

Manuel de usuario

ASpect CS



Productor Analytik Jena GmbH
Konrad-Zuse-Str.1
07745 Jena · Alemania
Teléfono + 49 3641 7770
Fax + 49 3641 77 9279
Correo electrónico info@analytik-jena.com

Servicio al cliente Analytik Jena GmbH
Konrad-Zuse-Str. 1
07745 Jena · Alemania
Teléfono +49 3641 77 7407
Fax +49 3641 77 7449
Correo electrónico service@analytik-jena.com

Información general <http://www.analytik-jena.com>

Derechos de autor y
marcas comerciales multi N/C y multiWin son marcas comerciales registradas de Analytik-Jena GmbH en Alemania. Windows, Excel son marcas comerciales registradas de Microsoft Corp. En este manual se prescinde del uso de las marcas ® o TM.

Edición B (03/2021)

Realización de la
documentación técnica Analytik Jena GmbH

© Copyright 2021, Analytik Jena GmbH

Tabla de Contenidos

1	Software ASpect CS	7
1.1	Normas del manual.....	8
1.2	Iniciar y finalizar ASpect CS.....	8
1.3	Indicaciones generales	9
1.3.1	El escritorio.....	9
1.3.2	La función de ayuda	9
1.3.3	La barra de menú	9
1.3.4	Elementos de manejo más utilizados	10
1.3.5	Teclas de función.....	12
1.4	Desarrollo general de una medición.....	12
2	Ajustes preparatorios: selección de la tarea	14
3	Métodos.....	17
3.1	Gestionar método.....	17
3.1.1	Crear parámetros de método	17
3.1.2	Guardar métodos	17
3.1.3	Abrir métodos.....	18
3.2	Especificar método	19
3.2.1	Pestaña LÍNEAS: seleccionar líneas de elementos	19
3.2.2	Pestaña Llama LLAMA: parámetros de llama	23
3.2.3	Pestaña HORNO: parámetros del horno de tubo de grafito	24
3.2.4	Pestaña HIDRURO: especificar sistema de hidruro	26
3.2.5	Configurar el cargador de muestras – PESTAÑA ALIMENTACIÓN DE MUESTRAS.....	31
3.2.6	Pestaña EVALUACIÓN: rango espectral y correcciones de fondo.....	40
3.2.7	Pestaña CALIB.: parámetros de calibración	42
3.2.8	Pestaña ESTADÍSTICA: definir la evaluación estadística	50
3.2.9	Pestaña QCS: muestras de control de calidad	52
3.2.10	Pestaña QCC: control de calidad durante el desarrollo del análisis	56
3.2.11	Pestaña SALIDA: vista de la pantalla, impresión y contenidos	58
4	Secuencias	59
4.1	Gestionar métodos y secuencias.....	59
4.1.1	Crear nueva secuencia.....	59
4.1.2	Guardar secuencia.....	59
4.1.3	Abrir secuencia	60
4.2	Funciones de diálogo específicas en la ventana SECUENCIA.....	60
4.3	Especificar secuencias de muestras y acciones.....	62
5	Datos de información de las muestras	65
5.1	Gestionar datos de información de las muestras.....	65
5.1.1	Crear nuevo conjunto de datos de información de las muestras.....	65
5.1.2	Guardar datos de información de muestras.....	65
5.1.3	Abrir datos de información de muestras.	65
5.1.4	Importar información de las muestras del formato CSV	65
5.2	Elementos de la ventana ID de muestras	66
5.3	Procesar ID de muestras	68
5.4	Procesar ID de muestras QC.....	69
6	Iniciar análisis/Calcular resultado.....	70
6.1	Resumen de comandos del menú y símbolos para el inicio del análisis en la ventana principal.....	70
6.2	Iniciar el transcurso del análisis	71
6.3	Interrumpir/detener/continuar el transcurso del análisis	73
6.4	Repetir acciones de la secuencia.....	74

6.5	Calcular de nuevo los resultados del análisis.....	75
6.6	Evaluar mediciones de forma paralela al análisis en curso.....	76
6.7	Mostrar resultados y desarrollo del análisis.....	77
6.7.1	Pestaña SECUENCIA/RESULTADOS.....	77
6.7.2	Pestaña SECUENCIA.....	77
6.7.3	Pestaña RESULTADOS.....	78
6.7.4	Pestaña VISIÓN GENERAL.....	82
6.7.5	Pestaña SÓLIDO.....	82
6.8	Gestionar resultados del análisis.....	83
6.9	Detalles de las muestras y espectros.....	84
6.9.1	Mostrar detalles de los valores individuales de las muestras.....	84
6.9.2	Mostrar espectros.....	86
6.10	Analítica de sólidos con técnica de tubo de grafito.....	92
6.10.1	Preparar muestras sólidas y medirlas.....	93
6.10.2	Guardar los datos de las muestras ya preparadas.....	97
6.10.3	Volver a medir las muestras de un análisis de sólidos.....	98
6.11	Lavado del sistema.....	99
7	Calibración.....	100
7.1	Representación de la curva de calibración.....	101
7.2	Indicación de los resultados de calibración.....	102
7.3	Modificar curva de calibración.....	103
8	Control de calidad.....	105
8.1	Parámetros de las tarjetas QC.....	105
8.2	Entradas y límites de las tarjetas QC.....	106
8.3	Mostrar tarjetas QC.....	108
9	Gestionar y controlar el equipo y los accesorios.....	110
9.1	Espectrómetro.....	110
9.1.1	Prueba de función del equipo en contrAA.....	110
9.1.2	Medir pico de espectros en una longitud de onda seleccionada.....	112
9.1.3	Iniciar medición continua.....	113
9.1.4	Corregir la posición de pico.....	114
9.2	Llama.....	116
9.2.1	Controlar las funciones de llama.....	116
9.2.2	Optimizar la llama.....	119
9.2.3	Apagar llama.....	123
9.3	Horno.....	123
9.3.1	Editar programa de horno.....	124
9.3.2	Seleccionar modificadores de matriz, enriquecimiento y tratamiento.....	127
9.3.3	Optimizar la temperatura de atomización.....	129
9.3.4	Representar gráficamente el programa de horno / recubrir tubo de grafito.....	132
9.3.5	Otras funciones del horno.....	134
9.4	Sistema de hidruro.....	136
9.4.1	Comprobar errores en el sistema de hidruro.....	138
9.5	Automuestreador.....	140
9.5.1	Cargadores de muestras AS 51s/AS 52s y AS-F/AS-FD.....	140
9.5.2	Unidad de micropipeta MPE 60 / AS-GF.....	149
9.5.3	Cargador de muestras para la analítica de sólidos.....	161
10	Gestión de datos.....	166
10.1	Impresión en ASpect CS.....	166
10.1.1	Imprimir resultados del análisis.....	166
10.1.2	Imprimir otros parámetros de análisis y ajustes.....	167
10.1.3	Editar plantillas de protocolo.....	168
10.2	Gestión de datos para métodos, secuencias y datos de resultados.....	170
10.2.1	La ventana de base de datos.....	171
10.2.2	Gestionar métodos y secuencias.....	172

10.2.3	Gestionar archivos de resultados.....	173
10.2.4	Copiar archivo de líneas/longitudes de onda	174
10.3	Especificación de unidades	175
10.4	Especificación de soluciones patrón madre y muestras QC	175
10.5	Crear comentarios predefinidos.....	176
10.6	Guardar resultados en formato CSV/ASCII	177
10.7	Utilizar el portapapeles de Windows.....	177
10.7.1	Copiar datos de resultado en el portapapeles	177
10.7.2	Copiar gráficos como capturas de pantalla.....	178
11	Configuración de ASpect CS	179
11.1	Configuración universal	179
11.1.1	Opciones de vista	179
11.1.2	Ruta de archivo	181
11.1.3	Opciones de exportación.....	181
11.1.4	Opciones de la exportación ASCII continua	182
11.1.5	Opciones para el transcurso del análisis.....	183
11.1.6	Opciones de lavado del sistema óptico.....	185
11.1.7	Opciones de calibración	185
11.2	Libro de recetas.....	186
12	Gestión de usuario.....	187
12.1	Jerarquía y acceso a funciones	187
12.2	Configurar la gestión de usuario.....	188
12.2.1	Configurar la gestión de usuario.....	190
12.2.2	Crear una nueva cuenta de usuario	194
12.2.3	Modificar una cuenta de usuario existente	196
12.3	Examinar y exportar Audit Trail.....	196
12.4	Modificar contraseña	198
12.5	Firmas electrónicas	199
12.5.1	Firmar resultados de medición	199
12.5.2	Mostrar firma	200
13	Anexo.....	202
13.1	Esquema sobre las marcas de la indicación de valores.....	202
13.2	Descripción de los algoritmos utilizados para la corrección de fondo espectral	203
13.2.1	Generalidades.....	203
13.2.2	Corrección de fondo "sin referencia".....	203
13.2.3	Corrección de fondo "con referencia".....	203
13.2.4	Corrección de fondo "IBC"	204
13.2.5	Sustracción de espectros (corrección de estructuras permanentes).....	205
13.3	Utilización de espectros de corrección en ASpect CS.....	205
13.3.1	Posición inicial.....	206
13.3.2	Registro de los espectros de corrección	206
13.3.3	Creación de un modelo de corrección.....	207
13.3.4	Incorporación del modelo de corrección al método	209
13.4	Lugar de almacenamiento de los archivos de ASpect CS.....	210

1 Software ASpect CS

ASpect CS es el software de evaluación y control para el espectrómetro de absorción atómica de alta resolución con fuente de radiación continua (High Resolution Continuum Source AAS - HR-CS AAS):

- contrAA 300 – Dispositivo para la técnica de llama y la de hidruro o de vapor frío de Hg
- contrAA 600 – Dispositivo para la técnica de tubo de grafito y HydrEA
- contrAA 700 – Dispositivo combinado para la técnica de llama, técnica de tubo de grafito, técnica de hidruro o de vapor frío de Hg y técnica de HydrEA
- contrAA 800 F – Dispositivo para la técnica de llama y la de hidruro o de vapor frío de Hg
- contrAA 800 G – Dispositivo para la técnica de tubo de grafito y HydrEA
- contrAA 800 D – Equipo combinado para la técnica de llama, técnica de tubo de grafito, técnica de hidruro o de vapor frío de Hg y técnica de HydrEA

Compatibilidad con los siguientes accesorios de Analytik Jena:

- Cargadores de muestras EAA AS 51s/AS 52s y AS-F/AS-FD para técnica de llama
- Cargador de muestras sólidas SSA 600 con o sin dosificación de líquidos
- Unidad de micropipeta MPE 60 y AS-GF para la técnica de tubo de grafito
- Sistemas de hidruro HS60/HS60A, HS55/HS55A e inyector de hidruro HS50 (técnica de hidruro o de vapor frío de Hg)
- Módulo de inyección SFS 6 (técnica de llama)

El software es compatible con las exclusivas posibilidades del HR CS-AAS, entre ellas: la corrección de fondo simultánea a través del registro de información espectral adyacente a la línea de análisis, o el rápido cambio de líneas (elementos) y la rápida medición secuencial multielemento con flujo continuo de muestras con la técnica de llama. Para las mediciones se pueden optimizar los parámetros de medición de acuerdo con las exigencias de las muestras. Los datos de resultado se pueden volver a calcular, exportar en distintos tipos de archivos e imprimir.

Versión del software
descrita

Este documento se refiere a la versión ASpect CS 2.2.

Uso previsto

El software ASpect CS está exclusivamente destinado al control de los espectrómetros de absorción atómica de alta resolución con fuente de radiación continua antes mencionados y a la evaluación de los datos registrados por este equipo.

El fabricante no se hace responsable de problemas o daños provocados por no respetar el uso previsto del ASpect CS.

ASpect CS y los equipos que con éste se controlen, sólo pueden ser utilizados por personal formado e instruido. El usuario tiene que estar familiarizado con el contenido de este manual de instrucciones y con el del equipo.

1.1 Normas del manual

Para facilitar la orientación en este documento se han utilizado los siguientes símbolos:

- En la descripción de las fases de trabajo, los comandos del menú, las ventanas de diálogo, los botones, las opciones, etc., están marcados en versalita.
- Los comandos del menú de una secuencia de comandos están separados por una flecha (▶), p. ej., ARCHIVO ▶ ABRIR.
- Los botones están señalados con corchetes, p. ej. [GUARDAR].
- Con frecuencia, las ventanas están divididas en pestañas. El nombre del fichero se añade con una barra oblicua al nombre de la ventana, p. ej., ventana OPCIONES / VISTA.

1.2 Iniciar y finalizar ASpect CS

Iniciar ASpect CS

- Haga clic sobre el icono de ASpect CS del escritorio Windows.



- Alternativamente, abra el menú de programas del sistema operativo y en la carpeta del programa ASpect CS seleccione el programa con el mismo nombre.
 - ✓ ASpect CS se iniciará.

Cuando la gestión de usuario opcional está instalada, aparecerá una ventana solicitando el nombre de usuario y la contraseña. Si los introduce correctamente, se abrirá el ASpect CS.

En la aplicación ya iniciada se abrirá otra instancia de la aplicación en modo offline. En este modo no hay conexión con el equipo. El resto de las funciones como la creación de métodos o la carga de resultados se pueden utilizar de forma paralela a la medición en marcha de la primera instancia.

Después de iniciar la aplicación se abrirá la ventana PREAJUSTES.

Finalizar ASpect CS

- Finalice el programa mediante el comando ARCHIVO ▶ FINALIZAR.
- De manera alternativa, también puede cerrar el programa en la ventana PREAJUSTES, haciendo clic en el botón [FINALIZAR APLICACION].
- Si todavía no ha guardado los datos de información de los métodos, secuencias o muestras, aparecerá un aviso. Haga clic en [Sí] si quiere guardar los datos.
- Si trabaja con un sistema de hidruro, aparecerá una ventana para limpiar el sistema a través del software.

En la técnica de llama, se muestra un mensaje en el que se pide apagar la llama, si está encendida.
- Si la lámpara de xenón todavía está encendida, aparecerá una ventana para que apague la lámpara. Después de apagar la lámpara tienen que transcurrir 30 s hasta que se apague el contrAA. El transcurso de dicho tiempo se mostrará en la pantalla gráficamente. Después podrá apagar también el hardware del contrAA.

1.3 Indicaciones generales

1.3.1 El escritorio

Después de iniciar el software ASpect CS, se abrirá la ventana PREAJUSTES. Después de seleccionar la tarea y confirmarla con [OK], se abre la interfaz de trabajo. Contiene los elementos típicos de las aplicaciones de Windows como p. ej.:

- La barra de título con los botones estándar para ajustar el tamaño de la ventana y cerrar el programa
- La barra de menú
- La barra de herramientas y la de símbolos con botones de acceso directo a las funciones más importantes del programa
- Interfaz de trabajo para la barra de resultados y otras ventanas (p. ej., METODOS)
- Barra de estado en el marco inferior

1.3.2 La función de ayuda

La ayuda para el manejo de ASpect CS se encuentra en el comando ? ► CONTENIDO E INDICE. Con ? ► BUSCAR puede buscar ayuda con palabras clave.

Mientras trabaja con las ventanas y los cuadros de diálogo en el ASpect CS, puede presionar la tecla de función [F1] para obtener ayuda.

El programa muestra una breve información (tooltips) sobre los botones de la barra de herramientas y la de símbolos, otros botones de símbolos y los títulos de las columnas de las ventanas METODO, SECUENCIA e ID DE MUESTRAS, cuando sitúa el ratón sobre estos.

1.3.3 La barra de menú

En el borde superior de la superficie de trabajo del ASpect CS se encuentra la barra de menú con todos los procesos del software que se pueden activar. Los menús y los botones que no se puedan utilizar para el contenido actual de la superficie de trabajo, se mostrarán en gris. Algunos puntos del menú, como p. ej. la función de impresión, se mostrarán dependiendo de otras ventanas abiertas.

Menú	Descripción
ARCHIVO	Crear, abrir, guardar y borrar nuevos métodos, secuencias e informaciones de muestras. Abrir datos de resultados. Exportar datos espectrales. Configurar impresora e imprimir. Iniciar instancia de aplicación en modo offline/online. Abrir la ventana PREAJUSTES. Finalizar la aplicación. Acceder directamente a los métodos y las secuencias abiertos recientemente.

EDITAR	Marcar, copiar y añadir el contenido de campos de texto y de entrada. Copiar líneas determinadas de la lista de resultados en el portapapeles. Borrar el contenido de la lista de resultado.
VISTA	Ventanas que contienen representaciones e información durante el análisis, p. ej., abrir y cerrar, curso de las señales. Seleccionar escala del eje de señal de las representaciones.
DESARROLLO DE MÉTODOS	Acceder a ventanas que se necesitan durante el desarrollo de métodos. Abrir libro de recetas,
RUTINA	Acceder a comandos que controlan el proceso de medición.
SISTEMA	Solo en la versión FDA Utilizar gestión de usuario. Firmar datos. Utilizar AuditTrail.
EXTRAS	Abrir la ventana DATOS. Abrir la ventana OPCIONES. Buscar muestras. Imprimir capturas de pantalla. Activar MODO MONITOR para documentas datos de diagnóstico (solo necesario para acciones de diagnóstico tras ser solicitado por personal de servicio técnico autorizado).
VENTANAS	Ordenar y activar las ventanas abiertas.
?	Mostrar ayuda e información sobre la versión del software. Exportar información de diagnóstico.

1.3.4 Elementos de manejo más utilizados

Hay distintas funciones de botones, ratón y teclado del ASpect CS que siempre se utilizan con un fin igual o muy similar.

Los elementos de manejo se describen aquí de manera general. Si lo necesita puede encontrar más información en la descripción de la ventana correspondiente.

Botones generales

El significado de los botones de símbolos se muestra a través de los tooltips cuando sitúa el ratón sobre el símbolo correspondiente.

Botón	Descripción
[OK]	Cerrar ventana y añadir configuración.
[CANCELAR]	Cerrar ventanas y desechar cambios.
[ADOPTAR]	Añadir configuración sin cerrar la ventana.
[CERRAR]	Cerrar ventanas, la configuración no se puede guardar permanentemente.
[ABRIR]	Abrir una ventana de selección para cargar un archivo o un conjunto de datos.
[GUARDAR]	Abrir una ventana de selección para guardar un archivo o un conjunto de datos.
[...]	Abrir un cuadro de diálogo de selección, p. ej. cuadro de diálogo de ruta.



Abrir la ventana IMPRIMIR. El contenido de la ventana actual se puede imprimir o exportar a un archivo.

Listas

En algunas ventanas, los valores se introducen directamente en una lista. Dependiendo del tipo de entrada, la lista se muestra como un campo de entradas, una lista de selección o un campo de entradas para un rango de valores numéricos limitado con teclas de flechas.

- Para marcar un renglón de la tabla haga clic en la primera columna gris de la tabla, en el renglón correspondiente. La barra de marcación se puede mover después con las teclas [↑] y [↓].
- Para cambiar el ancho de columna mueva el ratón en la línea de encabezado de la columna hasta que aparezca una flecha doble. Si mantiene apretado el botón izquierdo del ratón, puede ajustar el ancho de columna.
- En los campos de entradas dispone de las siguientes funciones adicionales:
- [F2] activa el modo de edición. Con este modo se utilizan las teclas [←] y [→] para **editar por caracteres**. Si vuelve a presionar [F2], se activa el modo estándar en el que se utilizan los botones del cursor para navegar entre las celdas.
- Los textos se pueden copiar y volver a añadir a través del menú EDITAR ► COPIAR y EDITAR ► INSERTAR o a través de la combinación de teclas [CTRL+C] y [CTRL+V] en el portapapeles de Windows.
- **Los siguientes** botones están disponibles para listas:

Botón	Descripción
[ADJUNTAR]	Añade un nuevo renglón al final de la lista.
[INSERTAR]	Añade un nuevo renglón anterior al renglón marcado.
[BORRAR]	Borra los renglones marcados.
	Sube el renglón marcado una posición.
	Baja el renglón marcado una posición.
	Adopta el valor de la celda actual en todos los renglones siguientes (columnas). Si activa la casilla de control INC., el valor se incrementa de forma automática, p. ej., Muestra001, Muestra002...

