорт образца.

ДЛЯ РИСУНКА 14.1.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Sample Information	Информация об образце
Response (%)	Отклик (%)
Time, min	Время, мин
MCR (a), m/z	Многомерное разрешение кривой (a), масса/заряд

14.2. Создание соединения

Выберите вкладку Compound Library (L) («Библиотека соединений (L)») в строке меню в верхней части главного интерфейса, чтобы открыть интерфейс библиотеки соединений, как показано на рисунке 14.2.

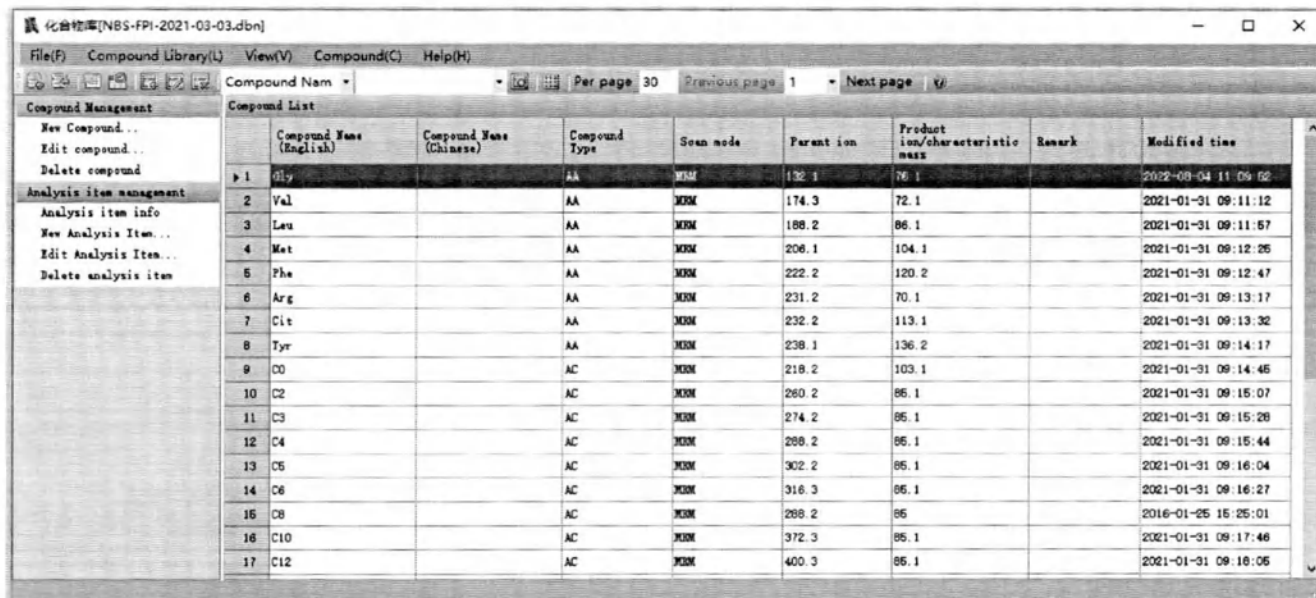


Рисунок 14.2. Интерфейс создания соединения (общий вид).

ДЛЯ РИСУНКА 14.2.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File (F)	Файл (F)
Compound Library (L)	Библиотека соединений (L)
View (V)	Вид (V)
Compound (C)	Соединение (C)
Help (H)	Справка (H)
Compound nam	Название соединения
Per page	На страницу
Previous page	Предыдущая страница
Next page	Следующая страница
Compound management	Управление соединениями
New compound	Новое соединение
Edit compound	Редактировать соединение
Delete compound	Удалить соединение
Analysis item management	Управление элементами анализа
Analysis time info	Информация о времени анализа
New analysis item	Новый элемент анализа
Edit analysis item	Редактировать элемент анализа
Delete analysis item	Удалить элемент анализа
Compound name (English)	Название соединения (на английском)
Compound name (Chinese)	Название соединения (на китайском)
Compound Type	Тип соединения
Scan mode	Режим сканирования
Parent ion	Ион-предшественник
Product ion/characteristic mass	Дочерний ион/характеристическая масса

ДЛЯ РИСУНКА 14.2.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Remark	Примечание
Modified time	Время изменения
Gly	Глицин
Val	Валин
Leu	Лейцин
Met	Метионин
Phe	фенилаланин
Arg	Аргинин
Cit	Цитруллин
Tyr	Тирозин
C0	Свободный карнитин
C2	C2-карнитин
C3	C3-карнитин
C4	C4-карнитин
C5	C5-карнитин
C6	C6-карнитин
C8	C8-карнитин
C10	C10-карнитин
C12	C12-карнитин
AA	Аминокислоты
AC	Ацилкарнитины

Нажмите кнопку Compound Management («Управление соединениями») на левой панели навигации, выберите вкладку New («Новое») и введите во всплывающем окне название, тип соединения, режим сканирования, ион-предшественник и дочерний ион/характеристическую массу, как показано на рисунке 14.3.

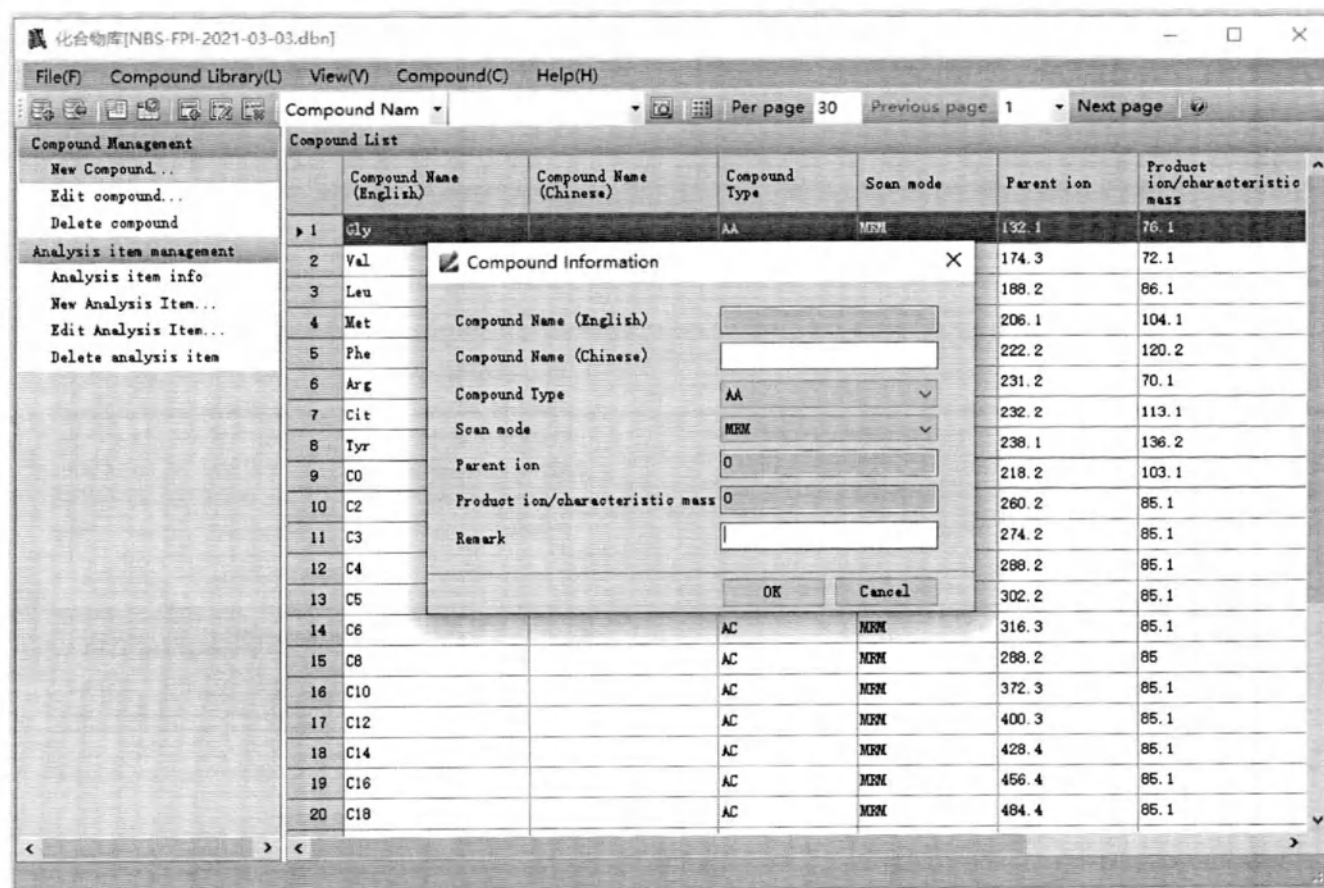


Рисунок 14.3. Интерфейс создания соединения.

ДЛЯ РИСУНКА 14.3.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File (F)	Файл (F)
Compound Library (L)	Библиотека соединений (L)
View (V)	Вид (V)
Compound (C)	Соединение (C)
Help (H)	Справка (H)
Compound nam	Название соединения
Per page	На страницу
Previous page	Предыдущая страница
Next page	Следующая страница
Compound management	Управление соединениями
New compound	Новое соединение
Edit compound	Редактировать соединение
Delete compound	Удалить соединение
Analysis item management	Управление элементами анализа
Analysis time info	Информация о времени анализа
New analysis item	Новый элемент анализа
Edit analysis item	Редактировать элемент анализа
Delete analysis item	Удалить элемент анализа
Compound name (English)	Название соединения (на английском)
Compound name (Chinese)	Название соединения (на китайском)
Compound Type	Тип соединения
Scan mode	Режим сканирования
Parent ion	Ион-предшественник
Product ion/characteristic mass	Дочерний ион/характеристическая масса
Compound information	Информация о соединении
Modified time	Время изменения
Compound name (English)	Название соединения (на английском)
Compound name (Chinese)	Название соединения (на китайском)
Compound Type	Тип соединения
Scan mode	Режим сканирования
Parent ion	Ион-предшественник
Remark	Примечание
Cancel	Отменить
Gly	Глицин
Val	Валин
Leu	Лейцин
Met	Метионин
Phe	фенилаланин
Arg	Аргинин
Cit	Цитруллин
Tyr	Тирозин
C0	C0-карнитин
C2	C2-карнитин
C3	C3-карнитин
C4	C4-карнитин
C5	C5-карнитин
C6	C6-карнитин
C8	C8-карнитин
C10	C10-карнитин
C12	C12-карнитин

Название соединения: отображается на английском и китайском языках. Английские аббревиатуры аминокислот и ацилкарнитинов дополняются буквосочетанием «IS», если это внутренний стандарт, или буквой «N», если они были преобразованы в бутил. Китайское название необязательно, и, если оно вводится, то отображается в элементах анализа в сочетании с английским названием, например: 丙氨酸 (Ala), 游离肉碱(C0) или 戊二酰基肉碱(C5DC+C6OH).

Тип соединения: соединения подразделяются на два типа: AA (аминокислота) и AC (ацилкарнитин).

Режим сканирования: предусмотрено 3 режима сканирования: NLS (сканирование потери нейтральных частиц), PS (сканирование ионов-предшественников) и MRM (мониторинг множественных реакций).

Ион-предшественник: введите ион MS1, чаще всего он равен молекулярной массе соединения плюс 1.

Дочерний ион/характеристическая масса: зависит от режима сканирования, как показано ниже:

Режим сканирования	Дочерний ион/характеристическая масса
Сканирование потери нейтральных частиц (NLS)	120 (потеря массы)
Сканирование иона-предшественника (PS)	85
Мониторинг множественных реакций (MRM)	Дочерние ионы аминокислот и карнитина

14.3. Создание элементов анализа

Нажмите кнопку Analytical Item Management («Управление элементами анализа») на левой панели навигации, далее выберите вкладку New («Новый») и во всплывающем окне выберите тип, как показано на рисунке 14.4.

Результаты для *следующих* типов элементов анализа:

- 1) Strength analysis («Анализ дозирования (внутренних стандартов)»): рассчитывается концентрация указанного соединения;
- 2) Concentration analysis («Анализ концентрации»): рассчитывается концентрация указанного соединения;
- 3) Equation analysis («Анализ уравнения»): рассчитывается численное значение уравнения.

