



## 精准调校

AutoCalibrate 可使您的波谱仪保持最佳性能，无论用户的核磁共振专业知识水平如何，都可确保生成出色的数据。AutoCalibrate 在运行时尽可能减少了用户的参与度，从而让您腾出时间来从事自己喜欢的科学工作，而非耗费在谱仪维护上面。

AutoCalibrate 可监测几个关键参数，包括脉宽、温度和匀场，确保这些参数始终为当前值。AutoCalibrate 可每天运行，确定每个参数的最佳设置，然后记录结果、监控偏差，并在适当的时候以最佳值更新必要的表。

- 测量脉宽
- 更新三维匀场
- 优化温度设置
- ERETIC II 校准校验

图 1: 这四项综合测试用于评估在核磁共振波谱仪上产生偏差的最常见的参数。通过跟踪这些测试结果的历史记录，训练有素的技术人员可了解波谱仪的短期和长期运转状况。

## 易于设置

AutoCalibrate 通过 IconNMR 运行。只需要打开软件并设定日程安排；无需其他设置。对所有测试的跟踪日志文件加以存储，在需要进行高级故障排除时，布鲁克的二级支持团队可方便地访问这些日志文件。

建议每天运行一次 AutoCalibrate，但借助 GUI（图形用户界面）中提供的日程安排（如下图所示），在其符合工作流程的情况下，用户可灵活地运行 AutoCalibrate。测试例程大约需要一个小时，取决于场强和探头。AutoCalibrate 可在从 AVIII 到最新的 AVNeo 硬件、室温探头 PRODIGY 低温探头和 CryoProbe 液氮超低温探头上运行。日常运行时，AutoCalibrate 可快速解决小问题，以避免以后出现大问题。