Gráficos

En gráficos, con el botón derecho del ratón se puede abrir un menú contextual para copiar el gráfico o toda la ventana en formato de gráfico en el portapapeles de Windows.

En distintas ventanas de gráfico dispone de los siguientes botones de símbolos adicionales:

Botón	Descripción
	Activa el modo de zoom. Si mantiene apretado el botón izquierdo del ratón, puede seleccionar un área del gráfico que debe ampliarse.
	Desactiva el modo de zoom y vuelve a transformar la representación a la escala original.



Activa el modo de texto. Al mantener pulsado el botón izquierdo del ratón es posible seleccionar un área de una ventana con la que se puede añadir texto al gráfico. Mediante un clic doble sobre un texto existente se abre la ventana para editar o borrar el texto. Con Ctrl+botón derecho del ratón, se puede desplazar el texto existente.



Activa el modo de marcación en representaciones del curso de las señales o espectros. Con el botón izquierdo del ratón se agregan notas a los puntos de medición.

1.3.5 Teclas de función

Tecla	Descripción
[F1]	Acceder a ayuda relacionada con el contexto.
[F2]	Editar celdas de listas.
[F5]	Iniciar impresión de pantalla.
[F6]	Medir los renglones seleccionados de la secuencia (comando RUTINA ► EJECUTAR RENGLON(ES) DE LA SECUENCIA).
[F7]	Mostrar ventana de representación adicional (curso de las señales, estado de la llama).
[F8]	Cerrar ventana de representación adicional (curso de las señales, estado de la llama).
[F10]	Para manejar el menú con el teclado: puede cambiar entre el renglón del menú del área de trabajo y la ventana de resultados.
[F11]	Continuar el curso de medición detenido (comando RUTINA ► CONTINUAR).
[F12]	Iniciar o detener el curso de medición (comando RUTINA ► INICIAR SECUENCIA y RUTINA ► STOP).

1.4 Desarrollo general de una medición

Para una medición manual o automática tiene que seguir los siguientes pasos:

1. Establecer **Parámetros de método** (desarrollo de métodos).
2. **Crear secuencia**. Contiene muestras y acciones en el orden a seguir. Algunos datos descriptivos sobre las muestras, como el nombre de éstas y su posición en el plato de muestras, pueden introducirse directamente y se guardan en la secuencia.
3. Además se puede crear un **Archivo de identificación de muestras**. El archivo contiene datos descriptivos sobre la muestra como el nombre, el factor de dilución y las posiciones del plato de muestras. Estos datos serán necesarios si hay que realizar un cálculo a la inversa de las concentraciones en la muestra original. Los archivos de identificación de las muestras son archivos de texto y se pueden crear también con programas externos.
4. Iniciar medición.

Durante el desarrollo de la medición los resultados se escribirán inmediatamente en la base de datos de resultados. Las funciones de gestión de datos accederán a este archivo central de resultados (Exportar, Imprimir).

Después del inicio de la **Medición**, los valores de los resultados se añadirán a la **Lista de resultados**. Para mostrar detalles (valores individuales, espectros, etc.) puede seleccionar la celda correspondiente. Los últimos resultados medidos se añadirán al final de la tabla, no se pueden sobrescribir.

Si fuera necesario, puede realizar otra evaluación de datos con **Calcular de nuevo**. Los datos de medición se pueden procesar o exportar para la impresión de protocolo.

2 Ajustes preparatorios: selección de la tarea

La selección de la tarea de análisis se realiza en la ventana PREAJUSTES, que se muestra inmediatamente después de iniciar el programa.

De manera alternativa también puede abrir esta ventana con el comando ARCHIVO ► PREAJUSTES.

La selección en la ventana PREAJUSTES determina las siguientes actividades, datos e indicaciones posibles.

Ventana PREAJUSTES con configuraciones para la técnica de tubo de grafito

TECNOLOGÍA

Seleccionar la técnica a utilizar para la tarea concreta. Al seleccionar la técnica se predefinen otras opciones para el posterior desarrollo del programa.

Opción	Descripción
LLAMA	contrAA 300/700/800 D/800 F Atomización con el sistema pulverizador de quemador
HIDRURO	contrAA 300/700/800 D/800 F Análisis de hidruro metálico o determinación de mercurio con y sin enriquecimiento en una cubeta.
HYDREA	contrAA 600/700/800 D/800 G Análisis de hidruro de metal o determinación de mercurio en tubo de grafito
TUBO DE GRAFITO	contrAA 600/700/800 D/800 G Atomización electrotérmica (EA) con tubo de grafito.

Forma de la muestra y
tipo de tubo

contrAA 600/700/800 D/800 G

Opción	Descripción
LÍQUIDO	La muestra es líquida (disuelta). Para la atomización se debe seleccionar además el tipo de tubo:
ESTANDAR	Utilización de un tubo de grafito sin plataforma (→ Manual "contrAA 700", sección "Variantes de tubo de grafito"). La atomización de la muestra se realiza en la pared del tubo de grafito.
PLATAFORMA	Utilización de un tubo de grafito con plataforma. La atomización se realiza en la plataforma.
AUTO	Reconocimiento automático del tipo de tubo por medio de la cámara del horno, cuando la opción ACTIVAR RECONOCIMIENTO DE TUBO Y SECADOR está activada (→ "Opciones para el transcurso del análisis", pág. 183.) El tipo de tubo seleccionado influye en la profundidad de inmersión de la manguera de dosificación del automuestreador en el tubo.
FORMA	La muestra es sólida (polvos y otros).
SÓLIDA	La atomización de la muestra se realiza en un tubo de grafito especial para el análisis de sólidos. La muestra se puede colocar en el tubo de grafito mediante el cargador de muestras automático SSA 600 o el cargador manual SSA 6 z.

Accesorios disponibles

Antes de poder comenzar una medición, hay que crear una conexión entre el equipo y el ordenador. Compruebe si el espectrómetro y los accesorios están conectados y listos para funcionar. El botón [INICIALIZAR] desencadena el reconocimiento y configuración del espectrómetro y los accesorios dependiendo del tipo de técnica seleccionada.

Al salir de PREAJUSTES con el botón [OK], se comprueba el estado de inicialización y se advierte al usuario, dado el caso, de la necesidad de inicialización.

Los accesorios reconocidos se registran con el nombre. El aviso NO INICIALIZADO indica que se saltaron los accesorios en la inicialización (p. ej. el sistema de hidruro cuando se selecciona la técnica de llama). El aviso --- indica que los accesorios no fueron reconocidos.

Otros campos y botones

Botón / Campo	Descripción
FECHA y HORA	Indicación de la hora actual sistema del ordenador
LABORATORIO	En el campo se pueden introducir hasta 30 caracteres. El último nombre introducido se guarda y se emite como información en los protocolos de resultados.
USUARIO	Al utilizar la gestión de usuario de instalación opcional, aparecerá en el campo el usuario registrado. Si no se utiliza la política de autorización, se puede introducir un usuario manualmente (30 caracteres).
SIMULACIÓN	Se puede manejar el ASpect CS sin conectar un equipo AAS a modo de prueba o demostración. Todas las funciones del equipo (incluidos la evaluación y el registro de valores de medición) trabajarán en modo simulación.

[CAMBIO DE LÁMPARAS]	Sólo para contrAA 800 Mediante el botón se inicia el asistente para la sustitución de la lámpara XBO. La sustitución de la lámpara se describe en las instrucciones de uso del contrAA 800.
-------------------------	--

3 Métodos

3.1 Gestionar método

3.1.1 Crear parámetros de método

1. Para crear un nuevo método, abra el punto del menú ARCHIVO ► NUEVO MÉTODO.
Se abre un cuadro de diálogo con las siguientes opciones:

Opción	Descripción
BASADO EN LOS VALORES ESTANDAR	Abrir una ventana con parámetros de método nuevos (sólo con preajustes para la calibración y estadística).
BASADO EN LOS PARAMETROS ACTUALES	Abrir la ventana METODO con los parámetros de método actuales.
BASADO EN EL MÉTODO ALMACENADO	Abrir la ventana ABRIR METODO. Después de seleccionar un método, se mostrarán sus parámetros en la ventana METODO.

2. Seleccione la opción deseada y abra la correspondiente ventana de METODO.

Alternativamente, abra la ventana METODO con el símbolo  el comando DESARROLLO DE METODOS / METODO.

Se abre la ventana METODO con los parámetros de método actuales.

3. Los parámetros de método configurados, se activan con los botones [OK] o [ADOPTAR] para el siguiente análisis.

El significado de los botones y símbolos de la ventana METODO se describen en la sección "

Elementos de manejo más utilizados" p. 10.

3.1.2 Guardar métodos

Los métodos se gestionan en la ventana de la base de datos (→ "La ventana de base de datos" p. 171).

Puede definir el comando para guardar los parámetros de método actuales de distintos modos.

1. Haga clic en [GUARDAR] en la ventana METODO.
También puede abrir el comando ARCHIVO ► GUARDAR ► MÉTODO.
Se abre la ventana GUARDAR METODO.
2. Introduzca un nombre de método en el campo NOMBRE.
3. En el campo CAT.: (categoría) puede introducir, de modo opcional, una identificación adicional con 3 caracteres, que facilitará con posterioridad la búsqueda de métodos en la base de datos.
4. Introduzca, opcionalmente, información acerca del método en el campo DESCRIPCION.

5. Para guardar los datos de calibración con el método y para tenerlos disponibles para métodos posteriores, active la casilla de control GUARDAR CON CURVA(S) DE CALIBRACION.
6. Guarde el método con [OK].

El método está guardado en la base de datos. **Si utiliza un nombre de método ya existente, el método existente no se sobrescribirá, si no que se creará una nueva versión en la base de datos.** Para eliminar métodos de la base de datos, tiene que borrarlos explícitamente.



Nota

El método también se puede guardar en el archivo de resultados de la medición. Si ha activado la opción GUARDAR CON RESULTADOS - METODO en la ventana METODO - SALIDA, se guardará el método con los resultados de la medición. Después de acceder al archivo de resultados, el método se puede volver a cargar.

3.1.3 Abrir métodos

1. Abra el comando ARCHIVO ► ABRIR METODO o haga clic en la barra de herramientas al lado del campo METODO en el símbolo de carpeta 
También puede hacer clic en [ABRIR] en la ventana METODO.
Se abre la ventana ABRIR METODO.
2. Seleccione el método deseado de la lista.
3. En el campo CAT. puede establecer que solo se muestren métodos de una de las categorías indicadas
Si desea visualizar los métodos de todas las categorías, borre la entrada en el campo CAT.
4. Active la casilla de control SOLO MOSTRAR VERSIONES ACTUALES, cuando, con métodos del mismo nombre, sólo desee ver el método con el número de versión más alto.
5. Abra el método seleccionado con [OK].

3.2 Especificar método

3.2.1 Pestaña LÍNEAS: seleccionar líneas de elementos

Las líneas de elementos se definen en la ventana METODO / LINEAS. Se pueden seleccionar un máximo de 200 líneas.

Núm.	Elem.	Tipo	Long. de onda [nm]	Línea	val. de señal	Línea principal	Tiempo de medic [s]	Secuencia
1	Ni	Abs	352.4536	Ni352	Superficie		5.0	1
2	Co	Abs	352.6849	Co352	Superficie	Ni352	5.0	2
3	Cd	Abs	228.8018	Cd228	Superficie		5.0	3

Ventana METODO / LINEAS con líneas de elemento seleccionadas

Se deben ajustar los siguientes parámetros de línea:

Columna	Descripción	
ELEM.	Símbolo de elemento (máx. 2 caracteres)	
TIPO	Modo de medición: ABS = por absorción Modo de medición: EMS = por emisión	
LONG. DE ONDA [NM]	Longitud de onda de la línea de análisis en nm	
LÍNEA	Nombre de la línea El nombre de la línea se puede definir libremente y sirve para ordenar la línea de análisis (10 líneas).	
EVAL. DE SEÑALES	PROMEDIO:	promedio de la absorbancia a lo largo del tiempo de integración
	SUPERFICIE:	superficie pico de la absorbancia a lo largo del tiempo de integración
	ALTURA:	altura pico de la absorbancia a lo largo del tiempo de integración
LÍNEA PRINCIPAL	La línea será evaluada sin necesidad de una nueva medición con los datos de medición de la línea principal (→ "Combinar", pág. 22).	
TIEMPO DE MEDICIÓN	Tiempo de análisis para una medición de repetición en segundos (máx. 600 s)	

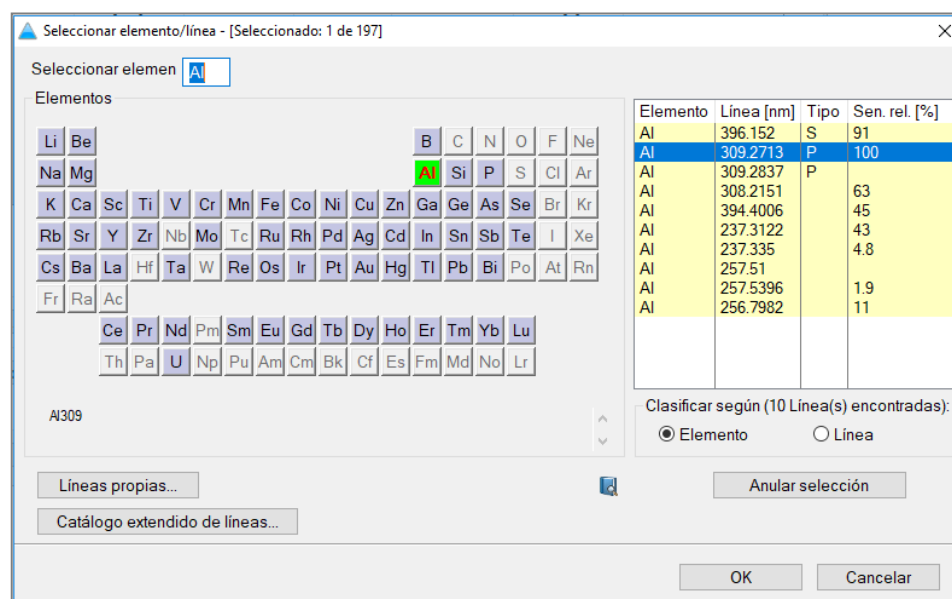
GRUPO	Sólo para la técnica de llama Las líneas de análisis con el mismo número de grupo se miden en el flujo de muestras continuo, es decir que, durante el comienzo del análisis de la siguiente línea y el ajuste del quemador, la cánula del cargador de muestras permanece sumergida en la muestra. Con grupos diferentes, la cánula del cargador de muestras sale de la muestra. El flujo de muestras hacia el quemador se detiene.
SECUENCIA	Secuencia de la medición de las líneas de análisis dentro de un grupo. Tecnología de llama: Con [OPTIMIZAR SECUENCIA] puede establecer automáticamente la sucesión de la medición en función a los flujos crecientes de gas combustible. Con la técnica de tubo de grafito, la secuencia determina la sucesión de medición de las líneas.

Indicación sobre la selección de evaluación de señales

Señal	Selección
PROMEDIO	Aplicación con una cantidad de muestra suficiente (técnica de llama, a veces técnica de hidruro).
SUPERFICIE Y ALTURA	Con la atomización de una cantidad de muestra definida (técnica de tubo de grafito, técnica de hidruro o técnica de llama en conexión con un módulo de inyección).

3.2.1.1 Insertar nueva línea de elemento

1. En la ventana METODO/LINEA abra la ventana SELECCIONAR ELEMENTO/LINEA con [ADJUNTAR].



Ventana SELECCIONAR ELEMENTO/LINEA

El cuadro de diálogo contiene la tabla periódica en la que los elementos, que se pueden seleccionar, están marcados en azul. La tabla contiene las siguientes columnas:

Columna	Descripción
ELEMENTO	Símbolo del elemento
LÍNEA	Longitud de onda en nm
TIPO	Tipo de línea
SEN. REL. [%]	Sensibilidad relativa en comparación con la línea primaria en %.

- Al seleccionar la opción ELEMENTO o LINEA se clasifica la tabla periódica de forma ascendente según el símbolo químico o la longitud de onda.
- Haga clic en el sistema periódico en un SIMBOLO DE ELEMENTO (los botones azules son elementos seleccionables); de esta manera solo se muestran las líneas del elemento seleccionado en la tabla.
Alternativamente, también puede indicar el símbolo de elemento en el campo SELECCIONAR ELEMENTO.
Borre la entrada en el campo SELECCIONAR ELEMENTO para mostrar de nuevo la lista de elementos completa.
- Para seleccionar, haga clic sucesivamente en los renglones de los elementos deseados de la tabla.
Los elementos seleccionados se mostrarán debajo del sistema periódico.
Deshará la selección de un elemento si vuelve a hacer clic en el elemento de la tabla.
Con [ANULAR SELECCIÓN] borrará toda la selección.

Nota

Puede seleccionar también varias líneas de un elemento con sensibilidad diferente.

- Confirme la selección con O.K.

- ✓ Las líneas de elementos seleccionadas se mostrarán en la ventana METODO-LINEAS.

Sólo técnica de llama

Con [INDICAR PARAMETROS DE ATOMIZACION] se abrirá un mensaje con los parámetros de llama recomendados. Los parámetros de llama se registran como preajuste en la pestaña LLAMA.

Líneas de análisis
definidas por el usuario

Con [LINEAS PROPIAS] se abrirá la ventana EDITAR LINEAS para introducir nuevas líneas de análisis. Para una línea de análisis es necesario indicar al menos el símbolo del elemento y la longitud de onda. También se puede seleccionar un tipo de línea:

Tipo de línea	Descripción
P	Línea primaria
S	Línea secundaria
M	Banda molecular Para bandas moleculares también se puede introducir opcionalmente una denominación que se mostrará bajo la línea al añadir la línea en el método.

Con [AÑADIR] se agregarán los datos a la tabla. Las líneas de análisis propias se identifican con "*" en el cuadro de diálogo SELECCIONAR ELEMENTO/LINEA en la tabla.

3.2.1.2 Combinar líneas de elemento

Al combinar líneas se buscan líneas en el programa de medición actual que puedan ser registradas por el receptor junto con una configuración del monocromador y puedan también ser medidas de manera simultánea.

- Haga clic en la ventana METODO/LINEAS en [COMBINAR LINEAS].

Se mostrará la ventana COMBINAR LINEAS.

Evaluación multilinea

Línea principal		Línea adicional		Long. de onda de i [nm]	Estado
Línea	Long. de ond	Línea	Long. de ond		
☒	Ni352	352.4536	Co352	352.5693	OK
☐					
☐					
☐					

No recopilar líneas

Intercambiar prioridad de la línea

Actualizar datos de dispersión

352.350

352.5693(MP)

352.787

Ni352(Línea ppal.)

Co352

Posiciones de línea en CCD [nm]

☐ Mostrar todas las posiciones de lír

No ha sido posible determinar con exactitud algunas dispersiones de líneas. Por favor, actualice los datos si existe una conexión con el dispositivo.

OK

Cancelar

Ventana COMBINAR LINEAS con combinaciones de líneas

En la ventana COMBINAR LINEAS se muestra una lista de las combinaciones de líneas que pueden ser registradas por el receptor de manera simultánea. Un gráfico muestra la situación de las líneas en el receptor para la línea seleccionada.