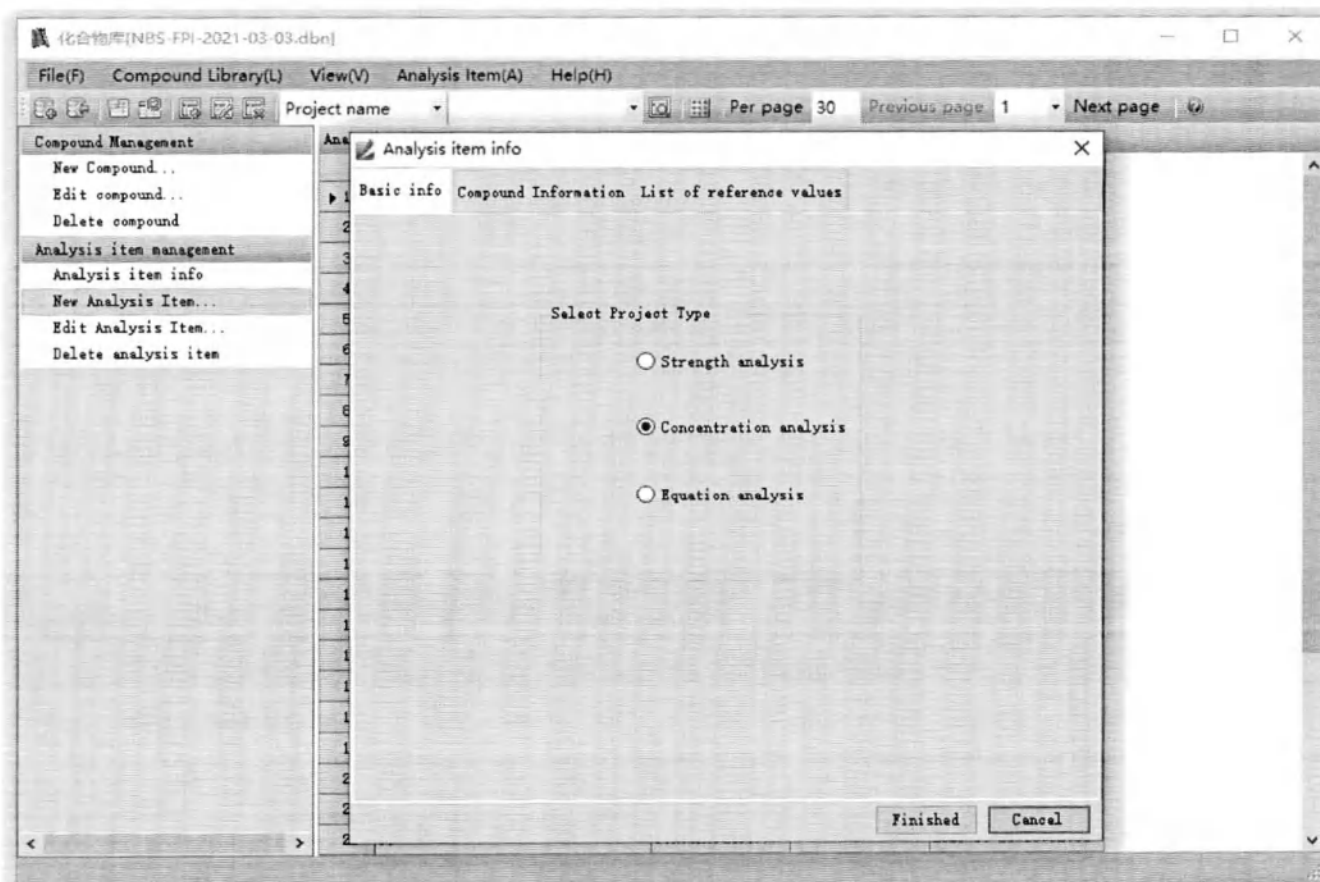


Рисунок 14.4. Интерфейс создания элементов анализа.

ДЛЯ РИСУНКА 14.4.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
File (F)	Файл (F)
Compound Library (L)	Библиотека соединений (L)
View (V)	Вид (V)
Analysis item (A)	Элемент анализа (A)

ДЛЯ РИСУНКА 14.4.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Help (H)	Справка (H)
Project name	Название проекта
Per page	На страницу
Previous page	Предыдущая страница
Next page	Следующая страница
Compound management	Управление соединениями
New compound	Новое соединение
Edit compound	Редактировать соединение
Delete compound	Удалить соединение
Analysis item management	Управление элементами анализа
Analysis time info	Информация о времени анализа
New analysis item	Новый элемент анализа
Edit analysis item	Редактировать элемент анализа
Delete analysis item	Удалить элемент анализа
Analysis item info	Информация об элементе анализа
Basic info	Основная информация
Compound information	Информация о соединении
List of reference values	Список контрольных значений
Select Project type	Выбор типа проекта
Strength analysis	Анализ дозирования (внутренних стандартов)
Concentration analysis	Анализ концентрации
Equation analysis	Анализ уравнения
Finished	Готово
Cancel	Отмена

14.3.1. Элемент анализа дозирования (внутренних стандартов)

Возможно выбрать создание элемента анализа дозирования для всех внутренних стандартов, и тогда в отчет, который используется для общего контроля качества и проверки, включается только дозирования внутренних стандартов. Для внешних стандартов этот шаг можно пропустить.

Выберите в качестве элемента анализа вкладку Strength Analysis («Анализ дозирования (внутренних стандартов)») и введите название элемента и указанное соединение во вкладке Compound Information («Информация о соединении»), как показано на рисунке 14.5.

Analysis item info [X]

Basic info | **Compound Information** | List of reference values

Project name:

Notes:

Select analyte

Filter criteria:

	Compound name	Compound type	Precursor ion	Product ion
► 1	Gly	AA	132.1	76.1
2	Val	AA	174.3	72.1
3	Leu	AA	188.2	86.1
4	Met	AA	206.1	104.1
5	Phe	AA	222.2	120.2
6	Arg	AA	231.2	70.1
7	Cit	AA	232.2	113.1
8	Tyr	AA	238.1	136.2
9	C0	AC	218.2	103.1
10	C2	AC	260.2	85.1
11	C3	AC	274.2	85.1
12	C4	AC	288.2	85.1
13	C5	AC	302.2	85.1
14	C6	AC	316.3	85.1
15	C8	AC	288.2	85

Рисунок 14.5. Интерфейс создания элемента анализа дозирования (внутренних стандартов).

ДЛЯ РИСУНКА 14.5.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analysis time info	Информация о времени анализа
Basic info	Основная информация
Compound information	Информация о соединении
List of reference values	Список контрольных значений
Project name	Название проекта
Notes	Примечание
Select analyte	Выбор аналита
Filter criteria	Фильтр
Confirm	Подтвердить
Clear	Очистить
Compound name	Название соединения
Compound type	Тип соединения
Precursor ion	Ион-предшественник
Product ion	Дочерний ион
Finished	Готово
Cancel	Отмена
Gly	Глицин
Val	Валин
Leu	Лейцин
Met	Метионин
Phe	фенилаланин

ДЛЯ РИСУНКА 14.5.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Arg	Аргинин
Cit	Цитруллин
Tyr	Тирозин
C0	C0-карнитин
C2	C2-карнитин
C3	C3-карнитин
C4	C4-карнитин
C5	C5-карнитин
C6	C6-карнитин
C8	C8-карнитин
AA	Аминокислота
AC	Ацилкарнитин

Введение названия элемента: чаще всего для обеспечения согласованности вводится наименование соединения. Рекомендуется нажать непосредственно на соответствующую строку соединения, тогда программа автоматически введет название соединения в поле названия элемента.

Примечание. Данный этап является необязательным.

Список соединений: все соединения в базе данных отображаются в списке. Если из-за большого числа соединений в списке трудно найти нужное, введите ключевое слово нужного соединения в поле фильтра, чтобы быстро найти его. Например, если необходимо найти соединение, название которого содержит букву «А», введите букву «А» и нажмите клавишу Enter («Ввод») или нажмите кнопку «ОК», чтобы отобразить в списке все соединения с буквой «А», как показано на рисунке 14.6.

Analysis item info

Basic info Compound Information List of reference values

Project name

Notes

Select analyte

Filter criteria A Confirm Clear

	Compound name	Compound type	Precursor ion	Product ion
1	Val	AA	174.3	72.1
2	Arg	AA	231.2	70.1
3	Asp	AA	246.2	144.3
4	Asn	AA	189.1	87.2
5	Asn-IS	AA	192.3	147.3
6	Ala-d3	AA	149.1	47.1
7	Arg-d4	AA	235.2	71.3
8	Val-d8	AA	182.3	80.1
9	Ala	AA	146.3	44.1

Рисунок 14.6. Интерфейс поиска соединения в списке соединений.

ДЛЯ РИСУНКА 14.6.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analysis time info	Информация о времени анализа
Basic info	Основная информация
Compound information	Информация о соединении

ДЛЯ РИСУНКА 14.6.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
List of reference values	Список контрольных значений
Project name	Название проекта
Notes	Примечание
Select analyte	Выбор анализа
Filter criteria	Фильтр
Confirm	Подтвердить
Clear	Очистить
Compound name	Название соединения
Compound type	Тип соединения
Precursor ion	Ион-предшественник
Product ion	Дочерний ион

Затем введите контрольное значение дозирования соединения во вкладке List of reference values («Список контрольных значений») справа, как показано на рисунке 14.7, *следующим* образом:

- 1) Выберите тип образца (unknown/blank/standard) («неизвестный/пустой/стандартный»), который может иметь различные контрольные значения. По умолчанию выбирается тип unknown (неизвестный). Нажмите кнопку Add («Добавить»), чтобы добавить контрольные значения для различных типов образцов;
- 2) Введите нижний контрольный предел: введите нижний контрольный предел дозирования, который по умолчанию равен 0, в имп./с;
- 3) Введите верхний контрольный предел: введите верхний контрольный предел дозирования, который по умолчанию равен ∞;
- 4) Выберите стандартную единицу измерения: единицей измерения по умолчанию является имп./с;
- 5) Наконец, нажмите кнопку Finished («Готово») ниже, чтобы завершить этот процесс.

Analysis item info

Basic info Compound Information List of reference values

Add Delete

	Sample type	Reference lower limit	Reference upper limit	Reference unit	Notes
1	UnKnown	2000	10000	cps	

Рисунок 14.7. Интерфейс введения контрольных значений дозирования соединения.

ДЛЯ РИСУНКА 14.7.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analysis time info	Информация о времени анализа
Basic info	Основная информация
Compound information	Информация о соединении
List of reference values	Список контрольных значений
Add	Добавить
Delete	Удалить
Sample type	Тип образца
Reference lower limit	Нижний контрольный предел
Reference upper limit	Верхний контрольный предел
Reference unit	Контрольная единица измерения
Notes	Примечание
Unknown	Неизвестно
cps	Импульсы в единицу времени

14.3.2. Элемент анализа концентрации

Необходимо создать элемент анализа концентрации для всех внешних стандартов.

Примечание. Для внутренних стандартов этот этап можно пропустить.

Выберите Concentration Analysis («Анализ концентрации») и введите название элемента, указанное соединение и соответствующий внутренний стандарт во вкладке Compound Information («Информация о соединении»), как показано на рисунке 14.8.

Analysis item info

Basic info | **Compound Information** | List of reference values

Project name:

Notes:

Select analyte

Filter criteria: Confirm Clear

	Compound name	Compound type	Precursor ion	Product ion
1	Gly	AA	132.1	76.1
2	Val	AA	174.3	72.1
3	Leu	AA	188.2	86.1
4	Met	AA	206.1	104.1
5	Phe	AA	222.2	120.2

Select internal standard

Filter criteria: Confirm Clear

	Compound name	Compound type	Precursor ion	Product ion
1	Gly	AA	132.1	76.1
2	Val	AA	174.3	72.1
3	Leu	AA	188.2	86.1
4	Met	AA	206.1	104.1
5	Phe	AA	222.2	120.2

Internal: µM Relative response calibration factor:

Finished Cancel

Рисунок 14.8. Интерфейс создания элемента анализа концентрации.