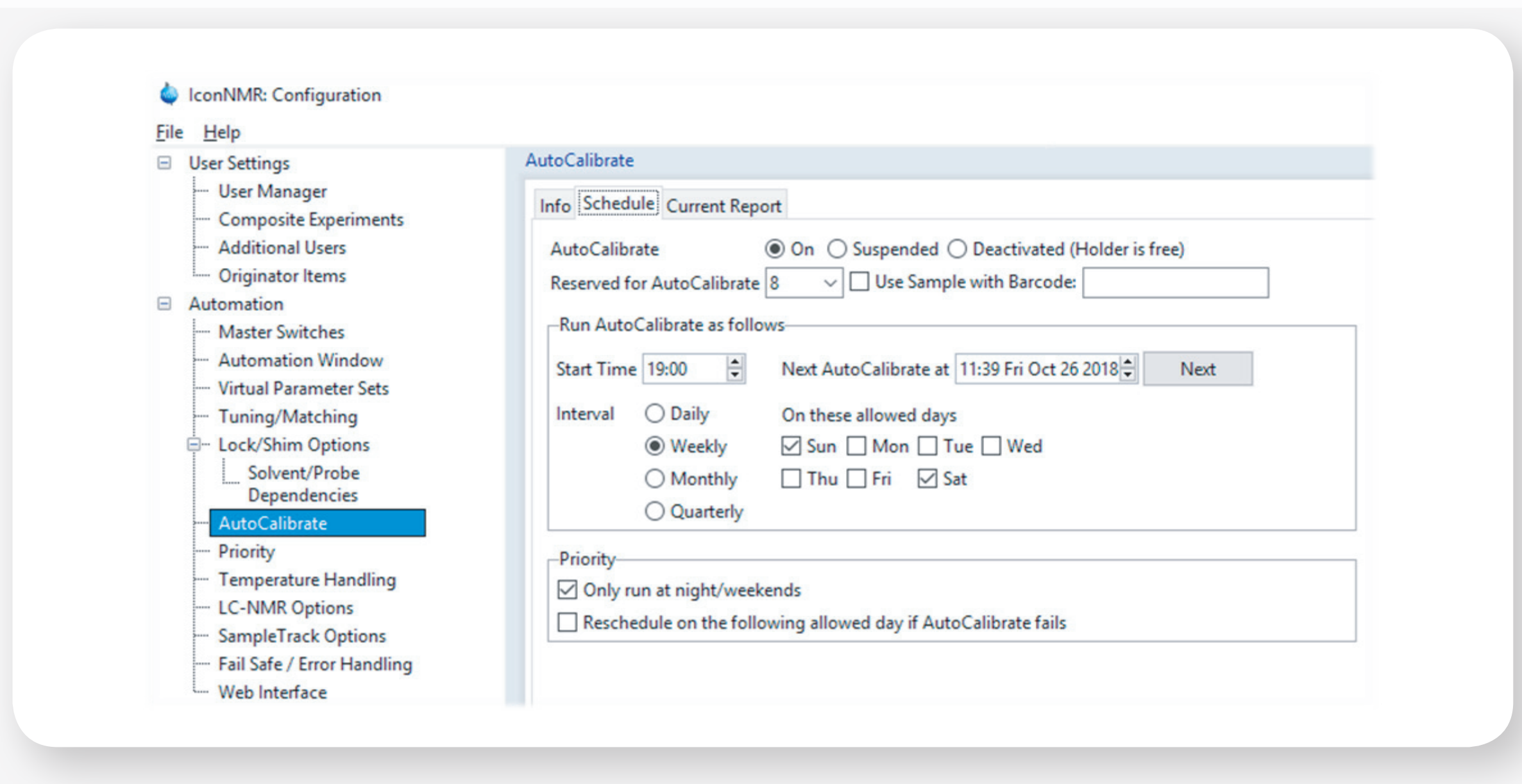


图 2: AutoCalibrate 自 Topspin 4.0.7/TopSpin 3.6.2 开始实施并通过 IconNMR 运行，只要安装了合适的软件，使用 AVNeo、AVIIIHD 和 AVIII 硬件的客户即可访问 AutoCalibrate。

## 科学测试

通过保持样品相同，可将问题限定在硬件上。AutoCalibrate 样品与 2mM 蔗糖标准品类似，不同之处在于其固定在旋转器中，以确保每次测试过程中其在探头中的位置相同。可对每一次 AutoCalibrate 运行时所创建的 TopShim 数据图进行研究，以查看逐日以及长期发生的变化。

每次运行 AutoCalibrate 时会对温度参数进行优化，从而发现一些诸如阻塞变温气流路径或探头中的玻璃器皿出现裂纹之类的问题。

针对质子和碳脉冲进行校准，以确保最佳灵敏度和整体数据质量。只有在脉冲差异大于正态漂移的情况下，才对基础表进行更改。

最后，通过确定样品中 DSS 的浓度来检查系统的整体运转状况。使用完全相同的 AutoCalibrate 样品，可确保 DSS 浓度的任何变化，都是由于硬件效率低而不是样品之间的差异所导致的。

## 与 AssureSST 配套使用

AutoCalibrate 可测量和存储基本参数，如脉宽、匀场和温度校准。不过，如果用户对核磁共振波谱仪的综合性能测试感兴趣，可使用 AssureSST。该系统适用性测试程序可针对多项测试运行不同的样品，并将结果与规格表加以比较。配套使用 AutoCalibrate 和 AssureSST 可确保核磁共振波谱仪保持出色运行性能并生成高质量数据。

### 对比 AutoCalibrate 与 AssureSST

- |   |   |
|---|---|
| <ul style="list-style-type: none"> <li>• AutoCalibrate - 为数据采集设置最佳参数                     <ul style="list-style-type: none"> <li>• 质子脉冲</li> <li>• 碳脉冲</li> <li>• 温度校正、流量测量、自调校</li> <li>• 三维匀场</li> <li>• qNMR 一致性</li> </ul> </li> <li>• 仅需 1 份样品，无需用户或管理者决策。</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>• AssureSST - 测量灵敏度和谱线形状结果以确保系统按规范运行 - GxP PQ 测试的一部分                     <ul style="list-style-type: none"> <li>• 质子灵敏度和谱线形状</li> <li>• 碳灵敏度</li> <li>• 水峰压制灵敏度和谱线形状</li> <li>• 其他 x-nudei 测试 (<sup>13</sup>C、<sup>31</sup>P、<sup>19</sup>F、<sup>15</sup>N 等……)</li> <li>• 用户定义的测试</li> <li>• AssureNMR qNMR 测试的 qNMR 值（用户必须提前设置这些方法）</li> <li>• 一维匀场</li> <li>• 温度校正</li> </ul> </li> <li>• 需要多份样品以及一些用户或管理者定义的规范和方法</li> </ul> |
|---|---|

## 总结

AutoCalibrate 对于维护精准调校的核磁共振波谱仪、变化追踪并监测整个系统的长期性能和运转状况至关重要。