Propiedades de tabla

Columna	Contenido
Casilla de control	Si se activa, la combinación de líneas correspondiente se mide simultáneamente en el método.
LÍNEA PRINCIPAL	LÍNEA Denominación de la línea de medición LONG. DE ONDA [NM] Longitud de onda en nm de la línea de medición
Línea adicional	LÍNEA Denominación de la línea que se va a analizar adicionalmente LONG. DE ONDA [NM] Longitud de onda en nm de la línea que se va a analizar adicionalmente
LONGITUD DE ONDA DE MEDICION [NM]	Longitud de onda de medición en nm (centro de la línea del receptor)
ESTADO	Anotaciones
[NO COMBINAR LÍNEAS]	Borrar todas las marcas de las combinaciones de líneas. No se medirán líneas conjuntamente en el método.
[INTERCAMBIAR PRIORIDAD DE LAS LÍNEAS]	Intercambia la línea principal y la línea adicional en una combinación de líneas.

Para una combinación de líneas se establece de forma automática una línea principal y la línea adicional. Las líneas adicionales toman de la línea principal todos los parámetros del método determinantes para la medición. Esto incluye el tiempo de análisis (para

técnica de llama), tipo de integración y los parámetros de atomización dependientes de la técnica. Con [INTERCAMBIAR PRIORIDAD DE LAS LINEAS] se puede intercambiar dicha asignación.

El cálculo de las distancias de líneas se hace sobre la base de los datos de dispersión o del ancho de banda espectral por píxel. Durante el proceso de medición se actualizan dichos datos. Con la ayuda del botón [ACTUALIZAR DATOS DE DISPERSION] se pueden determinar los datos si la comunicación del equipo está disponible. Esto permite una mejor valoración de las posiciones de línea en el receptor.

3.2.2 Pestaña Llama LLAMA: parámetros de llama

Técnica utilizada: Llama

En la ventana METODO / LLAMA, establezca los parámetros del quemador y los flujos de gas para la técnica de llama.

Núm.	Línea	C2H2/aire [L/h]	C2H2/N2O [L/h]	Oxidante (aux.) [L/h]	Altura del quemador [mm]
1	Cu324	45		0	5
2	Al396	70		0	6
3	Cd228	50		0	6

Ventana METODO / LLAMA con configuración de quemador y flujo de gas

Configuración independiente de las líneas de elementos para el sistema de pulverizador de quemador

Ajuste después los parámetros que son válidos para todo el método de modo que no puedan variar en el análisis de las líneas de elementos individuales.

Llama

Opción / Campo	Descripción
TIPO	Selección del tipo de llama
C2H2/AIRE:	llama de aire-acetileno (flujo de gas combustible = 40 – 120 L/h)
C2H2/N2O:	llama de óxido nitroso-acetileno (solo seleccionable con quemador de 50 mm) (flujo de gas combustible = 120 – 315 L/h)

RASPADOR	El raspador se activa para el desarrollo del análisis automático con el quemador de 50 mm con llama de óxido nitroso-acetileno. De vez en cuando se limpia el quemador de forma automática. El proceso de limpieza se puede realizar ANTES DE CADA MUESTRA, ANTES DE CADA GRUPO, ANTES DE CADA LINEA, ANTES DE CADA MEDICION O ANTES DE CADA 2ª/3ª MEDICION.	
REGULACIÓN DE OX.	OFF:	funcionamiento sin oxidante adicional
	ON:	funcionamiento con oxidante adicional

i Nota

Si utiliza oxidante adicional, optimice los parámetros de llama manualmente (→ "Optimizar la llama manualmente" p. 119).

Pulverizador de quemador/Tipo

Opción	Descripción
TIPO	Selección del tipo de quemador utilizado: 50 mm o 100 mm.
ÁNGULO DEL QUEMADOR [°]:	Ángulo del quemador respecto al eje óptico. El ángulo del quemador debe ajustarse manualmente al quemador (normalmente: 0°). La indicación es opcional y se realiza aquí para la totalidad del método y del protocolo. Rango de valores: 0 – 90°
TASA DE PULVERIZACION [mL/MIN]	Tasa de aspiración del pulverizador. La tasa de aspiración es un valor específico del pulverizador. La indicación es opcional y se realiza aquí para la totalidad del método y del protocolo. Rango de valores: 1,0 – 9,9 mL/min

Parámetros dependientes de las líneas de elementos para los flujos de gas y las alturas del quemador

En la tabla se pueden indicar directamente los flujos de gas y las alturas del quemador, si están definidos para el elemento seleccionado.

Los valores también se pueden buscar automática o manualmente en el programa para la optimización de llama, y se pueden añadir a la tabla de los parámetros de llama dependientes de las líneas en la ventana METODO / LLAMA (→ "Optimizar la llama" p. 119).

3.2.3 Pestaña HORNO: parámetros del horno de tubo de grafito

Técnica utilizada: Tecnología de tubo de grafito

La ventana METODO / HORNO muestra un esquema de los parámetros más importantes de los programas del horno para la atomización de los elementos a analizar.

Ventana METODO / HORNO con configuración para los parámetros de horno

Los datos de los programas del horno tomados del libro de recetas se anotan como preajustes para la atomización de los elementos individuales por medio de la técnica EA. El programa del horno se puede editar para cada línea de elemento de análisis en la ventana HORNO y añadir al método actual (→"Editar programa de horno" p.124).

Parámetros de los programas del horno

Parámetro	Descripción						
LÍNEA	Nombre de la línea de elemento						
NÚM.	Número total de fases del programa del horno.						
SEC.	Número de fases de secado del programa del horno.						
PIRÓL. TEMP.	Temperatura de pirólisis en °C.						
ATOMIZAR	Indicación detallada de los datos de temperatura durante la fase de atomización: <table border="0"> <tr> <td>TEMP.</td><td>temperatura final de la fase de atomización en °C</td></tr> <tr> <td>RAMPA</td><td>cambio de temperatura en la fase de atomización en °C/s</td></tr> <tr> <td>GAS</td><td>Alimentación de gas de lavado o gas adicional</td></tr> </table>	TEMP.	temperatura final de la fase de atomización en °C	RAMPA	cambio de temperatura en la fase de atomización en °C/s	GAS	Alimentación de gas de lavado o gas adicional
TEMP.	temperatura final de la fase de atomización en °C						
RAMPA	cambio de temperatura en la fase de atomización en °C/s						
GAS	Alimentación de gas de lavado o gas adicional						
INY.	SIN MARCA la inyección de la muestra se lleva a cabo antes de que comience el programa del horno. "X" la muestra se inyecta después.						
PREP.	Preparación térmica. Cuando está marcada, la muestra o los modificadores se preparan de forma térmica.						
ENR.	Si está marcada, la muestra es enriquecida de acuerdo con la configuración en [MODIF. EXTRAS].						
MODIFICADORES	Modificadores utilizados adicionalmente. En cada medición se pueden añadir 5 modificadores como máximo.						

Botones

[EDITAR PROGRAMA HORNO]	Abre la ventana HORNO / PROGRAMA HORNO en la que se representa todo el programa del horno. Los parámetros del horno se pueden ajustar a cada línea de elemento que se vaya a analizar (→"Editar programa de horno" p. 124.)
[ADOPTAR EL PROGRAMA DEL HORNO]	Adopta los parámetros de las líneas de análisis seleccionadas para todas las líneas siguientes de la lista.
[MODIF.+EXTRAS]	Abre la ventana HORNO / MODIF.+EXTRAS en la que se configuran modificadores, enriquecimiento y tratamiento térmico adicionales para las líneas de elemento (→"Seleccionar modificadores de matriz, enriquecimiento y tratamiento" p. 127).

Calcinar el horno como acción adicional en la secuencia

Al final del programa del horno para una línea de elemento, éste se calcinará para realizar la limpieza. Además, la acción CALCINACION DE HORNO se puede establecer como un paso de limpieza adicional en la secuencia (→ "Especificar secuencias de muestras y acciones" p. 62). Los parámetros para dicha acción se indican en el campo ACCION CALCINACION DE HORNO.

Parámetro	Descripción
TEMP. [°C]	Temperatura a alcanzar en el proceso de calcinación.
RAMPA [°C/s]	Velocidad del cambio de temperatura.
MANTENIMIENTO [s]	Tiempo de mantenimiento de la temperatura final

3.2.4 Pestaña HIDRURO: especificar sistema de hidruro

Técnica utilizada: Técnica de hidruro y técnica HydrEA

En la ventana METODO / HIDRURO, establezca los parámetros para los sistemas de hidruro HS60A, HS60, HS55A y HS55. El sistema de hidruro conectado se reconocerá al iniciar el equipo.

Los parámetros para el inyector de hidruro HS50 se establecen bajo la técnica de llama en la pestaña ALIMENTACION DE MUESTRAS (→"Cargador de muestras para técnica de llama e hidruro/HydrEA" p. 31).



Nota

Las indicaciones para un lavado adicional o una carga del sistema de hidruro se introducirán en la ventana SISTEMA DE HIDRURO (→ "Sistema de hidruro" p. 136).

Ventana METODO / SISTEMA DE HIDRURO

Tipo de funcionamiento

El usuario puede seleccionar entre distintos tipos de funcionamiento, dependiendo del equipamiento del sistema de hidruro.

Opción	Descripción
HIDRURO (CONTINUAMENTE)	Funcionamiento con el cargador de muestras o manual. La reacción se produce en el reactor bajo condiciones continuas.
HIDRURO (BATCH)	Funcionamiento manual La muestra se pipetea en el recipiente de reacción (máx. 20 mL). Este recipiente está ajustado herméticamente al módulo Batch. Con el primer canal de la bomba de componentes, se estimula al agente reductor en el recipiente de reacción. La rápida y, en parte, fuerte reacción libera hidruro metálico gaseoso o vapor de Hg atómico.
PROCEDIMIENTO FBR	No para la técnica HydrEA (Fast Baseline Return, FBR) (solo en funcionamiento continuo) Después de alcanzar el máximo de absorción, el flujo directo de gas de argón lava la cubeta durante el TIEMPO DE LAVADO 2 (Lavado 2) y deja que la señal regrese rápidamente a la línea base. Nota: El procedimiento FBR se recomienda para el análisis de mercurio.

Temperatura de las
cubetas / velocidad de
bombeo

Opción	Descripción
TEMP. DE CUBETA [°C]	No para la técnica HydrEA Para los generadores de hidruro As, Se, Sn, Sb, Te y Bi se puede seleccionar una temperatura para la cubeta de entre 600 y 950°C. Para Hg se puede seleccionar una temperatura ambiente de <60°C o si no 150°C. El calentamiento de la cubeta a la temperatura seleccionada, se lleva a cabo al iniciar el proceso de análisis o se puede iniciar manualmente en la ventana SISTEMA DE HIDRURO.

ETAPA VEL. DE BOMBEO	Existen 4 velocidades (1-4) para transportar la muestra (con funcionamiento continuo) y seleccionar los componentes. Así, en el funcionamiento continuo se determinará el tiempo de reacción junto con la cantidad de muestra introducida.
-------------------------	---

Lavado de sistema

Se puede establecer, de modo opcional, un lavado del sistema después de cada medición.

DESPUÉS DE CADA MUESTRA	Lavado del sistema después de cada medición de muestras.
	OFF el sistema no se lava.
	LAVADO CON ACIDO Después de cada muestra se realiza un lavado con ácido diluido. El tiempo se establece en TIEMPO DE LAVADO ACIDO. A la mitad del tiempo de lavado, la ruta cambia de las muestras al reactor.
	LAVADO CON AGENTE RED./ACIDO Se recomienda este proceso de lavado para sistemas muy contaminados (muestras con una alta concentración del elemento). A continuación se lleva a cabo un lavado con agente reductor a través de TIEMPO DE LAVADO AGENTE RED. Después el tiempo de espera (TIEMPO DE ACTUACION) sirve para que el agente reductor produzca su efecto en los depósitos de las paredes de la manguera. Para terminar, se aclara con ácido diluido (TIEMPO DE LAVADO ACIDO).
DURANTE ACCIÓN	En Funciones especiales se establece el lavado del sistema como acción en la secuencia (→ "Especificar secuencias de muestras y acciones" p. 62). Este paso adicional se puede añadir después de muestras con una alta concentración del elemento.
	LAVADO CON ACIDO Como en la opción DESPUES DE CADA MUESTRA
	LAVADO CON AGENTE RED./ACIDO Como en la opción DESPUES DE CADA MUESTRA
POS. AGENTE RED.	Posición del agente reductor en el plato de muestras.
[TIEMPO DE LAVADO]	Abre una ventana con los tres tiempos de lavado: TIEMPO DE LAVADO AGENTE RED., TIEMPO DE ACTUACION, TIEMPO DE LAVADO ACIDO. Ajuste los tiempos dependiendo de las opciones de lavado configuradas.

Tiempos de operación

Los tiempos de operación se pueden ajustar según el tipo de funcionamiento seleccionado. Todos los tiempos de operación se muestran en segundos.

Opción	Descripción
TIEMPO DE CARGA	Tiempo en el que la bomba llena la manguera con muestra antes del segundo grupo de válvulas. Este tiempo sólo se necesita para la primera medición de una muestra nueva.
TIEMPO DE PRELAVADO	Solo modo Batch Tiempo de lavado del recipiente con argón antes de la reacción (con generadores de hidruro) El tiempo de prelavado se utiliza para agotar el aire y así evitar una reacción de oxihidrógeno en la siguiente reacción.

TIEMPO DE REACCIÓN	Solo en modo continuo Tiempo en el que la bomba bombea muestra en el reactor. Es el parámetro decisivo para la cantidad de muestra introducida y la sensibilidad de la medición.
TIEMPO DE BOMBEO	Solo modo Batch Tiempo en el que se bombea agente reductor en el recipiente para provocar una reacción.
TIEMPO DE ESPERA AZ	Tiempo antes del equilibrio de las líneas base (AZ = Auto Zero, equilibrio a cero)
TIEMPOS DE LAVADO 1-3	Tiempos en los que se transporta el gas de reacción con el flujo de argón. Los recorridos de transporte varían en las diferentes fases para distintos tipos de funcionamiento. Los recorridos de transporte se pueden representar gráficamente.
TIEMPO DE CALENTAMIENTO COLECTOR	Tiempo en el que funciona el calentamiento del colector para liberar el Hg enriquecido.
TIEMPO DE REFRIGERACIÓN COLECTOR	Tiempo en el que funciona la ventilación del colector para enfriar el colector para el nuevo enriquecimiento.
FLUJO DE GAS	Establecer el flujo de argón que fluye en las fases siguientes. Es válido hasta que se pueda indicar un nuevo flujo de gas. El flujo de gas se puede modificar con distinta frecuencia para los distintos tipos de funcionamiento. Los recorridos de gas para las distintas fases del proceso de análisis se pueden tomar de la representación gráfica del proceso de análisis en el sistema de hidruro (→ "Representar gráficamente procesos de análisis del sistema de hidruro" p. 29). Los flujos de gas se pueden seleccionar en 3 niveles de 6 y 31 L/h.

Parámetros de Batch

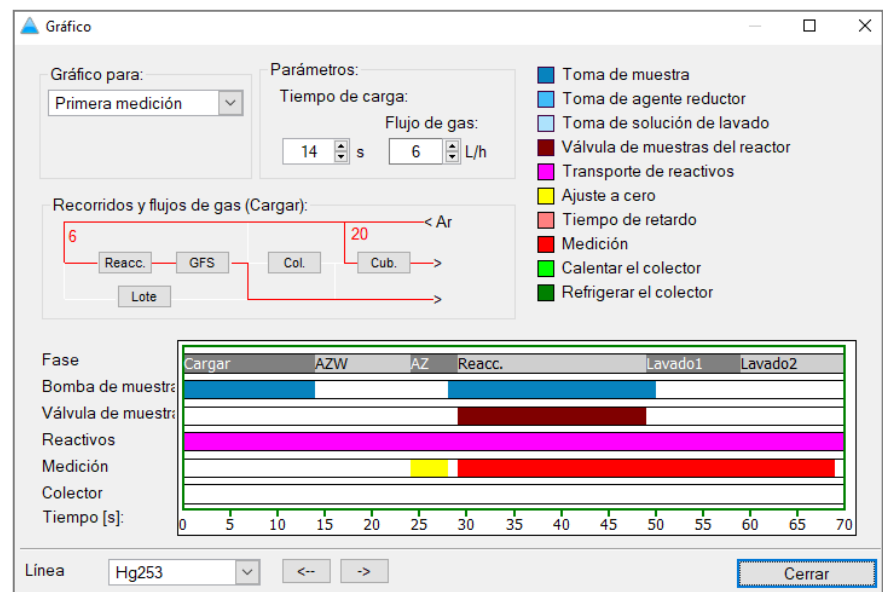
Opción	Descripción
VOLUMEN DE MUESTRA	Indicar el volumen de la muestra que se introduce en el recipiente en mL.
CICLOS DE ENRIQUECIMIENTO	Para el funcionamiento Batch con enriquecimiento de Hg en el colector Indicar el número de recipientes cuyo contenido se va a enriquecer.

Botón [GRAFICO]

Con [GRAFICO] se abre la representación gráfica de los recorridos de gas para las distintas fases del proceso de análisis.

Representar gráficamente procesos de análisis del sistema de hidruro

En la ventana METODO/HIDRURO, abra con [GRAFICO] la ventana del mismo nombre. En esta ventana se mostrará gráficamente el proceso de análisis programado.



Ventana HIDRURO/GRÁFICO con representación del proceso de análisis en el sistema de hidruro

Las distintas fases del proceso de análisis se representan en colores en el gráfico de proceso. Al hacer clic en una fase determinada, representada por una superficie en color, se muestran los parámetros correspondientes en el área PARAMETROS y el flujo de gas establecido en el área RECORRIDOS Y FLUJOS DE GAS. El proceso se determina a través de la selección del tipo de funcionamiento en la pestaña HIDRURO.

Opción	Descripción
GRÁFICO PARA	Si se activa una estadística de muestras, se pueden representar los distintos procesos para la primera, siguiente y última medición.
RECORRIDOS Y FLUJOS DE GAS	En el diagrama de flujo se mostrarán los recorridos de gas del sistema de hidruro. Los módulos REACT. (reactor), GFS (separador de gas y líquido), COL. (colector de oro), BATCH (módulo Batch) y CUB. (cubeta) u horno se representan con sus mangueras de conexión (para argón y gas de reacción). Haga clic en la fase del gráfico de proceso en la que desee ver el flujo de gas. El recorrido de gas aparecerá marcado en rojo y el flujo de argón se mostrará numéricamente en L/h.
PARÁMETROS	Mostrar y cambiar los tiempos de operación, los de medición y, dado el caso, los flujos de gas correspondientes de una fase seleccionada. Haga clic en la fase correspondiente. El nombre y el valor numérico del tiempo de medición o de operación o del flujo de gas se mostrarán y pueden modificarse. El gráfico de proceso se ajustará a los parámetros modificados.
LÍNEA	Modificar los datos de las líneas mostradas.

3.2.5 Configurar el cargador de muestras – PESTAÑA ALIMENTACION DE MUESTRAS

3.2.5.1 Cargador de muestras para técnica de llama e hidruro/HydrEA

En la técnica de llama están disponibles los cargadores de muestras AS 52s y AS-FD con función de dilución y AS 51s y AS-F sin función de dilución. Opcionalmente también es posible introducir las muestras manualmente en el sistema quemador-pulverizador. Tanto en el modo de funcionamiento automático como en el manual se puede utilizar opcionalmente el interruptor de inyección. El inyector de hidruro HS 50 se configura también en la pestaña ALIMENTACION DE MUESTRAS.