ДЛЯ РИСУНКА 14.8.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analysis time info	Информация о времени анализа
Basic info	Основная информация
Compound information	Информация о соединении
List of reference values	Список контрольных значений
Project name	Название проекта
Notes	Примечание
Select analyte	Выбор аналита
Filter criteria	Фильтр
Confirm	Подтвердить
Clear	Очистить
Compound name	Название соединения
Compound type	Тип соединения
Precursor ion	Ион-предшественник
Product ion	Дочерний ион

ДЛЯ РИСУНКА 14.8.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Select internal standard	Выбор внутреннего стандарта
Filter criteria	Фильтр
Confirm	Подтвердить
Clear	Очистить
Compound name	Название соединения
Compound type	Тип соединения
Precursor ion	Ион-предшественник
Product ion	Дочерний ион
Internal	Внутренний
Relative response calibration factor	Калибровочный относительный коэффициент отклика
Finished	Готово
Cancel	Отмена
Gly	Глицин
Val	Валин
Leu	Лейцин
Met	Метионин
Phe	Фенилаланин
AA	Аминокислота
Phe-d8	Внутренний стандарт фенилаланина

Введение названия элемента: чаще всего для обеспечения согласованности вводится наименование соединения. Рекомендуется нажать непосредственно на соответствующую строку соединения, тогда программа автоматически введет название соединения в поле названия элемента.

Примечание. Данный этап является необязательным.

Список соединений: будут отображены списки соединений и внутренних стандартов (внутренний стандарт и внешний стандарт в таблице), отображающие все соединения из базы данных. Щелкните, чтобы выбрать соответствующую строку соединения и строку внутреннего стандарта. Если в списке много соединений, можно применить фильтр по ключевому слову.

Введение концентрации внутреннего стандарта: в мкм.

Введение относительного коэффициента отклика (RRF) внутреннего стандарта: для компенсации отклонения результатов, вызванного работой прибора, предварительной обработкой или другими факторами. На рисунке 14.9 показано создание нового элемента анализа концентрации фенилаланина (Phe), при идентификации фенилаланина (Phe) и его внутреннего стандарта (Phe-d8) (концентрация внутреннего стандарта составляет 2,5 мкм, а RRF – 1).

Analysis item info [X]

Basic info **Compound Information** List of reference values

Project name

Notes

Select analyte

Filter criteria

	Compound name	Compound type	Precursor ion	Product ion
► 1	Phe	AA	222.2	120.2
2	Phe-d8	AA	230.2	128.2

Select internal standard

Filter criteria

	Compound name	Compound type	Precursor ion	Product ion
► 1	Phe-d8	AA	230.2	128.2

Internal μ M Relative response calibration factor

Рисунок 14.9. Интерфейс введения относительного коэффициента отклика (RRF) внутреннего стандарта для фенилаланина (Phe) и его внутреннего стандарта (Phe-d8).

ДЛЯ РИСУНКА 14.9.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analysis time info	Информация о времени анализа
Basic info	Основная информация
Compound information	Информация о соединении
List of reference values	Список контрольных значений
Project name	Название проекта
Notes	Примечание
Select analyte	Выбор аналита
Filter criteria	Фильтр
Confirm	Подтвердить
Clear	Очистить
Compound name	Название соединения
Compound type	Тип соединения
Precursor ion	Ион-предшественник
Product ion	Дочерний ион
Select internal standard	Выбор внутреннего стандарта
Filter criteria	Фильтр
Confirm	Подтвердить
Clear	Очистить
Compound name	Название соединения
Compound type	Тип соединения

ДЛЯ РИСУНКА 14.9.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Precursor ion	Ион-предшественник
Product ion	Дочерний ион
Internal	Внутренний
Relative response calibration factor	Калибровочный относительный коэффициент отклика
Finished	Готово
Cancel	Отмена

Затем введите контрольное значение дозирования соединения во вкладке List of reference values («Список контрольных значений») справа. Эти шаги аналогичны шагам, описанным в п.14.3 «Создание элемента анализа дозирования (внутренних стандартов)» (по умолчанию используется единица измерения микромоль (μM)). Наконец, ниже нажмите кнопку Finished («Готово»), чтобы завершить этот процесс, как показано на рисунке 14.10.

Analysis item info					
Basic info		Compound Information		List of reference values	
				Add	Delete
	Sample type	Reference lower limit	Reference upper limit	Reference unit	Notes
1	UnKnown	23	116	μM	

Рисунок 14.10. Интерфейс введения контрольного значения дозирования соединения.

ДЛЯ РИСУНКА 14.10.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analysis time info	Информация о времени анализа
Basic info	Основная информация
Compound information	Информация о соединении
List of reference values	Список контрольных значений
Add	Добавить
Delete	Удалить
Sample type	Тип образца
Reference lower limit	Нижний контрольный предел
Reference upper limit	Верхний контрольный предел
Reference unit	Контрольная единица измерения
Notes	Примечание
Unknown	Неизвестно
μM	микромоль

14.3.3. Элемент анализа уравнения

Уравнение чаще всего составляется путем выбора концентрации внешнего стандарта, и получаемые результаты считаются клинически значимыми. Рекомендуется создать элемент анализа концентрации перед созданием элемента анализа уравнения, чтобы его можно было выбрать непосредственно в списке.

Выберите в качестве элемента анализа Equation Analysis («Анализ уравнения») и введите название элемента и указанное соединение на вкладке Compound Information («Информация о соединении») выше, как показано на рисунке 14.11.

Analysis item info [X]

Basic info | Compound Information | List of reference values

Project name:

Notes:

Select analyte

Filter criteria: Confirm Clear

	Project name	Project type	Notes	Update time
► 1	Met	Concentration analysis		2023-11-09 08:25:09
2	Phe	Concentration analysis		2023-11-09 14:38:07
3	Tyr	Concentration analysis		2023-10-26 14:16:23
4	Leu	Concentration analysis		2023-10-13 15:25:49
5	Val	Concentration analysis		2023-11-03 15:55:15
6	Arg	Concentration analysis		2023-10-26 14:15:38
7	Cit	Concentration analysis		2023-10-27 15:14:05
8	Gly	Concentration analysis		2023-11-10 14:32:38
9	Orn	Concentration analysis		2023-11-09 14:34:00
10	Ala	Concentration analysis		2023-11-09 14:53:16
11	CO	Concentration analysis		2023-11-06 16:19:12
12	C2•	Concentration analysis		2023-11-09 14:42:56
13	C3	Concentration analysis		2023-10-20 15:02:33
14	C3DC	Concentration analysis		2023-11-06 16:20:07

+ - * / () ←

Finished Cancel

Рисунок 14.11. Интерфейс создания элемента анализа уравнения (общий вид).

ДЛЯ РИСУНКА 14.11.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analysis time info	Информация о времени анализа
Basic info	Основная информация
Compound information	Информация о соединении
Concentration analysis	Анализ концентрации
List of reference values	Список контрольных значений
Project name	Название проекта
Notes	Примечание
Select analyte	Выбор аналита
Filter criteria	Фильтр
Confirm	Подтвердить
Clear	Очистить
Project name	Название проекта
Project type	Тип проекта
Notes	Примечание
Update time	Время обновления
Finished	Готово
Cancel	Отмена
Met	Метионин
Phe	Фенилаланин
Tyr	Тирозин
Leu	Лейцин

ДЛЯ РИСУНКА 14.11.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Val	Валин
Arg	Аргинин
Cit	Цитруллин
Orn	Орнитин
Gly	Глицин
Ala	Аланин
C0	C0-карнитин
C2	C2-карнитин
C3	C3-карнитин
C3DC	C3DC-карнитин

Введение названия элемента: по умолчанию содержание, введенное в поле уравнения, имеет преимущественную силу.

Примечание. Этот этап является необязательным.

Список элементов анализа: отображаются все элементы анализа, относящиеся к категориям Strength analysis («Анализ дозирования (внутренних стандартов)») или Concentration analysis («Анализ концентрации»). Щелкните по строке элемента анализа, чтобы отобразить его в поле формулы уравнения. Если в списке представлено несколько элементов анализа, можно применить фильтр по ключевому слову.

Поле уравнения: выберите четыре символа для арифметических операций и скобки справа и нажмите, чтобы добавить операционных символы в это поле, чтобы создать уравнения,

например: Phe/Tyr, C0/(C16+C18), (C16+C18:1)/C2 и (C5DC+C6OH)/(C4DC+C5OH) и т.д.

На рисунке 14.12 приведен элемент анализа уравнение для Phe/Tyr, где Phe (фенилаланин) и Tyr (тирозин) выбирают в ходе скрининга, а в качестве разделителя используется символ «/».

Analysis item info X

Basic info **Compound Information** List of reference values

Project name

Notes

Select analyte

Filter criteria

	Project name	Project type	Notes	Update time
1	Met	Concentration analysis		2023-11-09 08:25:09
2	Phe	Concentration analysis		2023-11-09 14:38:07
▶ 3	Tyr	Concentration analysis		2023-10-26 14:16:23
4	Leu	Concentration analysis		2023-10-13 15:25:49
5	Val	Concentration analysis		2023-11-03 15:55:15
6	Arg	Concentration analysis		2023-10-26 14:15:38
7	Cit	Concentration analysis		2023-10-27 15:14:05
8	Gly	Concentration analysis		2023-11-10 14:32:38
9	Orn	Concentration analysis		2023-11-09 14:34:00
10	Ala	Concentration analysis		2023-11-09 14:53:16
11	C0	Concentration analysis		2023-11-06 16:19:12
12	C2	Concentration analysis		2023-11-09 14:42:56
13	C3	Concentration analysis		2023-10-20 15:02:33
14	C3DC	Concentration analysis		2023-11-06 16:20:07

Phe/Tyr

Рисунок 14.12. Интерфейс создания элемента анализа уравнения для Phe/Tyr (Phe – фенилаланин, Tyr – тирозин) (пример).

ДЛЯ РИСУНКА 14.12.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analysis time info	Информация о времени анализа
Basic info	Основная информация
Compound information	Информация о соединении
Concentration analysis	Анализ концентрации
List of reference values	Список контрольных значений
Project name	Название проекта
Notes	Примечание
Select analyte	Выбор аналита
Filter criteria	Фильтр
Confirm	Подтвердить
Clear	Очистить
Project name	Название проекта
Project type	Тип проекта
Notes	Примечание
Update time	Время обновления
Finished	Готово
Cancel	Отмена
Met	Метионин
Phe	Фенилаланин
Tyr	Тирозин

ДЛЯ РИСУНКА 14.12.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Leu	Лейцин
Val	Валин
Arg	Аргинин
Cit	Цитруллин
Orn	Орнитин
Gly	Глицин
Ala	Аланин
C0	C0-карнитин
C2	C2-карнитин
C3	C3-карнитин
C3DC	C3DC-карнитин
Phe/Tyr	Уравнение Фенилаланин/Тирозин

Затем введите контрольное значение дозирования соединения во вкладке List of reference values («Список контрольных значений») справа, как показано на рисунке 14.13. Эти шаги аналогичны шагам, описанным в п.«Анализ дозирования (внутренних стандартов)».

Примечание. Здесь вычисляется только числовое значение, и преобразование единиц измерения не осуществляется. Значение по умолчанию – «/».

Наконец, нажмите кнопку Finished («Готово») ниже, чтобы завершить этот процесс.

Analysis item info						
Basic info Compound Information List of reference values						
					Add	Delete
	Sample type	Reference lower limit	Reference upper limit	Reference unit	Notes	
1	UnKnown	0.1	1.5	/		

Рисунок 14.13. Интерфейс введения контрольных значений дозирования соединения во вкладке List of reference values («Список контрольных значений»).

ДЛЯ РИСУНКА 14.13.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analysis time info	Информация о времени анализа
Basic info	Основная информация
Compound information	Информация о соединении
List of reference values	Список контрольных значений
Add	Добавить
Delete	Удалить
Sample type	Тип образца
Reference lower limit	Нижний контрольный предел
Reference upper limit	Верхний контрольный предел
Reference unit	Контрольная единица измерения
Notes	Примечание
Unknown	Неизвестно

14.4. Создание количественного метода

14.4.1. Настройка параметров метода

- 1) Нажмите на вкладку Quantitative Method («Количественный метод») в строке меню в верхней части главного интерфейса модуля, чтобы перейти к интерфейсу редактирования количественного метода, как показано на рисунке 14.14.