Ventana METODO / PESTAÑA ALIMENTACION DE MUESTRAS con cargador de muestras activo para la técnica de llama

Defina los siguientes parámetros para el cargador de muestras en la ventana METODO / ALIMENTACION DE MUESTRAS:

- Conexión de un cargador de muestras
- Modos de lavado y control de limpieza
- Disoluciones automáticas durante el análisis
- Utilización del módulo de inyección SFS 6 o del inyector de hidruro HS 50

Utilizar accesorios

Opción	Descripción
AUTOMUESTREADOR	Utilizar el cargador de muestras conectado e iniciado. Si está desactivado, la muestra se introduce manualmente sin cargador de muestras.

INTERRUPTOR DE INYECCIÓN	El módulo de inyección SFS 6 se puede utilizar con un cargador de muestras o manualmente. Permite, por un lado, que se aspire la solución portadora o de lavado continuamente y que el quemador se mantenga a temperatura constante a través del aerosol, y por otro, que se puedan medir pequeñas cantidades de modo reproducible. El módulo de inyección se puede utilizar también para el tratamiento de señales constantes del tiempo (integración promedio). TIEMPO DE INYECCION: el tiempo en el que la válvula del SFS 6 abre el recorrido de la muestra para pulverizarla y transportar el aerosol al quemador. Este tiempo depende de la concentración esperada más alta. Valores típicos: 0,5... 2,0 s TIEMPO DE CARGA: el tiempo que se necesita para rellenar con una nueva muestra el recorrido de aspiración de la muestra entre la muestra y el módulo de inyección.
INYECTOR DE HIDRURO HS 50	El inyector de hidruro HS 50 es un sistema neumático Batch para el funcionamiento manual. Está compuesto por un equipo Batch y un soporte de cubetas con cubeta de cuarzo. La solución de agente reductor se transporta neumáticamente de la botella de suministro al recipiente de reacción. La cubeta de cuarzo se calienta con la llama. El HS 50 es programado de manera sencilla con control de tiempo por el software AAS. Funciona con integración de alturas y superficies pico. El proceso de medición se divide en los siguientes pasos: Prelavado – Equilibrio a cero – Reacción/Integración. TIEMPO DE REACCION Ajustar tiempo de reacción. Durante el tiempo de reacción se transporta el agente reactor al recipiente reactor. Cuando comienza el tiempo de reacción, empieza de forma simultánea el registro de valores de medición. El tiempo de reacción tiene que ser suficiente para que se pueda registrar toda la señal en el periodo. TIEMPO DE PRELAVADO Ajustar el tiempo de prelavado. Durante el tiempo de prelavado se lavará el recipiente reactor para eliminar el aire. El prelavado se suprime en la determinación de Hg porque el flujo de argón agota el Hg de la muestra. VOLUMEN DE MUESTRA Ajustar el volumen de la muestra.
TIEMPO DE RETARDO	Tiempo que se necesita para transportar la muestra a la unidad de atomización (p. ej., cámara de llama o de reacción en el sistema de hidruro). El tiempo se determina principalmente por la longitud de la manguera de la muestra. Cuando termina el tiempo de retardo comienza la medición de la señal.
POSICION DE LA SOLUCION DE REFERENCIA	Solo para técnica de llama Definir la posición de la solución de referencia en el plato de muestras.

Diluir de forma automática con un cargador de muestras

Con cargadores de muestras con función de dilución se puede ejecutar una dilución automática de la muestra. Configure en el método parámetros generales para la dilución (MODO DE DILUCION y NIVEL DE LLENADO EN EL RECIPIENTE DE MEZCLA). Los distintos factores de dilución para cada muestra se definen en la ventana ID DE MUESTRAS (→ "Elementos de la ventana ID de muestras" p. 66).

Después podrá activar los parámetros para la DILUCION EN CASO DE EXCESO DE CONCENTRACION automática. Si la concentración supera el rango de medición fijado por la curva de calibración en más de un 10 %, la muestra se diluirá. la dilución se lleva a cabo en el recipiente de mezcla. Los volúmenes se calculan con el programa dependiendo del valor de absorbancia de la solución no diluida. El volumen de analito calculado se pasa al recipiente de mezcla y se llena el recipiente hasta el nivel indicado con solución para dilución. La solución de dilución se toma de la botella de suministro como diluyente

Parámetros para la dilución:

Lista / Opción	Descripción	
DILUCION EN CASO DE EXCESO DE CONCENTRACION	NINGUNA	No se ejecutará la dilución automática en caso de exceso de concentración.
	EN EL RECIPIENTE DE MEZCLA	Cuando está activado, la dilución con exceso de concentración se realizará como se ha descrito anteriormente.
NIVEL DEL RECIPIENTE DE MEZCLA	Nivel al que se tiene que llenar el recipiente de mezcla con solución de dilución.	

Especificación de fases de lavado

Durante el desarrollo de una secuencia de medición, puede establecer fases de lavado para limpiar los recorridos de la muestra en el equipo y en los accesorios.

Opción	Descripción	
LAVADO	OFF	El lavado está desactivado. No se lavará de forma automática.
	DESPUES DE CADA MUESTRA	Lavado después de cada muestra, pero no dentro de una serie estadística.
TIEMPO DE LAVADO	Tiempo en el que se aspira medio de lavado del recipiente de lavado. De este modo se limpian el recorrido de las mangueras y el sistema pulverizador del quemador.	
CICLOS	Número de ciclos de lavado para el recipiente de mezcla	
RECIPIENTE DE MEZCLA	En un ciclo de lavado, el recipiente de mezcla se llena con líquido de lavado o diluyente y se vuelve a vaciar.	

Limpieza controlada

Al analizar muestras que producen un exceso de más del 10 % del área de trabajo de la curva de calibración, se puede, dependiendo de la técnica, limpiar el sistema de pulverizador del quemador (técnica de llama) o el sistema de hidruro para eliminar contaminaciones de la medición precedente. Durante el lavado, se medirá la absorbancia o emisión para controlar el resultado de la limpieza.

Se recomienda el control de limpieza automático después de medir muestras de alta concentración, especialmente con el modo DILUCION CON EXCESO DE CONCENTRACION activado.

Botón/Campo	Descripción
CONTROL DE LIMPIEZA	Cuando se activa, se lleva a cabo automáticamente una limpieza controlada con los excesos de concentración.
LÍMITE DE CONTROL	El valor al que tiene que volver el valor de la señal durante el lavado, antes de que se midan las muestras diluidas o con escasa concentración.

i Nota

También se puede establecer un control de limpieza en la secuencia aunque no haya un exceso de concentración.

Proceso de lavado del cargador de muestras

Para lavar el recorrido de aspiración de la muestra y el sistema de pulverizador del quemador, el brazo del automuestreador se introduce con la cánula en el recipiente de lavado del cargador de muestras. Una bomba de membrana proporciona el líquido de limpieza de la botella de suministro para el momento de la inmersión. La tasa de bombeo es mayor que la de aspiración del pulverizador o la de bombeo del sistema de hidruro. Todo el recorrido de la muestra es lavado (cánula, manguera de muestras, inyector de muestra SFS6 y el sistema de pulverizador del quemador). El líquido de limpieza que sobra fluye hasta la botella de desechos.

Al lavar el recipiente de mezcla del AS 52s y del AS-FD, se llena el recipiente de mezcla con líquido de lavado o diluyente en un ciclo de lavado y se vuelve a vaciar.

Parámetros profundidad de inmersión y velocidad de dosificación

Los parámetros del cargador de muestras relativos a la profundidad de inmersión en los distintos recipientes y la velocidad de dosificación se configuran en la ventana CARGADOR DE MUESTRAS (→ "Parámetros técnicos del cargador de muestras" p. 142). La ventana CARGADOR DE MUESTRAS se puede abrir en esta pestaña con el botón [PARAMETROS TECNICOS].

3.2.5.2 Cargador de muestras para la técnica de tubo de grafito (analítica de soluciones)

El tubo de grafito es alimentado por medio del cargador de muestras MPE 60, MPE 60/2 o AS-GF.

Ventana METODO / ALIMENTACION DE MUESTRAS con configuración para el AS-GF

Defina los siguientes parámetros para dichos cargadores de muestras en la ventana METODO / ALIMENTACION DE MUESTRAS:

- Conexión de un cargador de muestras
- Modos de lavado
- Disoluciones automáticas durante el análisis

La opción CARGADOR DE MUESTRAS debe estar siempre activada cuando se usa la técnica de tubo de grafito para analítica de soluciones.

Diluir de forma automática con un cargador de muestras

En conexión con la MPE 60, se puede llevar a cabo una dilución automática de muestras. Los distintos factores de dilución para cada muestra se definen en la ventana ID DE MUESTRAS. (→ "Elementos de la ventana ID de muestras" p. 66). Configure en el método parámetros generales para la dilución (modo y posición del diluyente).

También puede especificar los parámetros para la dilución automática en caso de exceso de concentración. Así, si la concentración supera el rango de medición fijado por la curva de calibración en más de un 10%, la muestra se diluirá. El máximo factor de dilución alcanzable está limitado por el volumen de inyección mínimo exacto a dosificar de 2 µl.

La dilución en el recipiente de mezcla como se describe para el AS 52s/AD-FD solo es posible con la MPE 60 (→ "Cargador de muestras para técnica de llama e hidruro/HydrEA" p. 31). Con el MPE 60/2 y el AS-GF se realiza una reducción de analito directamente en el tubo de grafito. Adicionalmente pueden utilizarse recipientes de muestras sin usar para la DILUCION EN CASO DE EXCESO DE CONCENTRACION.

Opciones para la de dilución en caso de exceso de concentración:

Opción	Descripción
NINGUNA	La muestra no se diluye.
EN EL TUBO DE GRAFITO	El volumen de muestra se reduce dependiendo del factor de dilución y se introduce en el tubo de grafito. El resto del volumen de la muestra original se completa con el líquido de dilución.
MEDIANTE REDUCCIÓN DE VOLUMEN	El volumen de muestra se reduce dependiendo del factor de dilución y se introduce en el tubo de grafito. El resto del volumen de la muestra original no se completa.
EN EL RECIPIENTE DE MEZCLA	Solo para MPE 60 La dilución se lleva a cabo en el recipiente de mezcla. El volumen se llena siempre con 500 µL.
EN RECIPIENTES DE MUESTRAS	La dilución se lleva a cabo en recipientes de muestras sin usar, cuya cantidad y posición de inicio en el plato se selecciona en CANT. RECIPIENTES DE MUESTRAS. El volumen de relleno se define en NIVEL DE LLENADO EN POSICIONES DE MEZCLA. Las posiciones utilizadas deben ser restablecidas después de sustituir los recipientes de muestras para seguir siendo usadas en la ventana CARGADOR DE MUESTRAS / PARAMETROS TECNICOS mediante la opción VACIAR RECIPIENTES DE MEZCLA (→ "Parámetros técnicos del cargador de muestras" p. 152).
POSICIÓN DILUYENTE	Posición del diluyente en el plato de muestras.

Especificación de fases de lavado

Durante el desarrollo de una secuencia de medición, puede establecer fases de lavado para limpiar los recorridos de la muestra en los accesorios.

Opción	Descripción
LAVADO	OFF El lavado está desactivado. No se lavará de forma automática. DESPUES DE CADA MEDICION Lavado después de cada serie estadística DESPUES DE CADA COMPONENTE Después de la introducción de cada componente (modificador, estándar, muestra, etc.) en el tubo de grafito, se lava el cargador de muestras.
CICLOS DE LAVADO	Número de ciclos de lavado en cada ocasión: de 1 a 5.
CICLOS	Sólo para MPE 60
RECIPIENTE DE MEZCLA	Número de ciclos de lavado para el recipiente de mezcla En un ciclo de lavado, el recipiente de mezcla se llena con líquido de lavado o diluyente y se vuelve a vaciar.

Limpieza controlada

Al analizar muestras que producen un exceso de más del 10 % del área de trabajo de la curva de calibración, se puede calcinar el tubo de grafito para eliminar contaminaciones de la medición precedente. Durante la limpieza se medirá la absorbancia para controlar el resultado de la limpieza.

Se recomienda el control de limpieza automático después de medir muestras de alta concentración, especialmente con el modo DILUCION CON EXCESO DE CONCENTRACION activado.

Opción	Descripción
CONTROL DE LIMPIEZA EN CASO DE EXCESO DE CONC.	Cuando se activa, se lleva a cabo automáticamente una limpieza controlada con los excesos de concentración.
LÍMITE DE CONTROL	El valor al que tiene que volver el valor de la señal durante la limpieza, antes de que se midan las muestras diluidas o con escasa concentración.

 Nota

También se puede establecer un control de limpieza en la secuencia aunque no haya un exceso de concentración.

Advertencia sobre el proceso de lavado con MPE 60/AS-FG

Después de aspirar las muestras u otras sustancias líquidas, la manguera de dosificación se limpia automáticamente con el líquido de lavado de la botella de suministro (agua desionizada, acidulada ligeramente con 0,1 N HNO₃). Para ello, el líquido de lavado es bombeado desde la botella de suministro a través de la manguera de dosificación y depositado en el recipiente de lavado del cargador de muestras.

Parámetros profundidad de inmersión y velocidad de dosificación

Los parámetros del cargador de muestras relativos a la profundidad de inmersión en los distintos recipientes y la velocidad de dosificación se configuran en la ventana CARGADOR DE MUESTRAS (→ "Parámetros técnicos del cargador de muestras" p. 152). La ventana CARGADOR DE MUESTRAS se puede abrir en esta pestaña con el botón [PARAMETROS TECNICOS].

3.2.5.3 Cargador de muestras para la técnica de tubo de grafito (analítica de sólidos)

Para la analítica de sólidos están disponibles el cargador de muestras automático SSA 600 con y sin dosificación líquida y el cargador manual SSA 6(z).

Defina los siguientes parámetros para la analítica de sólidos en la ventana METODO / ALIMENTACION DE MUESTRAS:

- El uso de un cargador de muestras SSA 600 o SSA 6
- Tipo de funcionamiento / transcurso del análisis
- Modificaciones del cargador de muestras

Ventana METODO / ALIMENTACION DE MUESTRAS con configuración para el SSA 600

Automuestreador

Opción	Descripción
SSA6/SSA6Z FUNCIONAMIENTO MANUAL	Utilizar un cargador de muestras manual SSA 6z.
SSA 600	Utilizar un cargador de muestras sólidas SSA 600 automático.
SSA 600 CON DOSIFICADOR DE LIQUIDOS AUTOMATICO	Utilizar un cargador de muestras sólidas automático SSA 600 con dosificación automática integrada para componentes líquidos (estándares o modificadores).

El cargador de muestras manual SSA 6 z no requiere ninguna especificación adicional en relación con la alimentación de muestras. Las muestras deben pesarse por separado y los pesajes se deben introducir en la ventana de resultados en la pestaña SOLIDO.

Defina en esta ventana el proceso de alimentación de las muestras para el cargador de muestras SSA 600.

Opción	Descripción
TIPO DE FUNCIONAMIENTO	FUNCIONAMIENTO DE 1 PLATAFORMA El análisis se realiza solo con una única plataforma, que se rellena cada vez. La plataforma se encuentra en la posición del plato 1. Durante el desarrollo del análisis, se realizan todas las fases necesarias (tarar, dosificar, pesar, dosificar líquidos) con esta plataforma. FUNCIONAMIENTO BATCH Durante el análisis se trabaja con diversas plataformas. El análisis se puede automatizar dependiendo de la configuración. BATCH (POSICION ESP. 42) Durante el análisis se trabaja con diversas plataformas. El análisis se puede automatizar dependiendo de la configuración. Para muestras que no requieren que se las pese, p. ej., equilibrio a cero o estándares líquidos, se utilizará la posición 42 en el plato de muestras. Para ello tiene que haber una plataforma vacía en la que se pueda pipetear la muestra si fuera necesario. NUMERO DE PLATAFORMAS Para Funcionamiento Batch y Batch (Posición esp. 42) Definir el número de plataformas utilizadas y el número de posiciones de muestra disponibles.
PROCESO PARA MUESTRAS SENSIBLES AL TIEMPO	Controla el comportamiento del cargador de muestras en la preparación de las muestras y la dosificación. Si está activado, las plataformas son alimentadas con muestras solo inmediatamente antes de la medición. Con ello se evita que las muestras se volaticen tras largos periodos de permanencia en el plato de muestras o se "escurran" sobre la plataforma debido a la alta adhesión, como sucede con los aceites, por ejemplo. Este modo requiere la presencia permanente del usuario. Si se desactiva, todas las plataformas disponibles son preparadas antes del inicio de la medición. Todas las acciones que requieren la presencia del usuario (introducción de muestras o pipeteo manual de modificadores) se ejecutan de manera agrupada. En este modo, el dispositivo EAA puede hacer la medición sin la presencia permanente del usuario.
VELOCIDAD	La velocidad de los movimientos del SSA600 se puede ajustar en tres niveles. Niveles recomendados: 2
PLATO DE MUESTRAS	Número de los platos colocados

REGISTRO DE LA MASA DE LAS MUESTRAS	PESAR	Después de pesar la sustancia sólida dosificada, el peso se registra automáticamente.
	PESAR CON CONFIRMACION	Después de pesar cada sustancia sólida, se mostrará el resultado de la pesada. El usuario puede confirmar con la tecla verde (tecla en el cargador de muestras u [OK] en la ventana de pesaje en la pantalla) que está conforme con el pesaje. Si presiona la tecla naranja (tecla en el cargador de muestras o [REPETIR] en la ventana de pesaje en la pantalla), la plataforma volverá a la posición de dosificación, modificará la dosificación y volverá a pesar al final.
	SIN PESAR (Medición cualitativa)	Con este modo no se pueden realizar mediciones de concentración. Sirve solamente para análisis cualitativos de muestras sólidas.
LUGAR DE EMPLAZAMIENTO	Determinar dependiendo de los factores de interferencia (en especial, sacudidas) que afectan la precisión de la microbáscula integrada. Si el tiempo de la pesada es demasiado largo, se puede acortar cambiando la orientación del lugar de emplazamiento, en detrimento de la precisión. Los siguientes ajustes son posibles: MUY AGITADO AGITADO CALMADO MUY CALMADO	
CONTROL DE LIMPIEZA	Cuando se activa, se lleva a cabo automáticamente una limpieza controlada con los excesos de concentración. Al analizar muestras que producen un exceso de más del 10% del área de trabajo de la curva de calibración, se calcina el tubo de grafito y la plataforma de muestras para eliminar contaminaciones de la medición precedente. Durante la limpieza se mide la absorbancia. Si se alcanza el límite de control, finaliza la limpieza. Nota: También se puede establecer un control de limpieza en la secuencia aunque no haya un exceso de concentración.	
LÍMITE DE CONTROL	Valor de absorbancia al que tiene que volver el valor de la señal durante la limpieza, antes de que se mida la siguiente muestra.	

3.2.6 Pestaña EVALUACION: rango espectral y correcciones de fondo

Los parámetros de análisis específicos para cada línea para determinar los resultados de medición del espectro se establecen en la pestaña METODO / EVALUACION.

Método

Lineas

Llama

Alimentación de muestras

Evaluación

Calib.

Estadística

QCS

QCC

Salida

Núm.	Línea	Rango espectr	Eval. píxeles	Corrección de fondo	Estruct. perm.	Adaptación	Pos. de píxel
1	Cu324	200	3 Píxel	con referencia	off	dinámico	90,112
2	Al396	200	3 Píxel	IBC	off		
3	Cd228	200	3 Píxel	IBC	off		

↑

↓

↓

inc.

Correcciones espectrales

(ninguno)

Debilitación de señal...

(ninguno)

Abrir...

Guardar...

OK

Adoptar

Cancelar

Ventana MÉTODO / EVALUACIÓN

Columna	Descripción
LÍNEA	Nombre de la línea de elemento
NIVELACIÓN DE SEÑAL	no aplica para la técnica de llama APAGADA Las señales no serán niveladas DEBIL Nivelación suave de las señales, p. ej., supresión del ruido FUERTE Nivelación fuerte de las señales
RANGO ESPECTRAL	Número de píxeles para medir un espectro (máx. 200) Solo se leerá y guardará el número de píxeles indicado de la línea CCD. De este modo se puede optimizar el tiempo de cálculo de la evaluación y el volumen de datos guardado.

EVAL. PÍXELES	1-19 PÍXELES	Número de píxeles que se utilizan para la evaluación de la señal de absorción y de los que surgen después los valores de medición. Las absorbancias de los píxeles de evaluación se suman. De este modo se pueden eliminar las imprecisiones del análisis producidas por la posición del pico entre dos píxeles. Por esto, en el resultado podría aparecer, en teoría, también una absorbancia máx. de 9 como resultado de medición. Número de píxeles recomendado: 3
	ALTURA	Interpolación del valor pico
	DEF. POR USUARIO	Libre selección del píxel de evaluación, p. ej., para la evaluación de multipletes. Ejemplo de entrada: 50,120-130 conforma la suma sobre los valores de medición de los píxeles 50 y 120 hasta 130.
CORRECCIÓN DE FONDO	SIN REFERENCIA:	la corrección de fondo no requiere ningún espectro de referencia.
	CON REFERENCIA:	la corrección de fondo requiere un espectro de referencia en la secuencia.
	IBC:	corrección iterativa de las líneas base. Esta corrección de fondo requiere un espectro de referencia en la secuencia.
	IBC-M:	corrección iterativa de las líneas base para estructuras de banda ancha (absorciones moleculares). Esta corrección de fondo requiere un espectro de referencia en la secuencia.
	Ver también → "Utilización de espectros de corrección en ASpect CS" p. 205.	
ESTRUCT. PERM.	Eliminar estructuras permanentes El proceso requiere un espectro de referencia. Las estructuras permanentes son bandas que pueden estar presentes con una intensidad diferente en el espectro de muestras y en el de referencia, pero no se pueden originar a través del elemento a analizar. La mayoría de las veces, estas estructuras se originan a través de oscilaciones moleculares, p. ej. con la llama de óxido nitroso. OFF: no realizar la corrección de estructuras permanentes. ON: corregir estructuras permanentes.	
ADAPTACIÓN	Determinar píxeles para la corrección de fondo (→ "Descripción de los algoritmos utilizados para la corrección de fondo espectral" p. 203). DINAMICO: el software localiza los píxeles para la corrección de fondo de modo automático. ESTATICO: el usuario indica los píxeles para la corrección de fondo en la columna POS. DE PÍXEL.	
POS. DE PÍXEL	Indica la posición de los píxeles en ADAPTACION ESTATICA de la corrección de fondo. Introduzca el número de píxeles para la corrección de fondo. En el renglón de estado se mostrará una indicación a modo de ejemplo.	

Botón [CORRECCIONES ESPECTRALES]

Se muestra la ventana CORRECCIONES ESPECTRALES. Se pueden elegir modelos de corrección existentes o crear nuevos modelos (→ "Utilización de espectros de corrección en ASpect CS").



Nota

En la visualización de los espectros lineales, se pueden seleccionar píxeles con la representación gráfica para la corrección de fondo y se pueden añadir al método.

Botón [INTEGRACION DE SEÑAL]

Solo disponible para técnica de llama.

Aparece la ventana INTEGRACION DE SEÑAL. El rango de integración de las señales transitorias para valoración de superficies puede limitarse al rango entre DE y HASTA. Esto es conveniente, sobre todo, para la valoración multilínea simultánea; en otros casos, el rango debería limitarse al hacer la medición, p. ej., mediante la elección de un tiempo de medición adecuado. Los límites para la integración de señales también pueden definirse en la ventana VALORES INDIVIDUALES DE MUESTRAS en el gráfico de espectros (→ "Mostrar detalles de los valores individuales de las muestras" p. 84).

Con [REINICIAR] se fija todo el tiempo de medición en el rango de las líneas marcadas. Si no se ha marcado ninguna línea, se reinicializarán los límites de integración de todas las líneas.

Botón [ATENUACION DE SEÑAL]

Aparece la ventana ATENUACION DE SEÑAL. Mediante la selección de un NIVEL para la atenuación de la señal se toma en cuenta solo una superficie de pico parcial del pico espectral para el cálculo de la señal. De esta manera se puede ampliar el rango de trabajo de la calibración (calibración de rango amplio). Los píxeles marginales utilizados para la valoración se muestran en la columna PÍXELES DE EVALUACION

Ejemplo: Al seleccionarse el NIVEL intermedio, se toman en cuenta dos píxeles a una distancia de tres píxeles del píxel de medición para la formación del valor de medición.

3.2.7 Pestaña CALIB.: parámetros de calibración

La selección de los parámetros de calibración (estándares y su creación) y las correcciones de valor blanco se realiza en la pestaña METODO / CALIB.

Se puede utilizar un máximo de 65 estándares en una calibración.

Método

Líneas Llama Alimentación de muestras Evaluación **Calib.** Estadística QCS QCC Salida

Procedimiento de calibración
 Procedimiento estándar

Fabricación estándar
 mezclado por el cargador de m

Volúmenes
 Cantidad [mL]: 5
 de esa muestra [ml] 2.5

Corrección del blanco
 a base de absorbancia

Núm.	Línea	Función de calib.	Intersección de eje	Ponderación	Comprobación	Unidad
1	Cu324	lineal	Calcular	ninguno	ninguno	mg/L
2	Al396	lineal	Calcular	ninguno	ninguno	mg/L
3	Cd228	lineal	Calcular	ninguno	ninguno	mg/L

Solución patrón... Concentraciones...

Abbr... Guardar... OK Adoptar Cancelar

Ventana METODO / CALIB.: selección de la calibración y el ajuste específico para cada línea

Parámetros de calibración universales

Selección del procedimiento de calibración

Opción	Descripción
NINGUNA CALIBRACIÓN	Los resultados de la muestra se mostrarán exclusivamente como absorbancia o emisión. No se requiere una calibración para estas mediciones.
PROCEDIMIENTO ESTÁNDAR	La calibración se lleva a cabo con muestras de concentración conocida. Las muestras de concentración desconocida se medirán en base a esta calibración.
PROCEDIMIENTO POR ADICIÓN DE ESTÁNDARES	No aplicable a la técnica de sólidos. La muestra desconocida se aumentará con distintas cantidades de una muestra conocida y se medirá. Como resultado de una compensación se produce la concentración de la muestra desconocida.
CALIBRACIÓN POR ADICIÓN	No aplicable a la técnica de sólidos. La curva de calibración con la que se pueden determinar otras concentraciones se crea a través de la adición estándar. Simultáneamente se calcula con ella la concentración de la primera muestra. Después, se desplaza una curva de calibración de forma paralela, de tal manera que pasa por el origen de coordenadas. Todas las demás muestras se analizan con la calibración corregida.

Creación del estándar

Procedimiento	Descripción
FABRICADO MANUALMENTE	Las soluciones de referencia son elaboradas por el usuario.

MEZCLADO POR EL CARGADOR DE MUESTRAS	Solo con el cargador de muestras AS52s o AS-FD Las soluciones de referencia se crean en el recipiente de mezcla del cargador a través de la mezcla de distintos porcentajes de diluyentes y soluciones patrón. En este caso, para la creación de soluciones de referencia, indique lo siguiente en VOLUMENES: CANTIDAD indique el volumen total de inyección en el recipiente de mezcla (rango de valores: 1-20 mL). DE ELLO, CANTIDAD DE MUESTRA (solo en procesos por adición) El volumen de muestra proporcional (intervalo: 0,5 mL). En los procesos por adición, el porcentaje de la solución de muestra de una serie de medición siempre es el mismo. El porcentaje de la solución tiene que ser menor que el volumen total de inyección. El volumen diferencial se completará con solución patrón y diluyente. La proporción cantidad de muestra/cantidad total es el factor de corrección para la concentración a determinar.
MEDIANTE ESCALONAMIENTO DE VOLUMEN:	Sólo en la técnica de tubo de grafito Se tomarán distintos volúmenes de la solución patrón o distintas cantidades de la muestra de referencia para la atomización y así se logrará un escalonamiento de la concentración (en base al volumen y peso de las muestras).
MEDIANTE DILUCIÓN:	Sólo en la técnica de tubo de grafito Se tomarán volúmenes definidos de la solución patrón y el volumen del diluyente que falta para el volumen de la muestra en una fase de introducción, produciendo así un escalonamiento de la concentración (en base al volumen de las muestras).

Correcciones del valor del blanco

Sólo con procedimiento por adición estándar y calibración por adición.

Tipo de corrección	Descripción
A BASE DE ABSORBANCIA	Con cada adición estándar se medirá el blanco, y el valor de absorbancia medido antes del cálculo de las rectas de compensación se sustraerá de todos los valores de medición. Este procedimiento ha sido el habitual durante un largo periodo de tiempo, pero da lugar en muchas muestras reales a resultados erróneos.
A BASE DE CONCENTRACIÓN	Con la solución del valor blanco se realizará a continuación una adición estándar propia con las mismas adiciones de concentración que en la muestra. La concentración calculada se sustraerá automáticamente del resto de las concentraciones determinadas por adición estándar.

Parámetros de calibración
específicos para cada línea
de elemento

Función de calibración (sólo en procedimientos estándar)

Opción	Descripción
LINEAL	Linealidad de la función de calibración. El procedimiento por adición estándar y la calibración por adición sólo se pueden aplicar para la linealidad de las curvas. $y = ax + b$
RATIO NO LINEAL.	No linealidad de la función de calibración descrita por una función racional fraccionada $y = \frac{a+bx}{1+cx}$
NO LINEAL CUAD.	No linealidad de la función de calibración descrita por una función cuadrática $y = ax^2 + bx + c$
AUTOMÁTICO	Para la calibración se calcula una función lineal y una no lineal en cada caso. Las sumas de los residuos cuadrados se comparan (test de Mandel). Si la suma para la función no lineal es significativamente más pequeña que aquella de la función lineal, se seleccionará la no linealidad de la curva, en caso contrario, se seleccionará la linealidad de la curva de calibración. El tipo de función no lineal usado se selecciona en la ventana OPCIONES / CALIBRACION (→ "Opciones de calibración" p. 185). Como configuración estándar está prevista aquí la función racional fraccionada.

Nota

En procedimientos por adición estándar y calibraciones por adición se utilizará siempre la función de calibración lineal.

Intersección de los ejes

Opción	Descripción
PONER A CERO	La curva de calibración se establece exactamente a través del punto de valor cero medido.
CALCULAR	El valor cero se incluirá como cualquier otro punto de la calibración en el cálculo.

Ponderación del punto de calibración

Opción	Descripción
NINGUNO	Considerar todos los puntos de calibración por igual.
1/CONC.	Tener más en cuenta puntos de calibración con pequeñas concentraciones.
1/SD	Tener más en cuenta puntos con pequeñas desviaciones dentro de las mediciones de un estándar repetidas varias veces (requisito: activar estadística promedio).
1/(SD*CONC.)	Combinación de los procedimientos de cálculo 1/CONC. y 1/SD.

Comprobación de la curva de calibración

ASpect CS permite una comprobación automática de las curvas de calibración calculadas mediante una banda de pronóstico, calculada sobre la base de una seguridad estadística manualmente seleccionada.

Opción	Descripción
NINGUNA	Utilizar todos los puntos de calibración medidos y no eliminados para el cálculo de las curvas. Los puntos de calibración ni se seleccionan ni se eliminan.
ELIM. VAL. ERRÁTICOS	Si los puntos de calibración están fuera de la banda de pronóstico calculado, se llevará a cabo una eliminación de los valores erráticos con un test F (comprueba si la no inclusión de un punto da lugar a una mejora significativa de la dispersión del resto): - Con el punto de calibración que está más alejado de la banda de pronóstico, se realizará un test F. Siempre y cuando la no inclusión de este punto no dé lugar a ninguna mejora significativa de la dispersión del resto, se incluirá el punto y la curva de calibración no se seguirá optimizando. - Si la no inclusión da lugar a una mejora significativa, se declara el punto como valor errático (en la tabla se marcará con "!" y en el gráfico en rojo) y se volverá a calcular la curva de calibración sin este punto. - Se volverá a realizar un test F para el punto más divergente de la banda de pronóstico. El proceso se repetirá tantas veces hasta que los valores erráticos se hayan eliminado. - Todos los puntos de calibración fuera de la nueva banda de pronóstico, que no se eliminaron como valores erráticos, se marcarán en la tabla con una "?" y en el gráfico en marrón.

Unidad de concentración

Indique las unidades para la concentración de cada elemento en la columna UNIDAD.

Nota

Con el contrAA se pueden seleccionar diversas líneas de análisis de sensibilidad diferente para un elemento y crear así otra área de trabajo. Para cada línea de análisis se registrará una curva de calibración diferente. En la tabla de calibración se diferenciarán las calibraciones de distintas líneas de un elemento a través del índice del símbolo del elemento, correspondiente a la secuencia de la tabla periódica, p. ej. Cu1, Cu2.

3.2.7.1 Definición de las concentraciones con la creación manual de estándares

Tabla de calibración

Est. de calib. cer 1 Estándares de calib 10

	Tipo	Pos.	Rec	Cu mg/L
	Cal. Cero1	1	REC	0
	Estánd. de cal	2	-	0.06
	Estánd. de cal	3	-	0.12
	Estánd. de cal	4	-	0.18
	Estánd. de cal	5	-	0.24
	Estánd. de cal	6	-	0.3
	Estánd. de cal	7	-	0.36
	Estánd. de cal	8	-	0.42
	Estánd. de cal	9	-	0.48
	Estánd. de cal	10	-	0.54
	Estánd. de cal	11	REC	0.6

< >

↑ ↓ ↺ ↻ inc. OK

Tabla de calibración para procedimiento de estándares con estándares creados manualmente

- En la pestaña CALIB. abra con [CONCENTRACION] la ventana TABLA DE CALIBRACION.
- Establezca el número de estándares en los cuadros de lista, a través de la tabla, dependiendo del proceso de calibración seleccionado.
Número máximo de estándares: 65.

Métodos de calibración	Tipos de estándar
PROCEDIMIENTO DE ESTÁNDARES	CAL. CERO.X (se pueden indicar varias calibraciones cero, p. ej. cuando existen distintos disolventes en los elementos a analizar. En este caso, hay que poner la concentración a "0" en las líneas de elemento afectadas; el resto de las columnas se quedan vacías). CAL. EST.X
PROCEDIMIENTO POR ADICION DE ESTANDARES	CAL. EST.X MUESTRA+ADICIÓN.X
CALIBRACIÓN POR ADICIÓN	MUESTRA+ADICIÓN.X

- Realice las siguientes indicaciones en la tabla:

Opción	Descripción
Pos.	Al utilizar el cargador de muestras Indicar la posición del estándar en el plato de muestras del cargador.
REC.	Sólo en procedimientos de estándares Defina el estándar correspondiente como estándar de calibración.
LÍNEAS DE ELEMENTOS	Concentración de los distintos elementos en el estándar.

3.2.7.2 Definición de las concentraciones con la creación automática del estándar de calibración

La creación automática del estándar de calibración se lleva a cabo con la técnica de llama a través de la mezcla en los cargadores de muestras AS 52s o AS-FD.

Con la técnica de tubo de grafito se creará una serie de calibración mediante escalonamiento de volumen o dilución en el tubo de grafito con los cargadores de muestras MPE 60 o AS-GF.

Con la creación automática del estándar de calibración, tiene que definir después la concentración de la solución patrón madre. Las concentraciones de la solución patrón madre disponible se pueden guardar en una base de datos y abrir cuando se necesiten.

Tabla de calibración

Est. de calib. cer: Estándares de calib:

Tipo	Pos.	Fabricación		Vol. ción p	Rec	Cu mg/L
		[%]				
Cal. Cero1	19	0	0		REC	0
Estánd. de cal.1	20	4	200	1	-	0.06
Estánd. de cal.2	20	8	400	1	-	0.12
Estánd. de cal.3	20	12	600	1	-	0.18
Estánd. de cal.4	20	16	800	1	-	0.24
Estánd. de cal.5	20	20	1000	1	-	0.3
Estánd. de cal.6	20	24	1200	1	-	0.36
Estánd. de cal.7	20	28	1400	1	-	0.42
Estánd. de cal.8	20	32	1600	1	-	0.48
Estánd. de cal.9	20	36	1800	1	-	0.54
Estánd. de cal.10	20	40	2000	1	REC	0.6

Desactivar los estándares con Ctrl+clic de ratón o Ctrl+espaciador

☐ inc.

Tablas de calibración para procedimientos de estándares con estándares creados automáticamente (para técnica de tubo de grafito)

Definir soluciones patrón madre

En la lista de las soluciones patrón madre se pueden determinar diversas soluciones patrón madre con distintos elementos y concentraciones.

1. En la pestaña METODO - CALIB. abra con [STOCK] la ventana SOL. PATRÓN MADRE.
2. Introduzca con [ADJUNTAR] un nuevo renglón en la lista de stock.
Se abre un cuadro de diálogo INSERTAR SOLUCIONES PATRON MADRE.
Número máximo de soluciones patrón madre: 20
3. También puede cargar con la opción DEL BANCO DE DATOS DE STOCK, las soluciones patrón madre de esta base de datos. En este caso seleccione en la lista el nombre de la solución patrón madre.

Si no, también puede indicar los datos de la solución patrón madre seleccionando la opción INTRODUCIR MANUALMENTE directamente en la lista:

Columna	Descripción
NOMBRE	Nombre del estándar.
Pos.	Posición del estándar en el cargador de muestras.

Rellenar la tabla de calibración

ELEMENTOS Y CONCENTRACIONES	Elementos del estándar con sus concentraciones correspondientes. Con [CONCENTRACIONES...] abra una lista para introducir las concentraciones. Alternativamente, también puede introducir los valores directamente en el renglón con el siguiente formato <i>Símbolo de elemento-Espacio-Concentración</i> . P. ej., níquel con una concentración de 0,5 mg/L: Ni 0,5. Otros elementos y sus concentraciones se separan con un espacio. Debajo de la lista de Stock se muestra un ejemplo sobre el formato de introducción.
UNIDAD	Unidad de concentración de los distintos elementos en el estándar.

Después de definir la solución patrón madre, rellene la tabla de calibración.

1. En la pestaña METODO - CALIB. abra con [CONCENTRACION] la ventana TABLA DE CALIBRACION.
2. Establezca el número de estándares en los cuadros de lista, a través de la tabla, dependiendo del proceso de calibración seleccionado.
Número máximo de estándares: 65.

Métodos de calibración	Tipos de estándar
PROCEDIMIENTO DE ESTÁNDARES	CAL. CERO (se pueden indicar varias calibraciones cero, p. ej. cuando existen distintos disolventes en los elementos a analizar. En este caso, hay que poner la concentración a "0" en las líneas de elemento afectadas; el resto de las columnas se quedan vacías). CAL. EST.X
PROCEDIMIENTO POR ADICION DE ESTANDARES	CAL. EST. MUESTRA+ADICION.X
CALIBRACIÓN POR ADICIÓN	MUESTRA+ADICIÓN.X

3. Realice las siguientes indicaciones en la tabla:

Columna	Descripción
POS.	Posición del estándar o valores cero en el plato de muestras del cargador de muestras.
CREACIÓN	% VOL STOCK Con AS 52s o AS-FD Vol.-% del porcentaje de la solución madre en la solución. Con MPE 60 o AS-GF Volumen de solución madre en µL a inyectar Número de la solución madre. Se registra automáticamente según la posición en el cargador de muestras.
REC.	Sólo en procedimientos de estándares Defina el estándar correspondiente como estándar de calibración.
LÍNEAS DE ELEMENTOS	Indicación de la concentración del elemento en el estándar según el Vol.-% definido anteriormente.