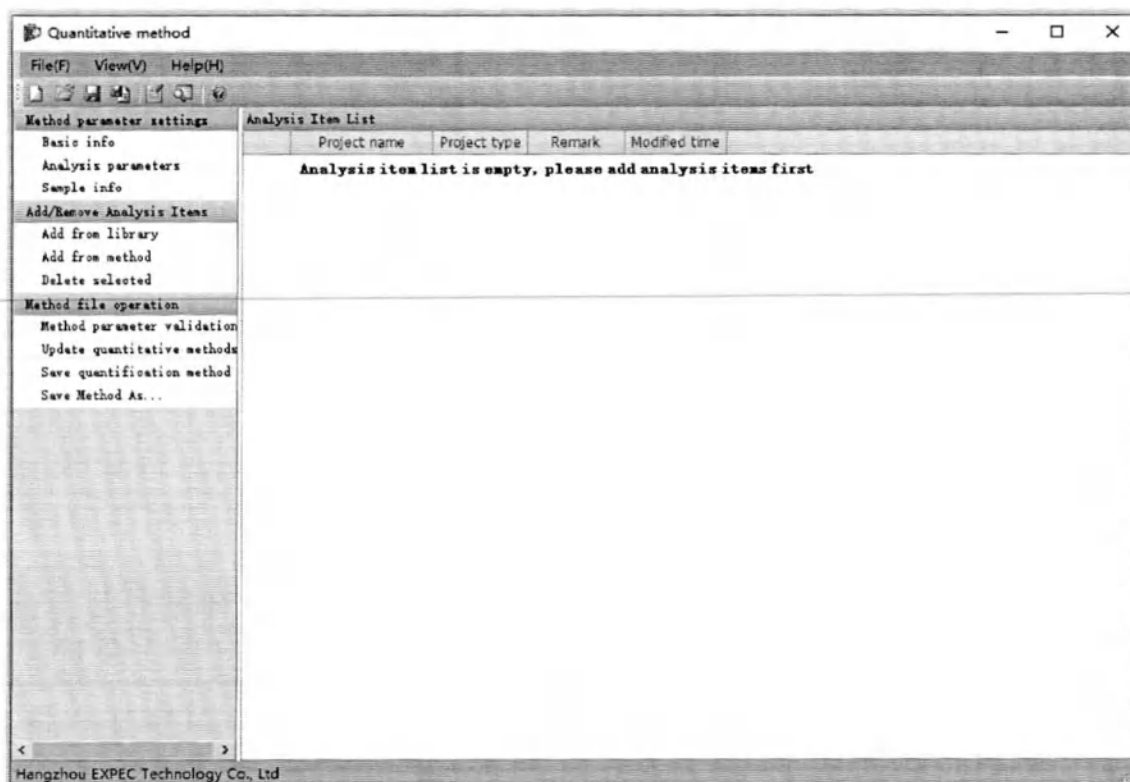


Рисунок 14.14. Интерфейс создания количественного метода в специальном модуле «NBS Analyst» (общий вид).

ДЛЯ РИСУНКА 14.14.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Quantitative method	Количественный метод
File (F)	Файл (F)
View (V)	Вид (V)
Help (H)	Справка (H)
Method parameter settings	Настройка параметров метода
Analysis parameters	Параметры анализа
Sample info	Информация об образце
Add/remove analysis items	Добавить/удалить элемент анализа
Add from library	Добавить из библиотеки
Add from method	Добавить из метода
Delete selected	Удалить выбранное
Method file operation	Операции с файлом по методу
Method parameter validation	Валидация параметров метода
Update quantitative methods	Обновить количественные методы
Save quantification method	Сохранить количественный метод
Save method as	Сохранить метод как...
Analysis item list	Список элементов анализа
Project name	Название проекта
Project type	Тип проекта
Remark	Примечание
Modified time	Время изменения
Analysis item list is empty, please add analysis items first.	Список элементов анализа пуст. Для начала добавьте элементы анализа.

- 2) Нажмите на вкладку Method parameter Setting («Настройка параметров метода»), выберите вкладку Basic info («Основная информация») на левой панели навигации и введите название количественного метода, например «NBS-FPI», как показано на рисунке 14.15.

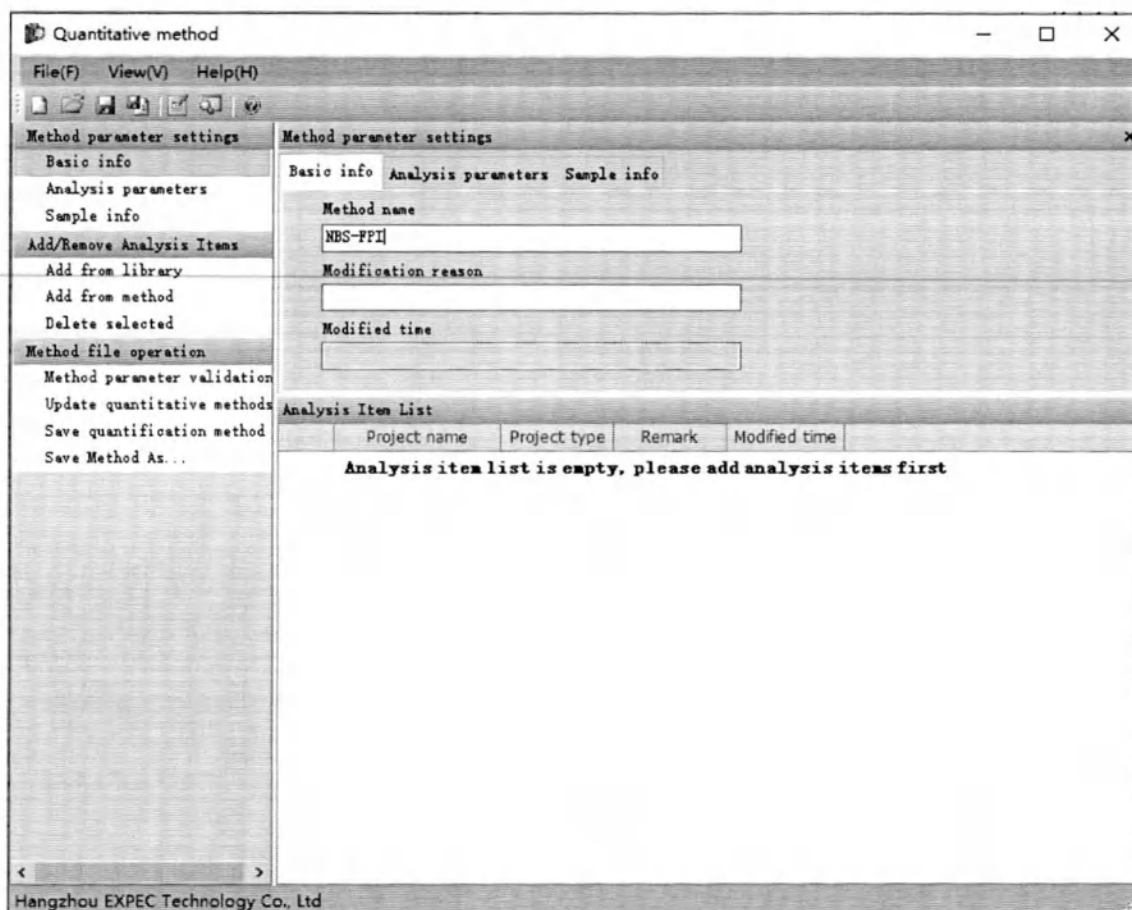


Рисунок 14.15. Интерфейс создания количественного метода в специальном модуле «NBS Analyst» (пример).

ДЛЯ РИСУНКА 14.15.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Quantitative method	Количественный метод
File (F)	Файл (F)
View (V)	Вид (V)
Help (H)	Справка (H)
Method parameter settings	Настройка параметров метода
Basic info	Основная информация
Analysis parameters	Параметры анализа
Sample info	Информация об образце
Add/remove analysis items	Добавить/удалить элемент анализа
Add from library	Добавить из библиотеки
Add from method	Добавить из метода
Delete selected	Удалить выбранное
Method file operation	Операции с файлом по методу
Method parameter validation	Валидация параметров метода
Update quantitative methods	Обновить количественные методы
Save quantification method	Сохранить количественный метод
Save method as	Сохранить метод как...
Project info	Информация о проекте
Analysis parameters	Параметры анализа
Sample info	Информация об образце
Method name	Название метода
Modification reason	Причина изменения
Modification time	Время изменения
Analysis item list	Список элементов анализа
Project name	Название проекта

ДЛЯ РИСУНКА 14.15.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Project type	Тип проекта
Remark	Примечание
Modified time	Время изменения
Analysis item list is empty, please add analysis itens first.	Список элементов анализа пуст. Для начала добавьте элементы анализа.

- 3) Нажмите на вкладку Analysis parameters («Параметры анализа») справа, чтобы задать параметры анализа данных, как показано на рисунке 14.16.

Method parameter settings

Basic info Analysis parameters Sample info

Quantitative range threshold: 50 % TIC

Minimum number of points in the quantitative range: 10 count

Full scan quality error: 0.5 amu

MRM quality error: 0.3 amu

☐ Using point interval quantification

☒ Automatic smoothing

Рисунок 14.16. Интерфейс задания параметров в количественном методе специального модуля «NBS Analyst».

ДЛЯ РИСУНКА 14.16.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Method parameter settings	Настройка параметров метода
Basic info	Основная информация
Analysis parameters	Параметры анализа
Sample info	Информация об образце
Quantitative range threshold	Граница количественного диапазона
Full scan quality error	Количественная ошибка полного сканирования
MRM quality error	Количественная ошибка MRM
Minimum number of points in the quantitative range	Минимальное число точек в количественном диапазоне
Using point interval quantification	Использовать подсчет точек в интервале
% TIC	% кривой времени интенсивности
Count	шт.
amu	а.е.м.
Automatic smoothing	Автоматическое сглаживание

Граница количественного диапазона: 50%TIC означает, что программное обеспечение усредняет все точки сканирования за период времени, в которых интенсивность спектра TIC превышает 50% пиков. При слишком высоком значении, например, 80%, во временном диапазоне, удовлетворяющем требованиям, наблюдается слишком мало точек сканирования, что повлияет на стабильность данных; так же, при слишком низком значении, например, 20%, интенсивность ионов на среднем масс-спектре будет слишком высокой, что также может привести к неточным результатам для некоторых аналитов.

Погрешность по массе при полном сканировании: 0,5 а.е.м. означает, что для соединений, в отношении которых проводится сканирование потери нейтральных частиц или сканирование иона-предшественника, при обнаружении указанных ионов-предшественников в масс-спектре допускается погрешность по массе $\pm 0,5$ а.е.м., поскольку при полном сканировании колебания массы огромны. Например, в количественном методе ион-предшественник указанного соединения Phe имеет массу 166,2, в то время как при обнаружении ионы в диапазоне масс-спектра 165,7–166,7 считаются ионами-предшественниками Phe.

Погрешность по массе при анализе MRM: 0,3 а.е.м. означает, что для соединений, подвергаемых анализу методом MRM, при обнаружении указанных дочерних ионов на масс-спектре, допускается

погрешность по массе $\pm 0,3$ а.е.м. Например, в количественном методе ион-предшественник указанного соединения Phe имеет массу 120,1, в то время как при обнаружении ионы в диапазоне масс-спектра 119,8–120,4 считаются ионами-предшественниками Phe.

Приведенные выше параметры являются значениями по умолчанию, и изменять их не рекомендуется.

Перейдите во вкладку Sample Info («Информация об образце») справа и введите объем образца и внутреннего стандарта, как показано на рисунке 14.17. Следующие значения являются значениями по умолчанию.

Объем образца – объем цельной крови, обычно это образец для метода сухой капли крови 3 мм, эквивалентный 3,2 мкл цельной крови.

Объем внутреннего стандарта – объем добавляемого экстракционного раствора, который следует изменять в зависимости от метода предварительной обработки и используемого набора.

The screenshot shows a window titled 'Method parameter settings' with a close button (X) in the top right corner. There are three tabs: 'Basic info', 'Analysis parameters', and 'Sample info'. The 'Sample info' tab is selected. Inside the tab, there are two input fields. The first is labeled 'Sample volume' and contains the value '3.2' followed by 'uL'. The second is labeled 'Internal standard volume' and contains the value '100' followed by 'uL'.