Desactivar estándares
para líneas seleccionadas

Si para una línea determinada no deben utilizarse estándares, desactívelos del siguiente modo:

- Mantenga presionada la tecla Ctrl y haga clic en el renglón del estándar en el campo de líneas.

También puede hacer clic en el campo de líneas y pulse después el espaciador. El campo se pondrá gris.

- El estándar para la calibración del elemento se reactiva del mismo modo.

3.2.8 Pestaña ESTADISTICA: definir la evaluación estadística

Ventana METODO / ESTADISTICA

Seleccione en la pestaña ESTADISTICA los procedimientos estadísticos que deben utilizarse para la calibración y la medición de las muestras. La configuración es independiente del procedimiento de calibración seleccionado y se mantiene con cada cambio de procedimiento.

Tipo de estadística

Opción	Descripción
ESTADÍSTICA PROMEDIO	Calcular promedio y desviación del estándar. Estadística de errores según el promedio aritmético: la muestra se medirá varias veces en base a los ciclos vacíos. El promedio, la desviación del estándar y la desviación relativa del estándar se calcularán partiendo de los resultados de medición.

ESTADÍSTICA DE MEDIANAS	Calcular la mediana y el rango (R). Estadística de errores según el procedimiento de medianas: La muestra se medirá varias veces después de las seudomediciones. Los valores de medición se ordenarán por tamaño. El valor de mediana mostrado es: - Con un número impar de ciclos de medición, el valor en el medio de la lista ordenada. - Con un número par de ciclos de medición, el promedio de ambos valores de medición en el medio de la lista ordenada. Como los valores individuales de medición, mayores y menores, no influyen en el resultado de la medición, la estadística de medianas es apropiada para eliminar los valores erráticos.
-------------------------	--

Número de mediciones de repetición

Opción	Descripción
REPETICIÓN/MUESTRA	Número de repeticiones de medición por muestra
REPETICIÓN/MUESTRA DE CALIB.	Número de repeticiones de medición por muestra de calibración.
REPETICIÓN/MUESTRA QC	Número de repeticiones de medición por muestra QC.
SEUDOMEDICIONES	Repetición de seudomediciones. Número de las mediciones con muestra que se introducen antes de la serie estadística y no se utilizan para el cálculo del resultado.

Prueba de valores erráticos Grubbs

Para la estadística promedio con un mínimo de 3 repeticiones de medición por muestra.

Activación	Descripción
OFF	Utilizar todos los valores de la serie estadística para calcular el promedio.
ON	Los valores atípicos se eliminan y no se utilizan para el cálculo de las magnitudes de la estadística. Los promedios calculados de esta manera se marcarán con "!" en la tabla Salida.

Cálculo del rango de confianza

La base para el cálculo del rango de confianza es la seguridad estadística seleccionada (véase más abajo). En el rango de confianza entran, además de los errores en la medición de la muestra, sobre todo los errores de la calibración, para que, aunque la función estadística esté desconectada, siempre se indique un valor.

Opción	Descripción
OFF	No calcular el rango de confianza.
ABSOLUTO	Mostrar el rango de confianza en valores absolutos (en la unidad de medida de la concentración).
RELATIVO	Mostrar el rango de confianza en valores relativos (porcentaje del valor de concentración).
PROBABILIDAD	La probabilidad (seleccionable entre 68,3... 99,9%) se utilizará para calcular el rango de confianza de las muestras y los grupos de pronóstico de las curvas de calibración.

3.2.9 Pestaña QCS: muestras de control de calidad

Un control de calidad (QC) es de especial importancia en las series de mediciones. Durante el desarrollo de la medición se introducirán, en lugares predeterminados, mediciones de control con muestras que deberían proporcionar resultados de medición conocidos. En dichos lugares, se conocen o bien el valor absoluto (absorbancia/concentración) o bien la diferencia de concentración de la muestra precedente.

Los resultados de las mediciones de control se registran automáticamente en los llamados ficheros QC (o tarjetas de registro).

En un análisis se pueden establecer distintas muestras de control de calidad (muestras QC). Las indicaciones acerca de las concentraciones de estas muestras al igual que sobre el rango de tolerancia, debe realizarlas en la ventana METODO QCS.

Método

Lineas

Llama

Alimentación de muestras

Evaluación

Calib.

Estadística

QCS

QCC

Salida

Tipo: Stock QC

Nombre: Stock

Reacción: sólo marcar

Nuevo/Modificar...

Borrar

☐ Corrección del blanc

Unidad: mg/L

Núm	Linea	Conc. esperada	Inferior Desviac. [%]	Superior Desviac. [%]	Tarjeta C	Reacc.!
1	Cu324	1	10	10	-	+
2	Al396		10	10	-	-
3	Cd228		10	10	-	-

Vision general de muestras QC

↑

↓

↓

☐ inc.

Abrir...

Guardar...

OK

Adoptar

Cancelar

Ventana METODO / QCS

Elementos de la pestaña QCS

Lista/Botón	Descripción
TIPO	Muestra QC cuyos parámetros (límites de error y procedimientos) se muestran en la lista de líneas. En la lista puede abrir una de las muestras determinadas para verla y editarla.
NOMBRE	Nombre de la muestra QC mostrada.
REACCIÓN	Procedimiento en caso de que los resultados de la muestra QC sean inferiores o superiores a los límites de error establecidos.
[NUEVO/MODIFICAR]	Definir una muestra QC nueva o modificar una ya existente.
[BORRAR]	Borrar la muestra QC mostrada.
UNIDAD	Indicación de la unidad de concentración.
[VISION GENERAL DE MUESTRAS QC]	Abrir una lista con los parámetros específicos para cada línea de todas las muestras QC.

Indicar los parámetros para las muestras QC

TABLA

En la tabla se mostrarán los parámetros de las muestras QC seleccionadas en el cuadro de lista TIPO.

1. Establezca con [NUEVO/MODIFICAR...] un nuevo conjunto de parámetros para una muestra QC o modifique el actual.
Se abrirá la ventana AÑADIR TIPO DE MUESTRA QC O MODIFICAR.
2. Seleccione en la lista TIPO el tipo de muestra e introduzca en el cuadro de lista de al lado un número (p. ej., Estánd. QC2), en el caso de que defina varias muestras QC del mismo tipo. Estos son los tipos de muestras disponibles:

Tipo	Descripción
MUESTRA QC	Definir una muestra como muestra QC. Las concentraciones de la muestra QC se pueden descargar de la base de datos o introducir directamente. Para acceder a un conjunto de datos guardados en la base de datos para la muestra QC, active la opción DEL BANCO DE DATOS y seleccione del cuadro de lista de al lado la muestra QC correspondiente (→ "Especificación de soluciones patrón madre y muestras QC" p. 175). Alternativamente también puede definir las concentraciones de la muestra QC directamente en la tabla en la ventana QCS. Active en este caso la opción INTRODUCIR MANUALMENTE. Número máximo de las muestras QC: 50
ESTÁND. QC	Definir un estándar como muestra QC. Todos los estándares definidos en la tabla de calibración (pestaña CALIB.) se pueden utilizar como estándar QC. Si el cargador de muestras mezcla el estándar de calibración, se mezclará del mismo modo como estándar QC con el cargador. Las posiciones del cargador de muestras se toman de la TABLA DE CALIBRACION. El número introducido define al mismo tiempo el estándar de calibración utilizado, p. ej. "Estánd. QC 2". El segundo estándar de calibración se utiliza como estándar QC. Número posible de estándares QC = Número de estándares en la tabla de calibración (máx. 65)
BLANCO QC	Definir el valor blanco como muestra QC.
STOCK QC	Definir una muestra adicionada como muestra QC. Al recuperar o aumentar, se controlarán los resultados de medición de una adición de concentración definida para una o varias muestras. Para ello, después de una muestra hay que definir una muestra adicionada QC (muestra adicionada QC = muestra + adición con una solución de concentración conocida) en la tabla de muestras. Después de la medición de la muestra y de la muestra adicionada QC se comparará la diferencia de concentración de ambas con el aquí especificado "aumento de la concentración esperado" y se calculará la tasa de recuperación. Con la técnica de llama, la muestra adicionada ya tiene que estar mezclada.

Si no dispone de muestras de control certificadas, el control de calidad también se puede realizar con determinaciones dobles:

Tipo	Descripción
TENDENCIA QC	El valor de concentración medido se guardará la primera vez que surja la muestra de control en el desarrollo del análisis. Cuando vuelva a aparecer, se creará la diferencia de concentración y se valorará. De forma conveniente, estas pruebas de control deberían medirse al principio y al final de una serie de muestras.
MATRIZ QC	Antes de la preparación de la muestra se dividirá una muestra de análisis. Las dos partes pasan por separado por todas las etapas de la preparación de muestras y se colocan por separado como tendencia QC y matriz QC en el cargador de muestras. La diferencia entre las concentraciones se valorará.

3. Seleccione en la lista REACCION los siguientes procedimientos en caso de que se exceda el límite de error:

- Para la MUESTRA QC, ESTAND. QC y STOCK QC

Opción	Descripción
SÓLO MARCAR	El valor medido se marcará en la tabla de muestras. El programa de medición continúa con la siguiente muestra.
RECALIB. + CONTINUAR	Se realiza una recalibración. A continuación se volverá a medir la muestra QC. Si la muestra QC está dentro del rango, la medición continúa con la siguiente muestra, si no, el programa de medición se detendrá o continuará con el siguiente método.
CALIB. + CONTINUAR	Se realiza una nueva calibración. A continuación se volverá a medir la muestra QC. Si la muestra QC está dentro del rango, la medición continúa con la siguiente muestra, si no, el programa de medición se detendrá o continuará con el siguiente método.
RECALIB. + MEDIR DE NUEVO	Se realiza una recalibración. A continuación se volverá a medir la muestra QC. Si la muestra QC está fuera del rango, el programa de medición se detendrá. Si está dentro del rango, se volverán a medir todas las muestras partiendo de la última muestra QC o la última (re-) calibración. Si la muestra QC está entonces fuera del límite de errores, el programa de medición se detendrá o continuará con el siguiente método.
CALIB. + MEDIR DE NUEVO	Se realiza una nueva calibración. A continuación se volverá a medir la muestra QC. Si la muestra QC está fuera del rango, el programa de medición se detendrá o continuará con el siguiente método. Si está dentro del rango, se volverán a medir todas las muestras partiendo de la última muestra QC o la última (re-) calibración. Si la muestra QC está entonces fuera del límite de errores, el programa de medición se detendrá o continuará con el siguiente método.
SIGUIENTE MÉTODO	El programa de medición actual se detendrá y se iniciará el programa de medición del método siguiente.
PARADO	El programa de medición actual se detendrá.

- Para BLANCO QC se puede seleccionar entre las reacciones anteriormente descritas: SOLO MARCAR, SIGUIENTE METODO y STOP.
- Para TENDENCIA QC y MATRIZ QC no se prevé ninguna reacción.

4. Para Tendencia QC y Matriz QC se prevé opcionalmente una corrección de blanco. Para ello, active la casilla de control BLANCO.
5. Defina en la tabla los parámetros específicos para cada línea de elemento según el tipo de muestra QC:

Columna	Descripción
LÍNEA	Nombre de la línea de elemento.
CONC. ESPERADA PARA MUESTRA QC Y ESTAND. QC. CONCENTRACION ESPERADA EN LA MUESTRA QC.	
INCREM. ESPERADO DE CONC.	para Stock QC. Incremento de concentración esperado de una muestra a una muestra adicionada. Indicar el valor correspondiente a la cantidad añadida y a la concentración de dicha adición.
ABSORBANCIA ESP.	para blanco QC. Absorbancia esperada en el blanco de QC.
RANGO INFERIOR [%]	Rango inferior del límite de errores en %.
RANGO SUPERIOR [%]	Rango superior del límite de errores en %.
PESTAÑA QC	Cuando está marcada con "+", se mostrará entonces el resultado del control de calidad para esta línea en la pestaña QC de la lista de resultados.
REACT.!	Cuando se ha sobrepasado el límite de error, entonces debería aparecer el procedimiento seleccionado de aplicación en la lista REACCION. Cuando hay varias líneas marcadas con "+", basta con que en una de las líneas se hayan sobrepasado los límites de error para desencadenar la reacción.
UNIDAD	Unidad de la concentración esperada (sólo con Estánd. QC)

3.2.10 Pestaña QCC: control de calidad durante el desarrollo del análisis

Método

Lineas

Llama

Alimentación de muestras

Evaluación

Calib.

Estadística

QCS

QCC

Salida

Control RSD/RR%:

sólo marcar

Control de calib.:

calib. + continuar

Control de recal.:

siguiente método

Núm.	Línea	RSD/RR% <	RSD !	R²(adj.) >	R² !	Fact de rec. >	Fact de rec. <	Rec. !
1	Cu324	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
2	Al396	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
3	Cd228	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+

↑

↓

↓

☐ inc.

Abrir...

Guardar...

OK

Adoptar

Cancelar

Ventana METODO / QCC

Defina en la pestaña QCC de la ventana METODO, los parámetros para el control de calidad:

- desviación relativa del estándar (estadística promedio) o rango relativo (estadística de medianas),
- control de calibración y
- control de recalibración al igual que
- procedimientos en caso de que se excedan los límites de error.

Puede seleccionar al mismo tiempo distintos controles con diferentes reacciones.

Tipo de control de calidad

Opción	Descripción
CONTROL RSD/RR%	Control de la desviación relativa del estándar o rango relativo (→ sección "Pestaña ESTADÍSTICA: definir la evaluación estadística" p. 50).
CONTROL DE CALIB.	Controlar la calibración
CONTROL DE RECALIB.	Controlar el factor de recalibración

Reacciones en caso de que se excedan los límites de error

Opción	Descripción
NINGUNA	No efectuar los controles respectivos.
SÓLO MARCAR	Marcar la muestra, la calibración o la recalibración afectadas en la tabla de muestras si se exceden los límites de error.
REPETIR + CONTINUAR	Sólo con CONTROL RSD/RR% Si se excede el límite de precisión estándar, repetir la medición de la muestra afectada antes de que se mida la muestra siguiente.

CALIB. + CONTINUAR	Sólo con CONTROL DE CALIB. y CONTROL DE RECALIB. Si se exceden los límites de error para la calibración o el factor de recalibración, realizar una nueva calibración y continuar después la medición con la muestra siguiente.
SIGUIENTE MÉTODO	Sólo con CONTROL DE CALIB. y CONTROL DE RECALIB. Si se exceden los límites de error de la medición, terminar el método actual en curso e iniciar el método siguiente.
PARADO	Sólo con CONTROL DE CALIB. y CONTROL DE RECALIB. Si se exceden los límites de error de la medición, terminar el método actual en curso.

Control del tubo de grafito

Sólo para la técnica de tubo de grafito

Se especifica el control del tubo de grafito.

Opción	Descripción
MÁX. CICLOS DE CALENTAMIENTO	Indicar el número máx. de las mediciones con el tubo. El valor actual de los ciclos de calentamiento se indica en el campo de al lado.
REACCIÓN	Seleccionar la reacción al alcanzar el número máximo de mediciones: SIN REACCIÓN No se controla el uso del tubo de grafito. SOLO MARCAR Si se excede el valor límite, marcar la medición en la tabla de muestras. DETENER Si se excede el valor límite, detener el desarrollo del análisis.

Parámetros de los
controles de calidad
específicos para cada línea

Defina en la tabla los parámetros de los controles de calidad, específicos para cada línea. Para cada línea analizada se establece si deben controlarse. Si una o varias líneas controladas exceden los límites de error, se desencadena entonces la reacción anteriormente establecida.

Control de calidad	Parámetro	Significado
CONTROL RSD/RR%	RSD/RR%<	En desviaciones del estándar o rangos relativos, mayores o iguales que el valor indicado, se produce una reacción con el procedimiento establecido. RSD! Con "+" en las líneas marcadas, se controla el RSD% o el RR%.
CONTROL DE CALIB.	R ² (ADJ.)>	El grado de determinación de la regresión R ² (adj.) tiene que ser mayor o igual que el valor indicado. Si no, se produce la reacción con el procedimiento establecido. R ² ! Con "+" en las líneas marcadas, se controla R ² (ajustar).

CONTROL DE	FACT. DE	Límite superior del factor de recalibración.
RECALIB.	REC. >	Límite inferior del factor de recalibración.
	FACT. DE	La reacción se desencadena con factores de calibración fuera del
	REC. <	valor límite indicado.
	REC.!	Con "+" en las líneas marcadas, se controla el factor de calibración.

3.2.11 Pestaña SALIDA: vista de la pantalla, impresión y contenidos

Guardar con resultados

☒ Espectros

☒ Método

Núm.	Línea	Partes fraccionarias (E)	Partes fraccionarias (c)	Partes signif. (conc.)	Orden de impresión
1	Cu324	5	4	4	2
2	Al396	5	4	4	2
3	Cd228	5	4	4	3

Siempre guardar espectros está activo (ventana Opciones)

☐ inc.

Abrir... Guardar... OK Adoptar Cancelar

Ventana METODO / SALIDA

Especifique en la pestaña SALIDA el contenido, número de decimales de los resultados en la indicación de la pantalla y en la impresión, al igual que la secuencia de las líneas en la impresión.

- Al activar la opción correspondiente, se produce el almacenamiento adicional del METODO y los ESPECTROS con los resultados del análisis.
- Establezca en la lista para cada elemento, el número de decimales para la indicación y la impresión de absorbancia y concentración, al igual que la secuencia de impresión.

Para el desarrollo de métodos, se recomienda guardar los espectros. Así obtendrá información importante sobre problemas potenciales de matriz e interferencias. Si no dispone de espectros guardados, recalculer con parámetros de métodos modificados sólo es posible partiendo de los valores de absorbancia calculados. De este modo no puede, p. ej., modificar los puntos de referencia de la corrección de fondo porque falta la información espectral para los distintos píxeles.

Con un método de rutina equilibrado no necesita guardar los espectros.

Nota

Cuando en la ventana OPCIONES / TRANCURSO DEL ANALISIS, está activada la opción GUARDAR SIEMPRE LOS ESPECTROS, se guardarán siempre los espectros independientemente de la configuración de los parámetros de método (→ "Opciones para el transcurso del análisis" p. 183).

4 Secuencias

Una secuencia basada en un método cargado contiene información acerca del tipo de calibración, evaluaciones estadísticas, controles de calidad, etc.

La secuencia contiene muestras y acciones en el orden a seguir. Algunos datos descriptivos sobre las muestras, como el nombre de éstas y su posición en el plato de muestras, pueden introducirse directamente. Los datos se guardarán con la secuencia.

El significado de los botones y símbolos de la ventana SECUENCIA, que también se repiten en otras ventanas, se describen en la sección "Elementos de manejo más utilizados" p. 10.

4.1 Gestionar métodos y secuencias

Las secuencias, como los métodos, se guardan en conjunto en una base de datos. Al guardar y abrir secuencias, se abrirá la ventana de la base de datos (→ "La ventana de base de datos" p. 171).

4.1.1 Crear nueva secuencia

- Para crear una nueva secuencia, abra la ventana SECUENCIA con el comando ARCHIVO ► NUEVA SECUENCIA.

También puede abrir la ventana con los parámetros de secuencia actuales con el comando DESARROLLO DE METODOS / SECUENCIA o mediante un clic en el símbolo



4.1.2 Guardar secuencia

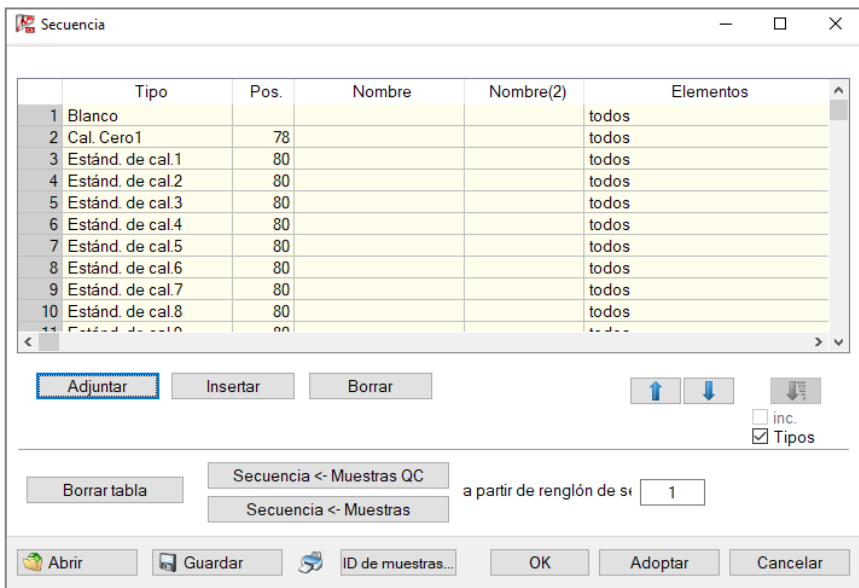
1. Haga clic en [GUARDAR] en la ventana SECUENCIA.
También puede abrir el comando ARCHIVO ► GUARDAR ► SECUENCIA.
2. Se abre la ventana GUARDAR SECUENCIA.
3. Introduzca el nombre de la secuencia en el campo NOMBRE.
Como propuesta estándar, se le ofrecerá "Secuencia" y la fecha actual, p. ej., "Secuencia-08-15-05".
4. En el campo CAT.: (categoría) puede introducir, de modo opcional, una identificación adicional con 3 caracteres, que facilitará con posterioridad la búsqueda de métodos en la base de datos.
5. Introduzca, opcionalmente, información acerca de la secuencia en el campo DESCRIPCION.
6. Guarde la secuencia con [OK].
✓ La secuencia está guardada en la base de datos.

Si utiliza un nombre de secuencia ya existente, la secuencia existente no se sobrescribirá, si no que se creará una nueva versión en la base de datos. Para eliminar secuencias de la base de datos, tiene que borrarlas explícitamente.

4.1.3 Abrir secuencia

1. Haga clic en [ABRIR] en la ventana SECUENCIA.
También puede abrir el comando ARCHIVO ► ABRIR SECUENCIA o haga clic en la barra de herramientas al lado del campo SECUENCIA en el símbolo de carpeta .
Se abre la ventana ABRIR SECUENCIA.
2. Seleccione la secuencia deseada de la lista.
3. En el campo CAT. puede establecer que solo se muestren secuencias de una de las categorías indicadas.
Si desea visualizar las secuencias de todas las categorías, borre la entrada en el campo CAT.
4. Active la casilla de control SOLO MOSTRAR VERSIONES ACTUALES, cuando, con secuencias del mismo nombre, sólo desee ver la secuencia con el número de versión más alto.
5. Abra la secuencia seleccionada con [OK].

4.2 Funciones de diálogo específicas en la ventana SECUENCIA



Ventana SECUENCIA

Tabla de secuencia de muestras y acciones

Columna	Descripción
TIPO	Tipo de muestra o fase del análisis
Pos.	Posición de la muestra en el cargador de muestras (si se utiliza)
NOMBRE	Nombre de la muestra Esta indicación es opcional. Para muestras QC y de calibración se tomará el nombre de la muestra del método, si se especificó un nombre de muestra en este. Para muestras de análisis se pueden tomar los nombres del archivo de información de muestras.

NOMBRE (2)	Otras denominaciones para la identificación de la muestra (opcional).
ELEMENTOS	Elementos o líneas de elementos que se analizarán en la muestra. Formato de introducción: véase indicación en la columna de la lista:
"TODOS"	todos los elementos o líneas de elementos definidos en el método se determinarán (configuración del estándar).
SÍMBOLO DE ELEMENTO	Sólo se determinarán los elementos indicados, p. ej., "Cu, Pb"
SÍMBOLO DE ELEMENTO + ÍNDICE (con el análisis de varias líneas de un elemento)	Sólo se determinarán las líneas de elementos indicadas, p. ej., "Cu1, Cu2".
"NO" SÍMBOLO DE ELEMENTO	Los elementos indicados no se determinarán, p. ej., "no Cu, Pb".
"NO" SÍMBOLO DE ELEMENTO + ÍNDICE	Las líneas de elementos indicadas no se determinarán, p. ej., "no Cu1, Pb2".

Botones

Botones	Descripción
[ADJUNTAR]	Introducir un nuevo renglón al final de la lista y abrir la ventana PROCESAR LA SECUENCIA.
[INSERTAR]	Introducir un nuevo renglón en la posición marcada de la lista.
[BORRAR]	Borrar los renglones seleccionados.
[MUESTRAS]	Abrir la ventana ID DE MUESTRAS con los datos de información de muestras.
[BORRAR TABLA]	Borrar toda la tabla de secuencia.
[SECUENCIA <- MUESTRAS QC]	Tomar la información sobre los nombres de las muestras QC y su posición en el cargador de muestras de la ventana ID DE MUESTRAS / INFORMACION DE MUESTRAS QC (→ "Datos de información de las muestras" p. 65). La información de la tabla de ID de muestras QC se introducirá en la tabla de secuencia. El primer renglón con la nueva identificación de la muestra se establecerá en el campo A PARTIR DEL RENGLO DE SEC.
[SECUENCIA <- MUESTRAS]	Añadir la información sobre nombres de muestras y su posición en el cargador de muestras de la ventana ID DE MUESTRAS (→ "Datos de información de las muestras" p. 65). La información de la tabla de ID de muestras se introducirá en la tabla de secuencia. El primer renglón con la nueva identificación de la muestra se establecerá en el campo A PARTIR DEL RENGLO DE SEC.

4.3 Especificar secuencias de muestras y acciones

1. Abra con [NUEVO] la ventana PROCESAR LA SECUENCIA.

Ventana PROCESAR LA SECUENCIA

2. Seleccione consecutivamente las muestras o acciones y añádalas a la lista de secuencia con [ADOPTAR]:

Muestra/acción	Descripción
MUESTRAS	Medir el número de muestras indicado en Num.
MUESTRAS QC	Medir una muestra QC y analizar según la especificación en el METODO. Seleccione de la lista una de las muestras QC especificadas en la ventana METODO / PESTAÑA QCS. Aparecerán los parámetros de la muestra QC en el campo de al lado.
VALOR DE REFERENCIA	Solo para técnica de llama Medir la muestra de referencia. Se utiliza agua destilada como referencia.
BLANCO	Medir la muestra blanca.
LÍM. DETECC. EN VACÍO	Medir muestra en vacío para determinar los límites de detección y determinación según el procedimiento de vacío.
CALIBRACIÓN	Medir las muestras de calibración y realizar la calibración según la especificación en el método.
RECALIBRACIÓN	Medir la muestra de calibración prevista para la recalibración y realizar una recalibración.
ACCIONES ESPECIALES	Acciones que no afectan directamente la medición de las muestras. Ver más abajo la lista de posibles acciones especiales.
CARGAR MÉTODO	Cargar un método guardado, p. ej. para iniciar un análisis de otro elemento dentro de la secuencia. Abra con [...] la ventana ABRIR METODO (→ "Guardar métodos" p. 17). Seleccione uno de los métodos guardados.

Las siguientes acciones especiales pueden ser añadidas adicionalmente en el curso de medición:

Acciones especiales	Descripción
APAGAR LÁMPARA	Apagar la lámpara de xenón.
PAUSA	Detener el análisis. La secuencia se puede retomar después con el comando RUTINA ► CONTINUAR o con  .
STANDBY	Poner la lámpara de xenón en modo standby (en espera).
TIEMPO DE ESPERA	Esperar el tiempo indicado en min. y después continuar con el análisis.
CALCULAR CALIB.	Volver a calcular la función de calibración. Con ello se pueden documentar los parámetros de calibración de una calibración guardada con el método.
MOSTRAR FUNCIONES DE CALIBRACIÓN	Mostrar la curva de calibración durante la secuencia en curso.
PITIDO	Dejar que el ordenador produzca una señal de advertencia, p. ej. para mostrar el fin de la calibración. (Requiere una tarjeta de sonido, altavoces y activación de los sonidos del sistema en Windows).
REPETIR/ SIEMPRE QUE	Las líneas de secuencia entre las entradas REPETIR y SIEMPRE QUE se ejecutan en bucle. Como condición para la interrupción se puede indicar un número de ejecuciones del bucle o un tiempo en minutos. Las entradas en el archivo de resultados se completarán con un contador o con la fecha y hora, según el criterio de interrupción. En caso de una medición en línea debe activarse la opción AUTOM.. Esto evita la consulta sobre la dosificación de muestras en el funcionamiento manual.
LIMPIEZA	Ejecutar limpieza controlada con análisis de soluciones. (→"Cargador de muestras para técnica de llama e hidruro/HydrEA" p. 31 y "Cargador de muestras para la técnica de tubo de grafito (analítica de soluciones)" p. 34)
LLAMA APAGADA/ENCENDIDA	Sólo técnica de llama Apagar/encender llama.
CALCINACIÓN DEL HORNO	Sólo para técnica de tubo de grafito Fase de calcinación adicional para limpiar el tubo de grafito. En esta fase se calienta el tubo de grafito a una temperatura predeterminada. Los parámetros para esta fase de calentamiento se indican en la ventana METODO / HORNO (→"Pestaña Horno: parámetros del horno de tubo de grafito" p. 24).
FORMAR TUBO	Sólo para técnica de tubo de grafito Formar tubo de grafito.

LAVADO DE SISTEMA	Sólo técnica de hidruro y de llama Lavar el sistema adicionalmente. Los parámetros para esta fase de lavado se indican en la ventana METODO/HIDRURO (→"Pestaña Hidruro: especificar sistema de hidruro" p. 26). Para la técnica de llama, se introduce el tiempo de lavado en la ventana METODO / ALIMENTACION DE MUESTRAS (→"Cargador de muestras para técnica de llama e hidruro/HydrEA" p. 31).
CARGAR EL SISTEMA	Sólo técnica de hidruro Después de una nueva instalación o limpieza en el sistema de hidruro, como debería realizarse al terminar el trabajo diario, se tienen que cargar las mangueras con reactivos antes del comienzo del análisis. Esta acción debería realizarse, por ello, antes de la primera medición en la secuencia.

3. Después de que haya seleccionado todos los elementos de la secuencia, vuelva con [OK] a la ventana SECUENCIA.
4. Indique en la lista ELEMENTOS los ELEMENTOS a analizar.
5. **Al utilizar un cargador de muestras**
 Establezca la posición de las muestras en el cargador. Las posiciones de muestras de calibración y muestras QC se añaden automáticamente del método. Sin embargo, aquí puede cambiar las posiciones.

Nota

Introduzca, preferiblemente, los datos de las muestras a analizar en la ventana ID DE MUESTRAS y añádalos después a la lista de secuencia (→ "Datos de información de las muestras" p. 65).

5 Datos de información de las muestras

El significado de los botones y símbolos de la ventana ID DE MUESTRAS, que también se repiten en otras ventanas, se describe en la sección "Elementos de manejo más utilizados" p. 10.

5.1 Gestionar datos de información de las muestras

5.1.1 Crear nuevo conjunto de datos de información de las muestras

- Abra la ventana ID DE MUESTRAS con un clic en el símbolo:



También puede abrir la ventana ID DE MUESTRAS con el comando DESARROLLO DE METODOS ► ID DE MUESTRAS o ARCHIVO ► NUEVOS DATOS DE INFORMACION DE MUESTRAS.

5.1.2 Guardar datos de información de muestras

La información de las muestras se guarda en formato "*.csv" (puede abrirse con un programa de cálculo de tablas, p. ej. Excel).

Puede definir el comando para guardar la información de las muestras actuales de distintos modos.

1. Haga clic en [GUARDAR] en la ventana ID DE MUESTRAS.
También puede usar el comando ARCHIVO ► GUARDAR ► INFORMACION DE MUESTRAS.
Se abrirá la ventana estándar GUARDAR COMO.
2. Introduzca el nombre de la información de muestras en el campo NOMBRE DEL ARCHIVO.
3. Guarde la información de las muestras con [OK].

5.1.3 Abrir datos de información de muestras.

1. Haga clic en [ABRIR] en la ventana ID DE MUESTRAS.
También puede usar el comando ARCHIVO ► ABRIR ARCHIVO DE INFORMACION DE MUESTRAS.
Se abre la ventana ABRIR.
2. Seleccione el archivo deseado de la lista y ábralo con [OK].

5.1.4 Importar información de las muestras del formato CSV

Los datos de información de muestras se importarán con archivos "*.csv". También se puede hacer al revés, es decir, cargar una tabla CSV como archivo de información de muestras. Si desea utilizar una tabla Excel como fuente para la información de muestras, puede cargarla en ASpect CS con el comando ARCHIVO ► ABRIR ARCHIVO DE INFORMACION DE MUESTRAS

Las variables consecutivas se separarán con un ",".

Variable	Tipo (Número máximo de caracteres)
Pos.	Entero
Nombre	Cadena de caracteres (20)
F. diluc. prev.	Número de coma flotante
Unidad	Cadena de caracteres (10)
Peso neto [g]	Cadena de caracteres (12)
Vol. [mL]	Número de coma flotante
Nombre (2)	Cadena de caracteres (20)
F. diluc. AS	Número de coma flotante
Corr. blanco	0=desactivada; 1=activada
Factor	Número de coma flotante

Para conservar un ejemplo del formato de introducción de datos, guarde un archivo de información de muestras y guíese por él.

5.2 Elementos de la ventana ID de muestras

The screenshot shows a software window titled 'ID de muestras'. It has two tabs: 'Información de muestras' (selected) and 'Información de muestras QC'. The main area contains a table with 11 columns: Pos., Nombre, F. dil. prev., Unidad, Peso neto [g], Vol. [mL], Nombre(2), F. dil. AS, Corr. de blanco, and Muestra. The table lists 8 samples, each with a unique name and consistent numerical values. Below the table is a control panel with buttons for 'Adjuntar', 'Insertar', 'Borrar', and 'Núm.' (set to 1). There are also arrows for navigation and a checkbox for 'inc.'. Further down, there are buttons for 'Borrar tabla', 'Muestras -> Secuencia', 'Secuencia -> Muestras', and a field for 'a partir de renglón de secuer' (set to 1). At the bottom, there are buttons for 'Abrir', 'Guardar', 'Secuencia...', and 'Cerrar'.

Ventana ID DE MUESTRAS /INFORMACION DE MUESTRAS

Al mover el ratón sobre los encabezamientos de la tabla, se mostrarán ventanas informativas explicando el contenido de las columnas de la tabla.

Pestaña INFORMACION DE MUESTRAS

La pestaña INFORMACION DE MUESTRAS contiene una tabla resumen de las muestras y sus propiedades.

Columna	Descripción
Pos.	Posición de la muestra en el cargador de muestras.

NOMBRE	Nombre de la muestra Esta indicación es opcional. Número máximo de caracteres: 20
F. DILUC. PREV.	Factor de dilución previo. Factor con el que se diluyó la muestra original antes de introducirla en el cargador de muestras o, en el caso de trabajo sin cargador de muestras, antes de introducirla en el espectrómetro. El factor es necesario para calcular la concentración de la muestra original (CONC.2 en la tabla de resultados).
UNIDAD	Unidad de la concentración de la muestra.
PESO NETO [g]	Sólo para la analítica de soluciones Peso neto en gramos Masa de la muestra original que se transformó en solución en el tratamiento de la muestra. La pesada es necesaria para calcular la concentración de la muestra original (CONC.2 en la tabla de resultados). Nota: para la analítica de sólidos se especificarán pesadas de muestras conocidas en la Ventana de resultados en la pestaña SOLIDO o se realizarán pesadas de muestras desconocidas antes de la medición (→ "Analítica de sólidos con técnica de tubo de grafito" p. 92).
VOL. [mL]	Volumen del disolvente en el que se diluyó la pesada actual (en mL). El valor es necesario para calcular la concentración de la muestra original (CONC.2 en la tabla de resultados).
NOMBRE (2)	Nombre de la muestra adicional Esta indicación es opcional. Número máximo de caracteres: 20
F. DILUC. AS	Factor de dilución del cargador de muestras.
CORR. BLANCO	Corrección del blanco. OFF No se realizará ninguna corrección del blanco. ON Para calcular la concentración de la muestra original se sustraerá el último blanco medido en la secuencia.
HUMEDAD [%]	Sólo para la analítica de sólidos. Humedad relativa de la muestra Nota: esta indicación es necesaria para calcular la concentración de la muestra original (conc.2).
TIPO DE MUESTRA	Selección del tipo de muestra BLANCO o MUESTRA. Los datos de los ID de muestras son asignados a la sucesión de muestras en la secuencia según el tipo de muestra, es decir 1. ^{er} blanco en ID de muestras → 1. ^{er} blanco en la secuencia 2. ^o blanco en ID de muestras → 2. ^o blanco en la secuencia 1. ^a muestra en ID de muestras → 1. ^a muestra en la secuencia 2. ^a muestra en ID de muestras → 2. ^a muestra en la secuencia, etc.
ELEMENTOS	Indicación opcional de los elementos que se van a determinar en la muestra (p. ej., "Fe,Cu" o "no Pb" Como ajuste predeterminado, se determinan TODOS los elementos del método.

Pestaña INFORMACION DE MUESTRAS QC

Las muestras QC se presentan del mismo modo que en la pestaña INFORMACION DE MUESTRAS.

Las columnas son análogas a las de la pestaña Información de muestras. Adicionalmente, la columna TIPO contiene la información sobre el tipo QC. La columna UNIDAD no es necesaria, ya que la unidad está definida en el método.

Botones

[ADJUNTAR]	Agregar al final de la lista el número de renglones nuevos especificado con NUM..
[INSERTAR]	Agregar en lugar de la lista marcado el número de renglones nuevos especificado con NUM..
[BORRAR]	Borrar los renglones seleccionados.
NÚM.	Campo para definir el número de renglones a introducir o borrar.
[BORRAR TABLA]	Borrar toda la lista de información de las muestras.
[MUESTRAS -> SECUENCIA] A PARTIR DEL REGLON DE SECUENCIA	Añadir nombres de muestras y posiciones en el cargador de muestras en la lista de secuencia. Establecer el primer renglón al que se añadirá información en el campo A PARTIR DE REGLON DE SECUENCIA.
[MUESTRAS QC -> SECUENCIA] A PARTIR DEL REGLON DE SECUENCIA	Añadir nombres de muestras QC y posiciones en el cargador de muestras en la lista de secuencia. Establecer el primer renglón al que se añadirá información en el campo A PARTIR DE REGLON DE SECUENCIA.

5.3 Procesar ID de muestras

Defina el ID de muestras en la Ventana ID DE MUESTRAS / INFORMACION DE MUESTRAS.

1. Introduzca el número de muestras a analizar en el campo #. A continuación, haga clic en [NUEVO] para introducir el número correspondiente de renglones en la lista.
2. Introduzca la información necesaria para cada muestra en la tabla.
3. Si la información introducida es la misma para toda una columna, puede copiar la información de la celda marcada con  a todas las celdas siguientes de la columna.
Si activa la casilla de control INC., se aumentará el valor en 1 cada vez que se copie la información en la celda siguiente. Así puede p. ej. rellenar las posiciones consecutivas en el cargador de muestras de forma sencilla.
4. Los textos de los campos se pueden copiar y volver a añadir a través del menú PROCESAR ► COPIAR y PROCESAR ► INSERTAR o a través de la combinación de teclas [Ctrl+C] y [Ctrl+V] en el portapapeles de Windows.
5. Cuando haya introducido toda la información, indique en el campo A PARTIR DE REGLON DE SECUENCIA a partir de qué renglón desea copiar la información de las muestras. Copie la información con [MUESTRAS -> SECUENCIA].