Рисунок 14.17. Интерфейс введения объема образца и внутреннего стандарта в количественном методе специального модуля «NBS Analyst».

ДЛЯ РИСУНКА 14.17.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Method parameter settings	Настройка параметров метода
Basic info	Основная информация
Analysis parameters	Параметры анализа
Sample info	Информация об образце
Sample volume	Объем образца
uL	мкл
Internal standard volume	Объем внутреннего стандарта

14.4.2. Добавление элементов анализа

- 1) Нажмите на вкладку Add/Remove Analysis Items («Добавить/удалить элемент анализа»), выберите вкладку Add from Library («Добавить из библиотеки») на левой панели навигации, и во всплывающем окне отобразятся все созданные элементы анализа, присутствующие в базе данных, как показано на рисунке 14.18. Поставьте галочкой нужные элементы анализа, при необходимости введите ключевое

слово в поле поиска, а затем щелкните по иконке , чтобы экспортировать выбранные элементы анализа в количественный метод.

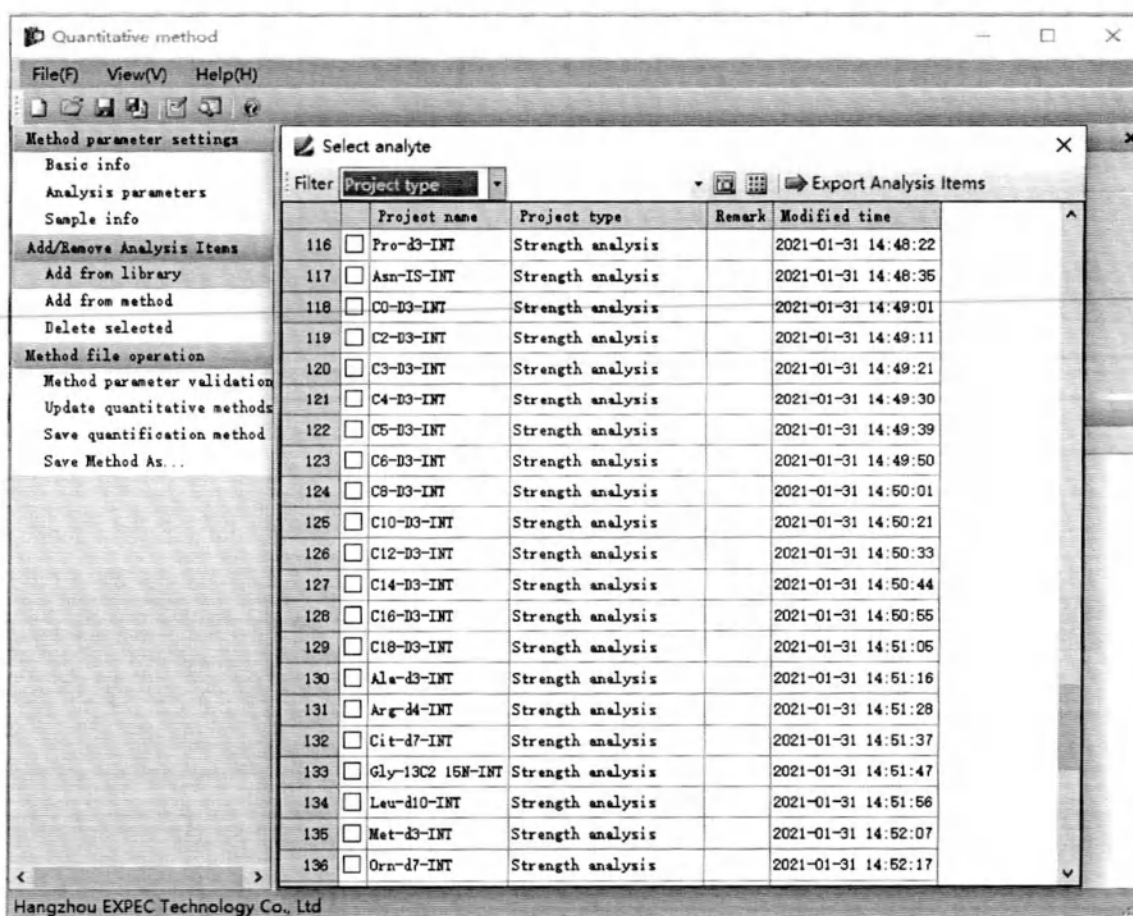


Рисунок 14.18. Интерфейс добавления элементов анализа в количественном методе специального модуля «NBS Analyst».

ДЛЯ РИСУНКА 14.18.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Quantitative method	Количественный метод
File (F)	Файл (F)
View (V)	Вид (V)
Help (H)	Справка (H)
Method parameter settings	Настройка параметров метода
Analysis parameters	Параметры анализа
Sample info	Информация об образце
Add/Remove Analysis Items	Добавить/удалить элемент анализа
Add from library	Добавить из библиотеки
Add from method	Добавить из метода
Delete selected	Удалить выбранное
Method file operation	Операции с файлом по методу
Method parameter validation	Валидация параметров метода
Update quantitative methods	Обновить количественные методы
Save quantification method	Сохранить количественный метод
Select analyte	Выбор аналита
Filer	Фильтр
Project type	Тип проекта
Export analysis items	Экспорт элементов анализа
Project name	Название проекта
Project type	Тип проекта
Strength analysis	Анализ дозирования (внутренних стандартов)
Remark	Примечание
Modified time	Время изменения
Pro-d3-INT	Внутренний стандарт пролина

ДЛЯ РИСУНКА 14.18.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Asn-IS-INT	Внутренний стандарт аспарагина
C0-D3-INT	Внутренний стандарт C0-карнитина
C2-D3-INT	Внутренний стандарт C2-карнитина
C3-D3-INT	Внутренний стандарт C3-карнитина
C4-D3-INT	Внутренний стандарт C4-карнитина
C5-D3-INT	Внутренний стандарт C5-карнитина
C6-D3-INT	Внутренний стандарт C6-карнитина
C8-D3-INT	Внутренний стандарт C8-карнитина
C10-D3-INT	Внутренний стандарт C10-карнитина
C12-D3-INT	Внутренний стандарт C12-карнитина
C14-D3-INT	Внутренний стандарт C14-карнитина
C16-D3-INT	Внутренний стандарт C16-карнитина
C18-D3-INT	Внутренний стандарт C18-карнитина
Ala-d3-INT	Внутренний стандарт аланина
Arg-d4-INT	Внутренний стандарт аргинина
Cit-d7-INT	Внутренний стандарт цитрулина
Gly-13C215N-INT	Внутренний стандарт глутамина
Leu-d10-INT	Внутренний стандарт лейцина
Met-d3-INT	Внутренний стандарт метионина
Orn-d7-INT	Внутренний стандарт орнитина

Выполните поиск по элементам анализа с ключевым словом «Концентрация», и все они отметятся галочкой, как показано на рисунке 14.19.

Select analyte					×
Filter	Project type	Concentration	Export Analysis Items		
	Project name	Project type	Remark	Modified time	
1	☒ Met	Concentration analysis		2023-11-09 08:25:09	
2	☒ Phe	Concentration analysis		2023-11-09 14:38:07	
3	☒ Tyr	Concentration analysis		2023-10-26 14:16:23	
4	☒ Leu	Concentration analysis		2023-10-13 15:25:49	
5	☒ Val	Concentration analysis		2023-11-03 15:55:15	
6	☒ Arg	Concentration analysis		2023-10-26 14:15:38	
7	☒ Cit	Concentration analysis		2023-10-27 15:14:05	
8	☒ Gly	Concentration analysis		2023-11-10 14:32:38	
9	☒ Orn	Concentration analysis		2023-11-09 14:34:00	
10	☒ Ala	Concentration analysis		2023-11-09 14:53:16	
11	☒ C0	Concentration analysis		2023-11-06 16:19:12	
12	☒ C2	Concentration analysis		2023-11-09 14:42:56	
13	☒ C3	Concentration analysis		2023-10-20 15:02:33	
14	☒ C3DC	Concentration analysis		2023-11-06 16:20:07	
15	☒ C4	Concentration analysis		2023-09-06 16:34:51	
16	☒ C40H	Concentration analysis		2023-10-26 14:15:59	
17	☒ C4DC	Concentration analysis		2021-03-03 11:31:57	
18	☒ C5	Concentration analysis		2023-10-26 14:18:25	
19	☒ C5:1	Concentration analysis		2023-09-25 16:15:06	
20	☒ C50H	Concentration analysis		2023-11-08 15:09:16	
21	☒ C5DC	Concentration analysis		2023-11-10 14:32:08	

Рисунок 14.19. Интерфейс поиск по элементам анализа с ключевым словом «Концентрация» в количественном методе специального модуля «NBS Analyst» (пример).

ДЛЯ РИСУНКА 14.19.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Select analyte	Выбор аналита
Filter	Фильтр
Project type	Тип проекта
Concentration	Концентрация
Export analysis items	Экспорт элементов анализа
Select analyte	Выбор аналита
Export analysis item	Экспорт элемента анализа
Project name	Название проекта
Project type	Тип проекта
Concentration analysis	Анализ концентрации
Remark	Примечание
Modified time	Время изменения
Met	Метионин
Phe	Фенилаланин
Tyr	Тирозин
Leu	Лейцин
Val	Валин
Arg	Аргинин
Cit	Цитруллин
Gly	Глицин
Orn	Орнитин
Ala	Аланин
C0	C0-карнитин
C2	C2-карнитин
C3	C3-карнитин
C3DC	C3DC-карнитин
C4	C4-карнитин
C4OH	C4OH-карнитин
C4DC	C4DC-карнитин
C5	C5-карнитин
C5:1	C5:1-карнитин
C5OH	C5OH-карнитин
C5DC	C5DC-карнитин

Интерфейс экспорта выбранных элементов анализа в количественном методе модуля выглядит, как показано на рисунке 14.20.

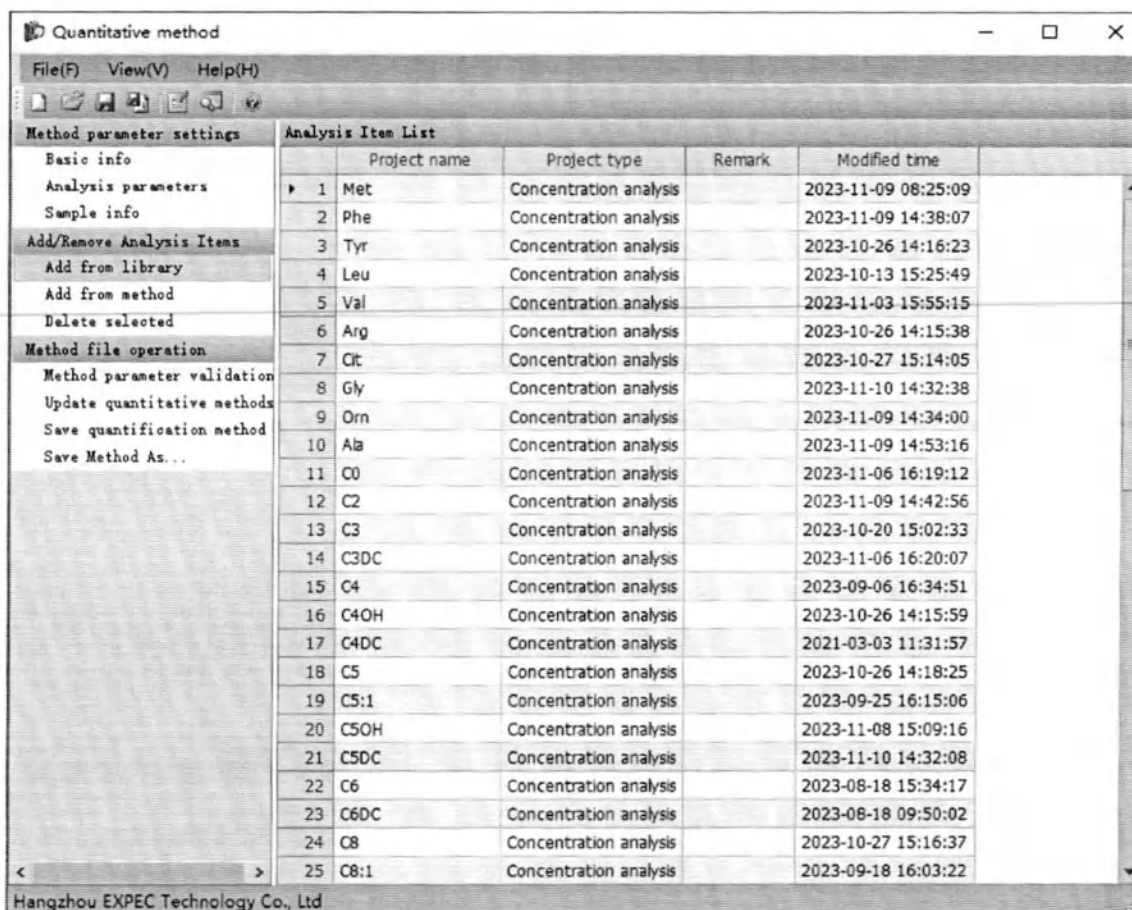


Рисунок 14.20. Интерфейс экспорта выбранных элементов анализа в количественном методе специального модуля «NBS Analyst» (пример).

ДЛЯ РИСУНКА 14.20.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Quantitative method	Количественный метод
File (F)	Файл (F)
View (V)	Вид (V)
Help (H)	Справка (H)
Method parameter settings	Настройка параметров метода
Analysis parameters	Параметры анализа
Sample info	Информация об образце
Add/remove analysis items	Добавить/удалить элемент анализа
Add from library	Добавить из библиотеки
Add from method	Добавить из метода
Delete selected	Удалить выбранное
Method file operation	Операции с файлом по методу
Method parameter validation	Валидация параметров метода
Update quantitative methods	Обновить количественные методы
Save quantification method	Сохранить количественный метод
Save method as	Сохранить метод как...
Analysis item list	Список элементов анализа
Project name	Название проекта
Project type	Тип проекта
Remark	Примечание
Modified time	Время изменения
Met	Метионин
Phe	Фенилаланин
Tyr	Тирозин
Leu	Лейцин

ДЛЯ РИСУНКА 14.20.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Val	Валин
Arg	Аргинин
Cit	Цитруллин
Gly	Глицин
Orn	Орнитин
Ala	Аланин
C0	C0-карнитин (свободный карнитин)
C2	C2-карнитин
C3	C3-карнитин
C3DC	C3DC-карнитин
C4	C4-карнитин
C4OH	C4OH-карнитин
C4DC	C4DC-карнитин
C5	C5-карнитин
C5:1	C5:1-карнитин
C5OH	C5OH-карнитин
C5DC	C5DC-карнитин
C6	C6-карнитин
C6DC	C6DC
C8	C8
C8:1	C8:1

- 2) Для создания полного количественного метода выберите вкладку Method File Operation («Работа с файлом метода»), далее – Method Parameter settings («Настройка параметров метода») на левой панели навигации, и затем, когда появится сообщение Parameters verified, no errors found («Проверка параметров не выявила ошибку»), нажмите Save Quantitative Method («Сохранить количественный метод»), как показано на рисунке 14.21.

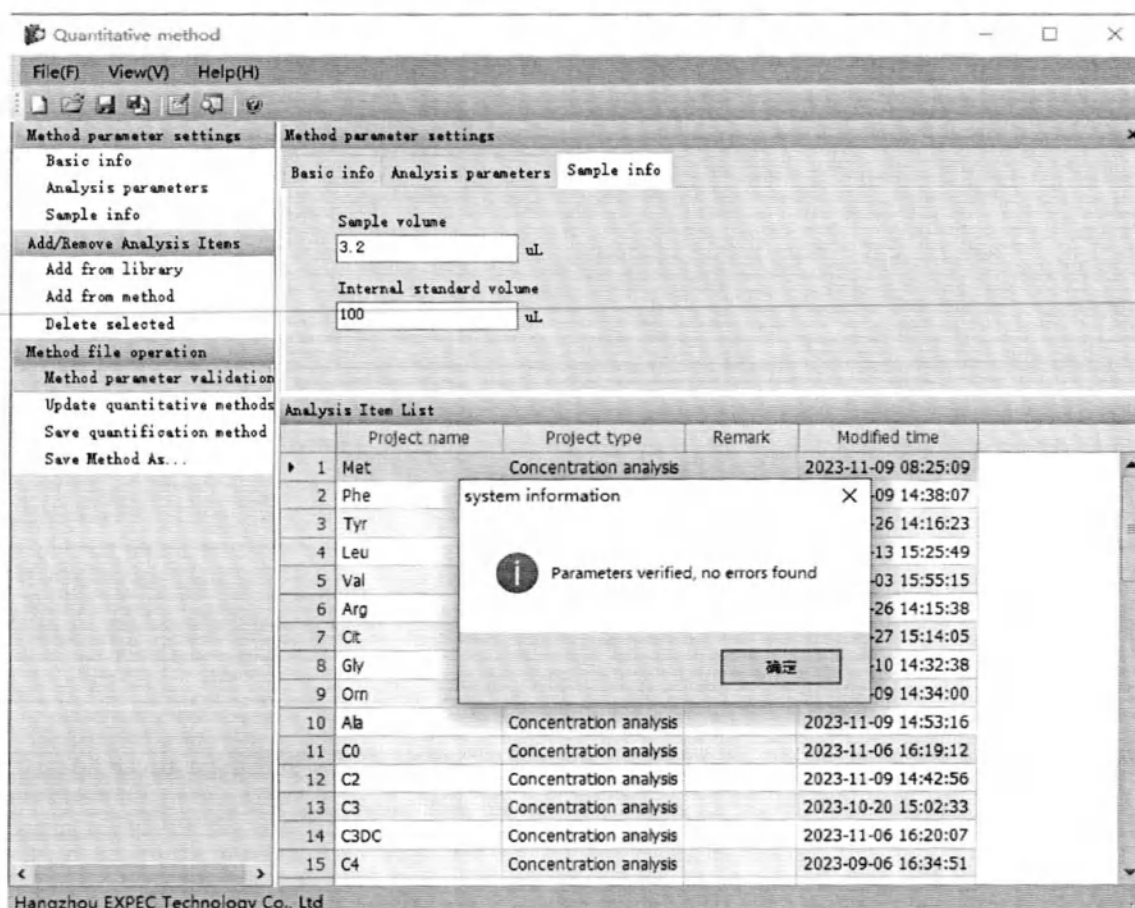


Рисунок 14.21. Интерфейс создания полного количественного метода в специальном модуле «NBS Analyst» (пример).

ДЛЯ РИСУНКА 14.21.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Quantitative method	Количественный метод
File (F)	Файл (F)
View (V)	Вид (V)
Help (H)	Справка (H)
Method parameter settings	Настройка параметров метода
Analysis parameters	Параметры анализа
Sample info	Информация об образце
Add/remove analysis items	Добавить/удалить элемент анализа
Add from library	Добавить из библиотеки
Add from method	Добавить из метода
Delete selected	Удалить выбранное
Method file operation	Операции с файлом по методу
Method parameter validation	Валидация параметров метода
Update quantitative methods	Обновить количественные методы
Save quantification method	Сохранить количественный метод
Save method as	Сохранить метод как...
Method parameter settings	Настройки параметров метода
Basic info	Основная информация
Analysis parameters	Параметры анализа
Sample info	Информация об образце
Sample volume	Объем образца
uL	мкл
Internal standard volume	Объем внутреннего стандарта
Modified time	Время изменения
Analysis item list	Список элементов анализа

ДЛЯ РИСУНКА 14.21.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Project name	Название проекта
Project type	Тип проекта
Remark	Примечание
Modified time	Время изменения
System information	Системное уведомление
Parameters verified, no errors found	Проверка параметров не выявила ошибок
Met	Метионин
Phe	Фенилаланин
Tyr	Тирозин
Leu	Лейцин
Val	Валин
Arg	Аргинин
Cit	Цитруллин
Gly	Глицин
Orn	Орнитин
Ala	Аланин
C0	C0-карнитин (свободный карнитин)
C2	C2-карнитин
C3	C3-карнитин
C3DC	Малонилкарнитин
C4	C4-карнитин

14.5. Пакетная обработка результатов анализа

- Щелкните по иконке  в интерфейсе пакетной обработки, чтобы импортировать данные для анализа, как показано на рисунке 14.22.

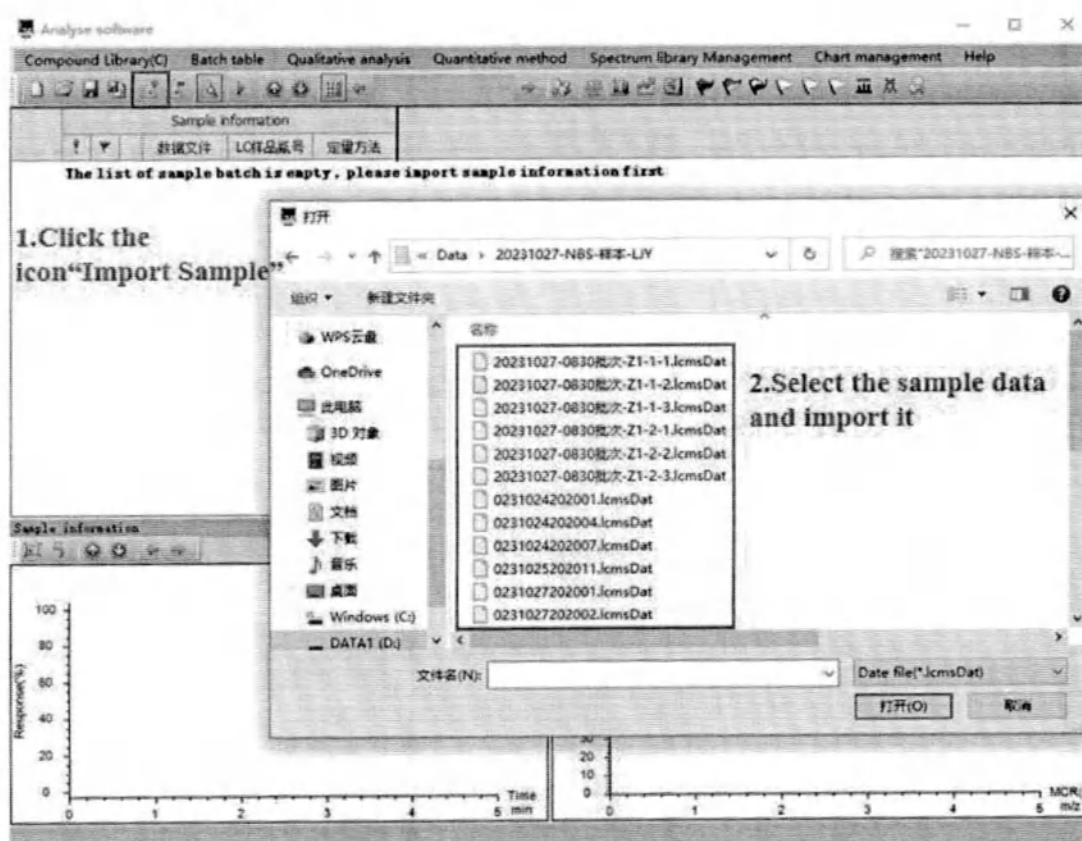


Рисунок 14.22. Интерфейс пакетной обработки в специальном модуле «NBS Analyst» (пример).

ДЛЯ РИСУНКА 14.22.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analyse software	Аналитическая программа
Compound Library (C)	Библиотека соединений (C)
Batch table	Таблица серий
Qualitative analysis	Количественный анализ
Qualitative method	Количественный метод
Spectrum Library Management	Управление библиотекой спектров
Chart Management	Управление графиками
Help	Справка
Sample Information	Информация об образце
Response (%)	Отклик (%)
Time, min	Время, мин
MCR (a), m/z	Многомерное разрешение кривой (a), масса/заряд
1. Click the icon «Import Sample»	1. Щелкните по иконке «Импорт образца»
2. Select the Sample data and import it	2. Выберите файл образца и импортируйте его

- 2) Выберите образцы и загрузите только что созданный количественный метод NBS-FPI.dlmth через контекстное меню, вызываемое нажатием правой кнопки мыши, как показано на рисунке 14.23.

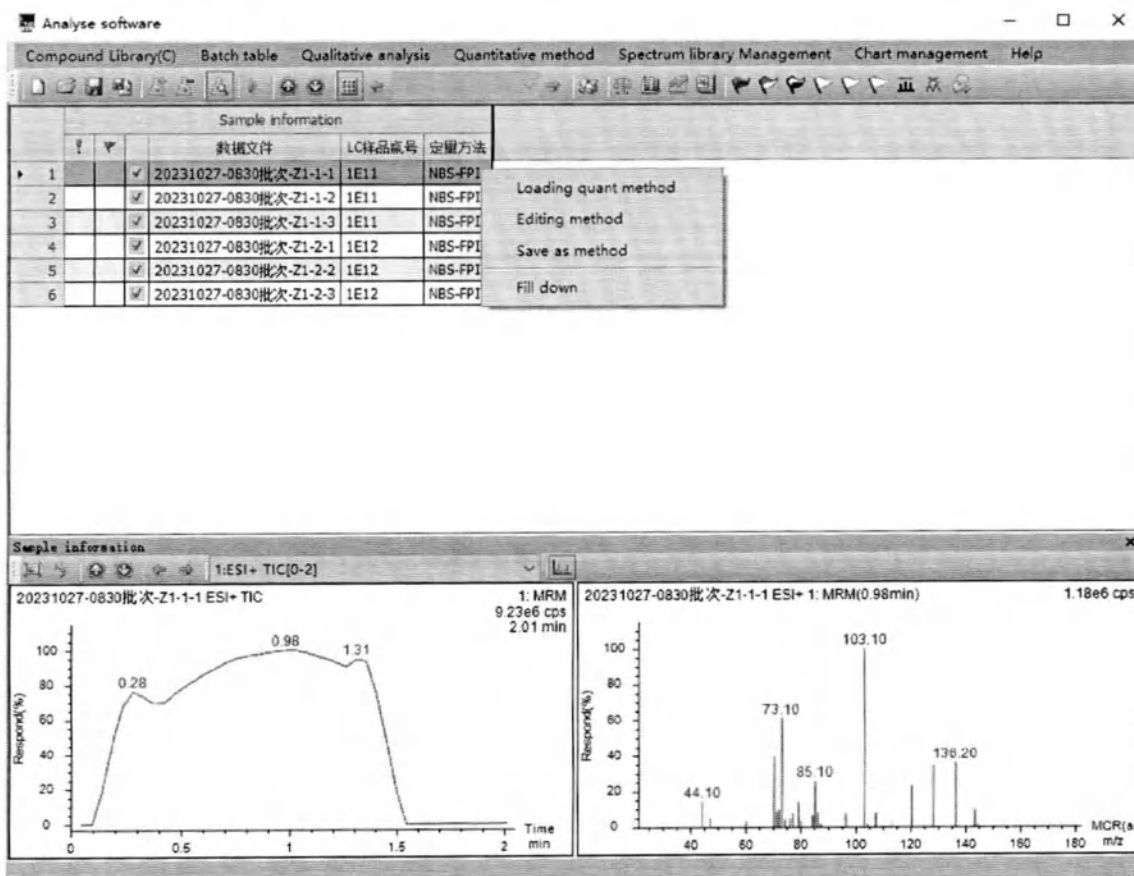


Рисунок 14.23. Интерфейс загрузки количественного метода NBS-FPI.dlmth через контекстное меню в специальном модуле «NBS Analyst» (пример).

ДЛЯ РИСУНКА 14.23.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analyse software	Аналитическая программа
Compound Library (C)	Библиотека соединений (C)
Batch table	Таблица серий
Qualitative analysis	Количественный анализ
Qualitative method	Количественный метод

ДЛЯ РИСУНКА 14.23.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Spectrum Library Management	Управление библиотекой спектров
Chart Management	Управление графиками
Help	Справка
Sample Information	Информация об образце
Loading quant method	Загрузить количественный метод
Editing method	Редактировать метод
Save as method	Сохранить метод как
Fill down	Заполнить
Sample Information	Информация об образце
Response (%)	Отклик (%)
Time, min	Время, мин
MCR (a), m/z	Многомерное разрешение кривой (a), масса/заряд

- 3) Щелкните по иконке , во всплывающем окне выберите форму отчета, чтобы осуществить ее импорт. Предусмотрено две формы по умолчанию, выбираемые в соответствии с необходимостью, как показано на рисунке 14.24.

Примечание. Не меняйте название формы отчета, в противном случае печать не будет выполнена.

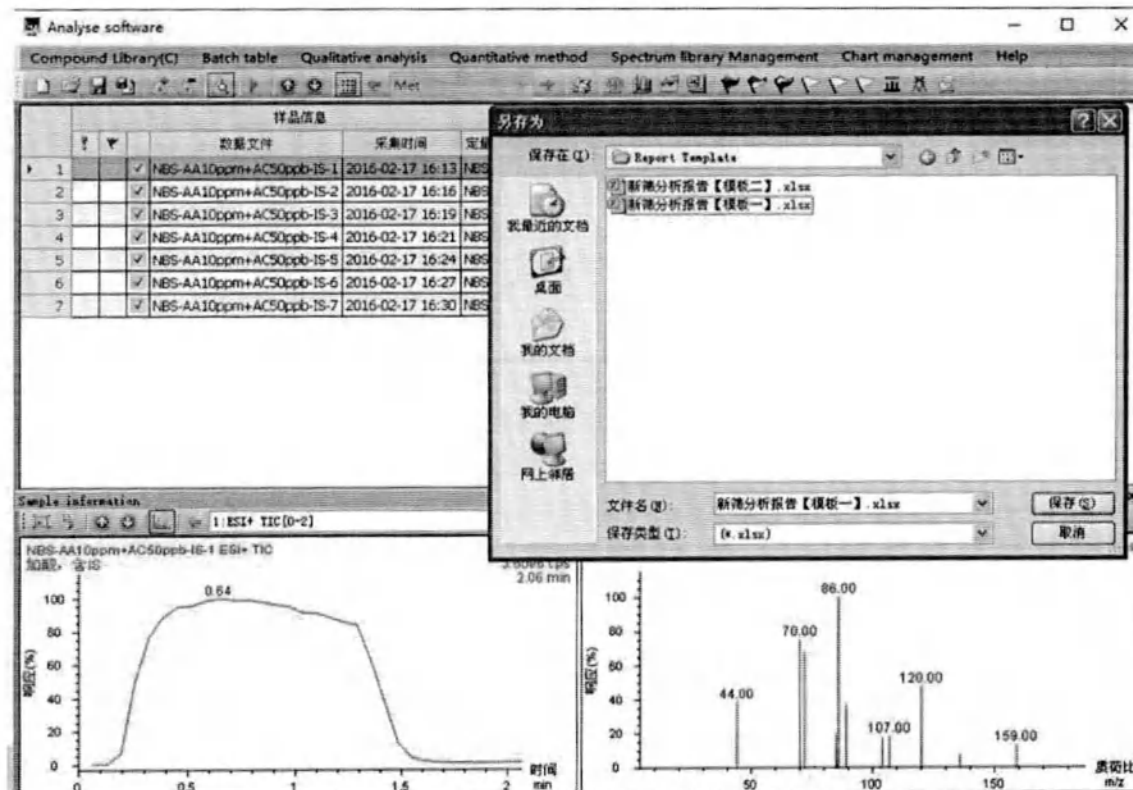


Рисунок 14.24. Интерфейс выбора формы отчета в количественном методе специального модуля «NBS Analyst» (пример).

ДЛЯ РИСУНКА 14.24.

Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analyse software	Аналитическая программа
Compound Library (C)	Библиотека соединений (C)
Batch table	Таблица серий
Qualitative analysis	Количественный анализ
Qualitative method	Количественный метод
Spectrum Library Management	Управление библиотекой спектров
Chart Management	Управление графиками

ДЛЯ РИСУНКА 14.24.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Help	Справка
Sample Information	Информация об образце

- 4) Выберите анализируемый образец. По умолчанию галочкой помечены изначально загруженные данные об образце. Не помеченные данные в пакетный анализ не включаются.

Щелкните по иконке  Analysis & Batch Processing («Анализ и пакетная обработка»), и программа запустит пакетную обработку образцов. Результаты обработки образцов автоматически отобразятся в таблице пакетной обработки, и в соответствующей папке с данными будут сгенерированы отчеты по отдельным образцам в формате таблицы Excel.

Хроматограмму и масс-спектр образца можно просмотреть в окне Sample Information («Информация об образце») внизу, а информацию о структуре образца – в окне держателя с образцами справа, как показано на рисунке 14.25.

Если результаты по элементам анализа выходят за пределы контрольного диапазона, для простоты обнаружения образец помечается цветом. Зеленый цвет означает, что результаты расчета всех элементов анализа образца в позиции B1 держателя с образцами 1 – в пределах заданного контрольного диапазона.

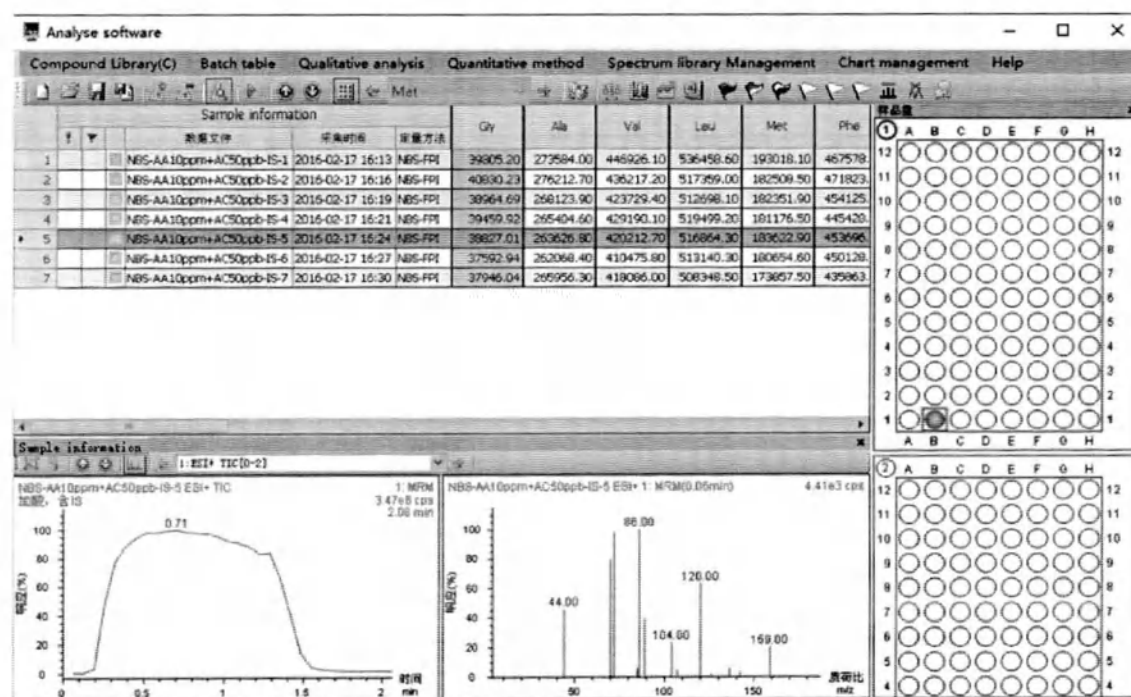


Рисунок 14.25. Интерфейс результатов пакетной обработки в специальном модуле «NBS Analyst» (пример).

ДЛЯ РИСУНКА 14.25.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analyse software	Аналитическая программа
Compound Library (C)	Библиотека соединений (C)
Batch table	Таблица серий
Qualitative analysis	Количественный анализ
Qualitative method	Количественный метод
Spectrum Library Management	Управление библиотекой спектров
Chart Management	Управление графиками
Help	Справка
Sample Information	Информация об образце

- 5) В соответствующей папке с данными автоматически создается файл распечатанного индивидуального отчета, как показано на рисунке 14.26.

名称	大小	类型	修改日期
NBS-AA10ppm+AC50ppb-1.lcmsDat	623 KB	LCMSDAT 文件	2016-2-17 15:44
NBS-AA10ppm+AC50ppb-2.lcmsDat	623 KB	LCMSDAT 文件	2016-2-17 16:00
NBS-AA10ppm+AC50ppb-3.lcmsDat	623 KB	LCMSDAT 文件	2016-2-17 15:57
NBS-AA10ppm+AC50ppb-4.lcmsDat	623 KB	LCMSDAT 文件	2016-2-17 16:03
NBS-AA10ppm+AC50ppb-5.lcmsDat	623 KB	LCMSDAT 文件	2016-2-17 16:06
NBS-AA10ppm+AC50ppb-6.lcmsDat	623 KB	LCMSDAT 文件	2016-2-17 16:09
NBS-AA10ppm+AC50ppb-7.lcmsDat	623 KB	LCMSDAT 文件	2016-2-17 16:12
NBS-AA10ppm+AC50ppb-IS-1.lcmsDat	623 KB	LCMSDAT 文件	2016-2-17 16:16
NBS-AA10ppm+AC50ppb-IS-2.lcmsDat	623 KB	LCMSDAT 文件	2016-2-17 16:19
NBS-AA10ppm+AC50ppb-IS-3.lcmsDat	623 KB	LCMSDAT 文件	2016-2-17 16:21
NBS-AA10ppm+AC50ppb-IS-4.lcmsDat	623 KB	LCMSDAT 文件	2016-2-17 16:24
NBS-AA10ppm+AC50ppb-IS-5.lcmsDat	623 KB	LCMSDAT 文件	2016-2-17 16:27
NBS-AA10ppm+AC50ppb-IS-6.lcmsDat	623 KB	LCMSDAT 文件	2016-2-17 16:30
NBS-AA10ppm+AC50ppb-IS-7.lcmsDat	623 KB	LCMSDAT 文件	2016-2-17 16:33
NBS-AA10ppm+AC50ppb-IS-1.xlsx	46 KB	Microsoft Excel...	2016-2-29 10:59
NBS-AA10ppm+AC50ppb-IS-2.xlsx	46 KB	Microsoft Excel...	2016-2-29 10:59
NBS-AA10ppm+AC50ppb-IS-3.xlsx	46 KB	Microsoft Excel...	2016-2-29 10:59
NBS-AA10ppm+AC50ppb-IS-4.xlsx	46 KB	Microsoft Excel...	2016-2-29 10:59
NBS-AA10ppm+AC50ppb-IS-5.xlsx	46 KB	Microsoft Excel...	2016-2-29 10:59
NBS-AA10ppm+AC50ppb-IS-6.xlsx	46 KB	Microsoft Excel...	2016-2-29 10:59
NBS-AA10ppm+AC50ppb-IS-7.xlsx	46 KB	Microsoft Excel...	2016-2-29 10:59

Рисунок 14.26. Файл распечатанного индивидуального отчета после пакетной обработки в специальном модуле «NBS Analyst» (пример).

6) Щелкните по иконке , чтобы составить сводный отчет по образцу, как показано на рисунке 14.27.

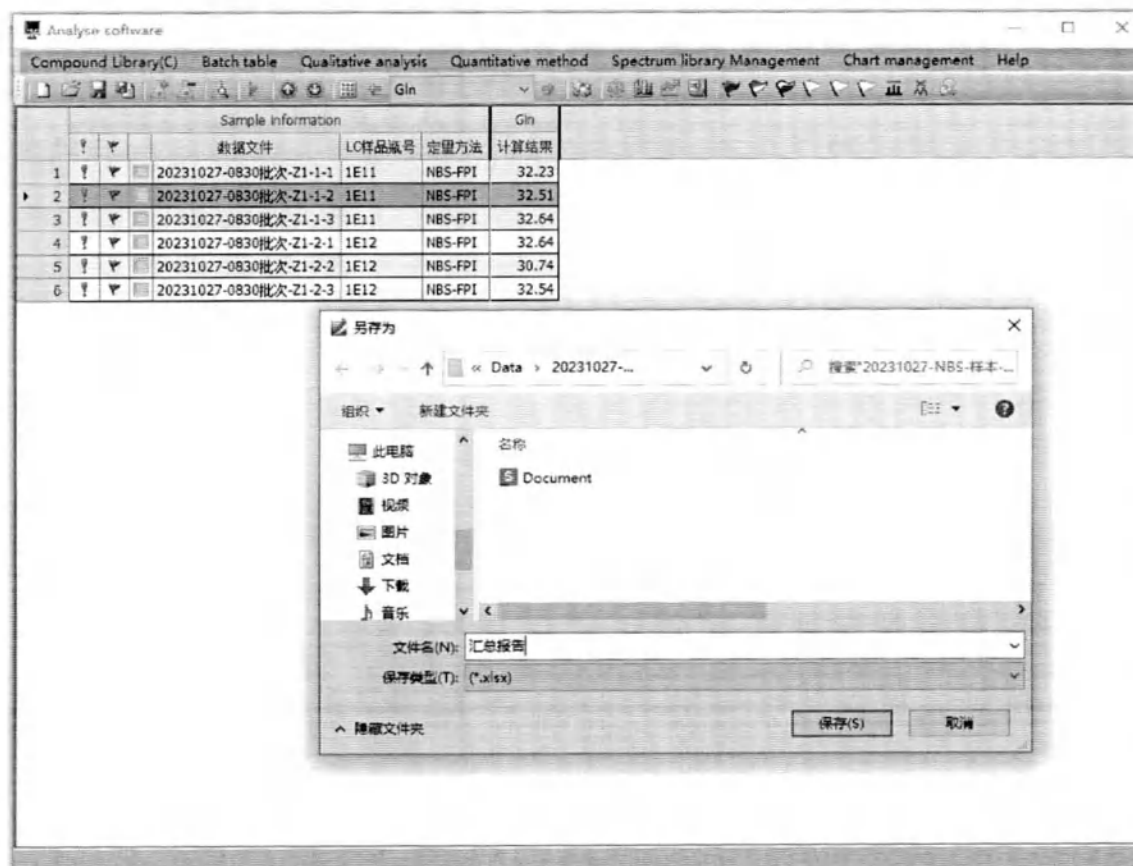


Рисунок 14.27. Интерфейс составления сводного отчета по образцу после пакетной обработки в специальном модуле «NBS Analyst» (пример).

ДЛЯ РИСУНКА 14.27.	
Текст на оригинальном (английском) языке	Перевод текста на русский язык
Analyse software	Аналитическая программа
Compound Library (C)	Библиотека соединений (C)
Batch table	Таблица серий
Qualitative analysis	Количественный анализ
Qualitative method	Количественный метод
Spectrum Library Management	Управление библиотекой спектров
Chart Management	Управление графиками
Help	Справка
Sample Information	Информация об образце

СЕРТИФИКАТ

/Логотип: ССРП/

**Комитет Китая содействия развитию международной торговли
Международная торговая палата Китая**

/Логотип: ССРПТ/

Комитет содействия международной торговле Китая

Международная торговая палата Китая

/QR-код/
№ 241100B0/H38913

СЕРТИФИКАТ

/Фрагмент круглой печати: Комитет Китая содействия международной торговли, КНР
Специальная печать для коммерческих сертификатов
ССРПТ/

НАСТОЯЩИМ ПОДТВЕРЖДАЕТСЯ, что печать Hangzhou EXPECLIN Medical Technology Co., Ltd. (ООО «Ханчжоуская медицинская технологическая компания Экспеклин») в прилагаемом документе подлинная.

/фрагмент круглой печати/

Комитет Китая содействия международной торговли, КНР
Специальная печать для коммерческих сертификатов
ССРПТ

/круглая печать/

Комитет Китая содействия международной торговли, КНР
Специальная печать для коммерческих сертификатов
ССРПТ

Комитет Китая содействия международной торговли

Уполномоченное лицо: Чен Йао

Подпись: /подписано/

Дата: 12.09.2024 года
(12 сентября 2024)

/оттиск печати/

Комитет Китая содействия международной торговли, КНР
Специальная печать для коммерческих сертификатов
ССРПТ

Веб-сайт для проверки подлинности сертификата: <http://www.rzccpit.com/validate.html>

УТВЕРЖДЕНО
ООО «Ханчжоуская медицинская технологическая компания Экспеклин»

Организация

Китай, провинция Чжэцзян, г. Ханчжоу, район Линьянь,
квартал Циншаньху, проспект Науки и техники, 2466-1, этаж 6

Адрес

Генеральный директор

Должность

Юй Сяофэн (Юй Сяофэн)

Фамилия, имя

03.09.2024

Дата ДД.ММ.ГГГГ

/подписано/

Подпись

Руководство по эксплуатации на медицинское изделие

Система жидкостной хромато-масс-спектрометрии для диагностики in vitro HELICON® Inspero 5200

Версия документа 1.0

/Фрагмент круглой печати: Комитет Китая содействия международной торговли, КНР
Специальная печать для коммерческих сертификатов
ССРП/

/Печать: ООО «Ханчжоуская медицинская технологическая компания Экспеклин» *
33018510125525/

/фрагмент круглой печати/

Комитет Китая содействия международной торговли, КНР
Специальная печать для коммерческих сертификатов
ССРП

Производитель:

ООО «Ханчжоуская медицинская технологическая компания Экспеклин»

Китай, провинция Чжэцзян, г. Ханчжоу, район Линьянь, квартал Циншаньху,
проспект Науки и техники, 2466-1, этаж 6

Уполномоченный представитель производителя и дистрибьютор в Российской Федерации:
Общество с ограниченной ответственностью «Компания Хеликон» (ООО «Компания Хеликон»)
119619, Москва, Новомещерский проезд, дом № 9, стр. 1, комн. 11

/Логотип: Федеральное агентство
по техническому регулированию и метрологии/

/QR-код/	Этот Апостиль удостоверяет только подлинность подписи, правоспособность лица, подписавшего официальный документ, и, при необходимости, подлинность печати или штампа, который имеет официальный документ. Этот Апостиль не удостоверяет содержание официального документа, на основании которого он был выдан.	/Штрих код/ 11395903
АПОСТИЛЬ (Гаагская конвенция от 5 октября 1961 года)		
1. Страна	Китай	
2. Подписан	Чен Йао	
3. Выступающим в качестве	Уполномоченное лицо	
4. Скреплен печатью/штампом	Китайский совет по содействию международной торговле	
Заверено		
5. В Пекин	6. 13 сентября 2024	
7. Кем	Ли Ян, Первый секретарь департамента консульского отдела Министерства иностраннх дел /подпись/	
8. За №	240000416858	
9. Печать/штамп /круглая печать: Министерство иностранных дел Китайской Народной Республики/	10. Подпись /подписано/	

Перевод данного текста выполнен мной, переводчиком Марковым Александром Александровичем.

ПОДПИСЬ

Российская Федерация

Город Москва

Шестнадцатого октября две тысячи двадцать четвертого года.

Я, Якубова Татьяна Олеговна, нотариус города Москвы, свидетельствую подлинность подписи переводчика Маркова Александра Александровича.

Подпись сделана в моем присутствии.

Личность подписавшего документ установлена.

Зарегистрировано в реестре: № 77/2171-н/77-2024- 8-991

Уплачено за совершение нотариального действия: 400 руб. 00 коп

Т.О. Якубова

Гербовая печать
нотариуса города Москвы
Якубовой Т. О.
ИНН 771775502947*

ПОДПИСЬ

ПОДПИСЬ

Всего прошнуровано, пронумеровано
и скреплено печатью 247 лист(а)(ов)

Нотариус

Гербовая печать
нотариуса города Москвы
Якубовой Т. О.
ИНН 771775502947*

Российская Федерация
Город Москва

Шестнадцатого октября две тысячи двадцать четвертого года.

Я, Якубова Татьяна Олеговна, нотариус города Москвы,
свидетельствую верность копии с представленного мне документа.
Страницы 1-243 представленного документа являются копиями.
Зарегистрировано в реестре: № 77/2171-н/77-2024- 8-999
Уплачено за совершение нотариального действия: 400 руб. 00 коп.



Всего прошнуровано, пронумеровано
и скреплено печатью 247 лист(а)(ов)

Нотариус

Handwritten signature of T.O. Yakubova.