5.4 Procesar ID de muestras QC

En la pestaña INFORMACION DE MUESTRAS QC puede introducir los datos ID para los siguientes tipos de muestra QC:

- Stock QC
- Tendencia QC
- Matriz QC
- Hasta 20 muestras QC

Introduzca los datos necesarios como en la introducción de la ID de las muestras (→ sección "Procesar ID de muestras" p. 68).

6 Iniciar análisis/Calcular resultado

6.1 Resumen de comandos del menú y símbolos para el inicio del análisis en la ventana principal.

Las mediciones se inician con los símbolos de la barra de herramientas o a través del menú RUTINA.

Símbolo	Comando	Función
	RUTINA ► INICIAR SECUENCIA	Iniciar un curso de análisis.
	RUTINA ► EJECUTAR RENGLON(ES) DE LA SECUENCIA...	Ejecutar el/los renglón(es) seleccionado(s) de la secuencia. Con el ratón y la tecla Ctrl o la de mayúsculas apretada puede marcar varios renglones.
 (rojo)	RUTINA ► STOP	Detener inmediatamente el curso del análisis. La función stop sólo debería utilizarse con la técnica de llama. Si detiene el análisis con la técnica de hidruro, quedarán restos de muestra en el sistema y pueden dar lugar a contaminaciones.
 (amarillo)	RUTINA ► INTERRUMPIR	Para la técnica de hidruro, de tubo de grafito e HydrEA. Durante el desarrollo de un ciclo de un programa de hidruro o de un programa del horno, se puede, con este botón, avisar de la interrupción de un programa. Después de reconocer el aviso de interrupción, el botón se pondrá blanquecino. El curso se desarrollará hasta el final. Después con stop se detendrá el transcurso del análisis.
	RUTINA ► CONTINUAR	Continúa una rutina detenida.
	RUTINA ► APAGAR LLAMA	Apaga la llama.
	RUTINA ► LAVADO	Para la técnica de llama: El cargador de muestras se sumerge en la solución de lavado y lava la cánula. Si se selecciona un módulo de inyección como accesorio, éste se abrirá. De este modo se garantiza el lavado del recorrido de la muestra. Gracias a la bomba de lavado se suministrará siempre solución de lavado. Para la técnica de hidruro: Lavar el sistema de hidruro con ácido (o si fuera necesario también con agente reductor). Los parámetros correspondientes se indicarán en la ventana METODO / HIDRURO (→"Pestaña HIDRURO: especificar sistema de hidruro" p. 26).
	RUTINA ► CALCULAR DE NUEVO	Se provoca un cálculo nuevo de los resultados cuando se modifican los datos de salida, p. ej. la función de calibración o el método.

6.2 Iniciar el transcurso del análisis

Después de seleccionar el método, la secuencia y, cuando sea necesario, los datos de información de las muestras, todos los datos están disponibles para iniciar el transcurso del análisis.

El contrAA tiene que estar preparado para la medición de acuerdo con la técnica utilizada:

- En la técnica de llama: la llama se enciende y arde durante más tiempo que el periodo de calentamiento.
- En la técnica de tubo de grafito: el horno está listo.
- En la técnica de hidruro: la cubeta está precalentada.
- En el cargador de muestras: las muestras están preparadas en el plato de muestras.
- La lámpara de xenón está encendida.

Guardar resultados del análisis

Los resultados del análisis se guardarán directamente durante la medición en una base de datos en la ruta predefinida de serie o en una subcarpeta definida por uno mismo. Opcionalmente se pueden guardar en una nueva base de datos o agregar a una base de datos ya existente. Sin embargo no es posible sobrescribir una base de datos de resultados al seleccionar el mismo nombre.

El destino para los resultados se solicitará automáticamente al comienzo de una rutina de medición. Para ello se abre la ventana COMIENZO MEDICIÓN SECUENCIA: *nombre de secuencia* con las siguientes opciones para el archivo de resultado:

Ventana COMIENZO MEDICIÓN SECUENCIA

Campo/Opción	Descripción
NOMBRE	Indicar nombres de archivos para la base de datos de resultados.
CARPETA	Seleccionar ruta para guardar el archivo de resultados. La carpeta estándar para guardar los archivos se muestra en la ventana OPCIONES / CARPETA (hacer clic en ).

DESCRIPCIÓN	Indicación adicional que se guarda con los resultados del análisis. Esta indicación es opcional. Mediante el botón [...] pueden seleccionarse descripciones definidas por el usuario (→ "Crear comentarios predefinidos" p. 176).
INICIAR NUEVO ARCHIVO	Cuando se activa, hay que indicar un nuevo nombre de archivo. Se comprueba si el nombre ya existe. Los archivos existentes no se pueden sobrescribir.
ADJUNTAR AL ARCHIVO	Se agregan los nuevos resultados a un archivo de resultados existente. Con [...] se abre una ventana de selección de cuya lista puede seleccionar un archivo de resultado existente.
[ACCIONES DE FINALIZACION Y ERRORES]	Abre una ventana opcional con acciones que se ejecutan al finalizar las mediciones o cuando estas han sido interrumpidas prematuramente: EN CASO DE DETENCION POR ERROR, APAGAR LA LAMPARA Apaga la lámpara de xenón de forma automática cuando se interrumpe la medición por un error.
[OK]	Inicia la medición.

El archivo contiene los resultados de la medición y el análisis, al igual que la información de la ID de las muestras. Además se puede definir el almacenamiento del método y de los espectros en el método. Los parámetros de método se guardarán en este caso en la base de datos de resultados. Los espectros se guardarán en un archivo aparte con los mismos nombres de archivo y otra extensión.

La base de datos de resultados se guardará con la extensión ".tps". Los archivos de espectros contienen la extensión ".SPK".

Iniciar medición

1. Inicie la rutina de medición con el comando RUTINA ► INICIAR SECUENCIA o haciendo clic en .
2. Seleccione en la ventana COMIENZO MEDICION SECUENCIAS un nombre de archivo para el archivo de resultados.
Opcionalmente puede guardarse el resultado en un archivo nuevo o agregar a un archivo existente. No se puede sobrescribir un archivo existente.

Después de seleccionar el nombre de archivo, se inicia la rutina de medición en base a la configuración del método y la secuencia.
3. La medición se desarrolla de forma automática cuando utiliza el cargador de muestras.
Si alimenta las muestras manualmente, sin cargador, siga las indicaciones para la preparación de las muestras en la pantalla.

Indicaciones durante el transcurso del análisis

Durante la medición se mostrarán los resultados en tiempo real en la ventana de transcurso y resultado.

Adicionalmente se pueden mostrar las ventanas CURSO DE SEÑAL, INFORME DE LLAMA (con técnica de llama), INFORME DE HORNO (con técnica de tubo de grafito) y REPRESENTACION ESPECTRAL. Estas ventanas de indicación se pueden establecer en la ventana OPCIONES / TRANSCURSO DEL ANALISIS (→ "

Opciones para el transcurso del análisis" p. 183). Las ventanas de indicación se pueden ocultar opcionalmente durante la medición.

- Abra la ventana de indicación con el comando VISTA ► ABRIR VENTANA DE INDICACION o con la tecla de función **F7**.
- Oculte la ventana de indicación con el comando VISTA ► CERRAR VENTANA DE INDICACION o con la tecla de función **F8**.
- Puede posicionar las ventanas de indicación en la pantalla con las funciones de ventana de Windows VENTANA ► POSICIONAR VENTANAS, VENTANAS ► UNA ENCIMA DE LA OTRA y VENTANAS ► YUXTAPUESTAS.

En la lista de secuencia de la ventana de resultados se documentará el progreso de la medición. Los renglones con las acciones consecutivas están marcados con los siguientes símbolos en la columna de la tabla:

Marca	Descripción
-	Todavía no medido/desarrollado.
O	Midiendo.
+	Ya se ha medido/desarrollado.

Además, durante la medición, aparecerán dos botones grandes en la barra de símbolos lateral:

Símbolo	Descripción
ACTIVAR RASPADOR	Cuando se confirma el botón, el raspador limpia el quemador, en el modo de óxido nitroso, entre dos mediciones pertenecientes a una serie estadística de una muestra.
[MÉTODO (SÓLO LECTURA)]	Mostrar la ventana de método. El método se puede leer pero no modificar.
[SECUENCIA MUESTRAS]	Mostrar la ventana de secuencia. La secuencia se puede ampliar durante la medición en curso. La ventana de secuencia contiene el botón [ID DE MUESTRAS] con el que también se pueden crear nuevos datos de ID de muestras.
[DETENER SECUENCIA]	Detener inmediatamente el curso del análisis.
[VENTANA DE INDICACIÓN]	Configurar y mostrar o cerrar ventanas de indicación (de forma análoga a los comandos) VISTA ► ABRIR VENTANA DE INDICACION, VISTA ► CERRAR VENTANA DE INDICACION y los ajustes en la ventana OPCIONES / TRANSCURSO DEL ANALISIS Grupo VENTANA DE INDICACION).

6.3 Interrumpir/detener/continuar el transcurso del análisis

Un análisis en curso se puede interrumpir y después continuar. Con la técnica de hidruro, la medición de la muestra en curso debe, sin embargo, llegar hasta el final y después detenerse. Este procedimiento evita que queden residuos de las muestras en el sistema de hidruro. Con la técnica de llama, la medición se puede detener en cualquier momento sin problemas.

- Con RUTINA ► STOP o con  (botón rojo) detiene el curso del análisis inmediatamente (recomendado para técnica de llama).
- Con RUTINA ► INTERRUMPIR o con  (botón amarillo) interrumpe el curso del análisis. Después de reconocer el aviso de interrupción, el botón se pondrá blanquecino. El programa de hidruro o el de horno se desarrollará hasta el final. Después con stop se detendrá el transcurso del análisis (recomendado para la técnica de hidruro y la técnica de tubo de grafito).
- Con RUTINA ► CONTINUAR o con  vuelve a poner en marcha un rutina detenida o interrumpida.
Se abre la ventana de diálogo CONTINUAR SECUENCIA, en la que se muestra el estado de la acción antes de la interrupción.
Al modificar el método se activa la opción CONTINUAR CON METODOS MODIFICADOS. De este modo se realiza una nueva entrada en el método en el archivo de resultados.
La medición se puede continuar de la siguiente manera:

Modo	Descripción
CONTINUAR	Continuar la línea y la medición estadística actuales en la muestra actual.
PRIMERA MEDICIÓN ESTADÍSTICA	Continuar la línea actual y la primera medición estadística en la muestra actual.
PRIMERA LÍNEA	Continuar la línea y la medición estadística primeras en la muestra actual.
A PARTIR DE LA POSICION DE LA TABLA	Continuar la secuencia a partir de la posición contigua de la tabla.

6.4 Repetir acciones de la secuencia

Las acciones individuales de una secuencia se pueden repetir.

1. Marque en la ventana de resultados, en la pestaña SECUENCIA/RESULTADOS o SECUENCIA, el/los renglón(es) con la acción a repetir.
2. Inicie la rutina de medición con el comando RUTINA ► EJECUTAR RENGLON(ES) DE LA SECUENCIA o haciendo clic en .
3. Seleccione en la ventana COMIENZO MEDICION SECUENCIAS un nombre de archivo en el que se deba guardar el resultado para la medición de repetición.
Opcionalmente puede guardarse el resultado en un archivo nuevo o agregar a un archivo existente. No se pueden sobrescribir resultados existentes al seleccionar el mismo nombre de archivo

Después de seleccionar el nombre de archivo comienza la repetición de la acción seleccionada.

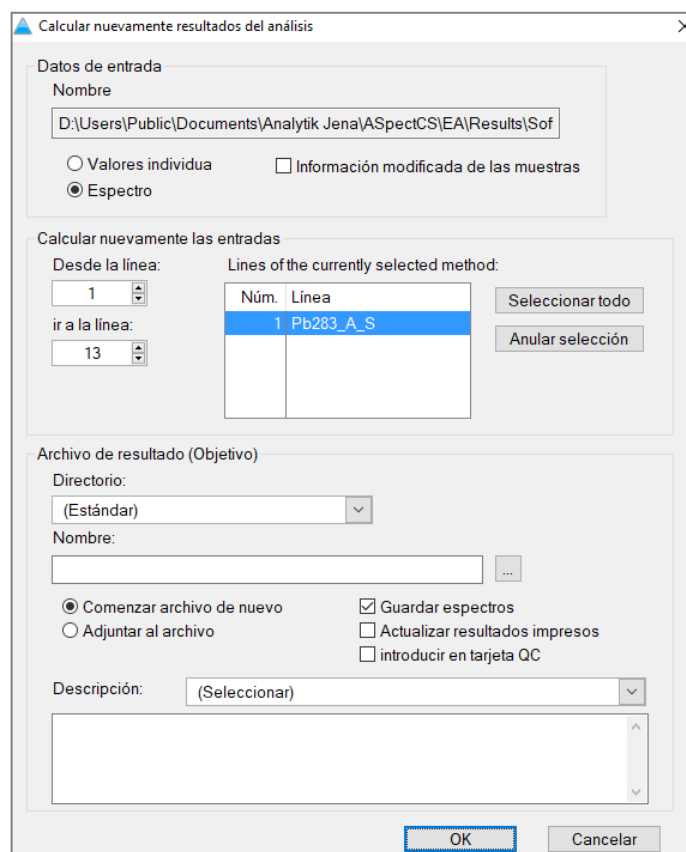
6.5 Calcular de nuevo los resultados del análisis

Después de cada modificación de las condiciones de análisis, p. ej. modificación de la función de calibración, modificaciones de los métodos, etc. hay que volver a calcular los resultados para que las modificaciones resulten efectivas.

Asimismo, los datos de información de las muestras, p. ej. nombres de las muestras, factores de dilución, etc. se pueden modificar y tener de nuevo en cuenta en la edición de los resultados del análisis.

1. Seleccione el comando RUTINA ► CALCULAR DE NUEVO o haga clic en .
2. En la ventana CALCULAR NUEVAMENTE RESULTADOS DEL ANÁLISIS realice los ajustes necesarios.
3. Confirme la selección del archivo de resultados con [O.K.]
 ✓ Se inicia el nuevo cálculo.

Los siguientes ajustes deben ser realizados en la ventana CALCULAR NUEVAMENTE RESULTADOS DEL ANÁLISIS:



La ventana 'Calcular nuevamente resultados del análisis' contiene los siguientes campos y opciones:

- Datos de entrada:**
 - Nombre:
 - ☐ Valores individuales ☐ Información modificada de las muestras
 - ☒ Espectro
- Calcular nuevamente las entradas:**
 - Desde la línea:
 - ir a la línea:
 - Lines of the currently selected method:

Núm.	Línea
1	Pb283_A_S
 - Botones:
- Archivo de resultado (Objetivo):**
 - Directorio:
 - Nombre:
 - ☒ Comenzar archivo de nuevo ☒ Guardar espectros
 - ☐ Adjuntar al archivo ☐ Actualizar resultados impresos
 - ☐ introducir en tarjeta QC
 - Descripción:

Botones de acción:

Ventana CALCULAR NUEVAMENTE RESULTADOS DEL ANÁLISIS

Opción	Descripción
NOMBRE	Nombre del archivo original con los resultados del análisis.
VALORES INDIVIDUALES	Los resultados de la medición de los valores individuales de las muestras se guardaron en el archivo original. El nuevo cálculo se realiza partiendo de los valores individuales.

ESPECTRO	Los espectros de los valores individuales de las muestras se guardaron además en el archivo original. El nuevo cálculo se realiza partiendo de los datos espectrales.
DATOS DE INFORMACION DE MUESTRAS MODIFICADOS	Los datos de información se modificaron y se deben actualizar con el nuevo cálculo.
CALCULAR NUEVAMENTE LAS ENTRADAS	Las entradas en la lista de resultados que comienzan con el renglón DE hasta el renglón HASTA se volverán a calcular.
LÍNEAS DEL MÉTODO CARGADO ACTUALMENTE	Las líneas seleccionadas se calcularán nuevamente.
CARPETA	Seleccionar ruta para guardar el archivo de resultados.
NOMBRE	Indicar nombres de archivos para el archivo de resultados.
INICIAR NUEVO ARCHIVO	Cuando se activa, hay que indicar un nuevo nombre de archivo. Se comprueba si el nombre ya existe. Los archivos existentes no se pueden sobrescribir.
ADJUNTAR AL ARCHIVO	Se agregan los nuevos resultados a un archivo de resultados existente. Con [...] se abre una ventana de selección de cuya lista puede seleccionar un archivo de resultado existente.
GUARDAR ESPECTROS	Guardar los espectros de los valores individuales de la muestra con los nuevos resultados del análisis. La casilla de control sólo está activada cuando hay espectros guardados en el archivo original.
DESCRIPCIÓN	Indicación adicional que se guarda con los resultados del análisis nuevamente calculados. La entrada es obligatoria. En la lista pueden seleccionarse descripciones definidas por el usuario (→ "Crear comentarios predefinidos" p. 176).

i Nota

Los valores calculados de nuevo se pueden guardar, opcionalmente, en una nueva base de datos o agregar a un archivo de resultados ya existente. Es imposible manipular los datos originales. Los resultados originales se conservan siempre, a no ser que se elimine el archivo original.

6.6 Evaluar mediciones de forma paralela al análisis en curso

Durante la medición en curso no se puede realizar ninguna evaluación adicional de los resultados. Sin embargo, en la aplicación ya iniciada se puede abrir otra instancia de la aplicación en modo offline. En este modo no hay conexión con el equipo. El resto de las funciones, como la creación de métodos o la carga y evaluación de resultados, se pueden utilizar de forma paralela a la medición en marcha de la primera instancia.

- Inicie el ASpect CS en la segunda instancia con el comando ARCHIVO ► INICIO OFFLINE.
- Abra el archivo de resultados de la medición en curso actual con el comando ARCHIVO ► ABRIR ARCHIVO DE RESULTADOS.
Los resultados medidos hasta ahora se cargarán en la ventana de resultados.
- Otros resultados de la medición en curso se cargan con el comando VISTA ► ACTUALIZAR LISTA DE RESULTADOS o con el símbolo .

	Los resultados se pueden seguir editando, p. ej. accediendo a los detalles de las muestras o de la función de calibración (→ "Calibración" p. 100). Nota Con un nuevo cálculo, se guardan los resultados nuevamente calculados en una nueva base de datos. Para acceder al archivo original se requiere abrir de nuevo los datos de resultados.
--	---

6.7 Mostrar resultados y desarrollo del análisis

Nota	Los valores de medición se calcularán en absorbancia o emisión dependiendo del tipo de análisis. En la siguiente descripción sólo se mencionarán valores de absorbancia. Para los valores de emisión sirven las mismas indicaciones y declaraciones. Para los valores de absorbancia se utilizará, al emitir los valores, la abreviatura ABS. y para los valores de emisión EMS.
------	---

Los resultados de medición y la secuencia se mostrarán ampliamente como fondo de escritorio en la ventana de resultados.

La presentación en distintas pestañas en la ventana de resultados ofrece una buena visión de conjunto sobre los resultados de la medición y las evaluaciones estadísticas.

Se pueden seleccionar las siguientes pestañas:

- Secuencia/Resultados (contenido de las pestañas secuencia y resultados en una pestaña)
- Secuencia (indicación de la secuencia actual)
- Resultados (representación de los resultados de medición)
- Visión general (resumen de los resultados)
- sólido

En la barra de estado de la ventana de resultados se muestra el nombre de archivo de resultados actual.

6.7.1 Pestaña SECUENCIA/RESULTADOS

La pestaña SECUENCIA/RESULTADOS contiene los datos de ambas pestañas SECUENCIA y RESULTADOS (→ "Pestaña SECUENCIA" p. 77, "Pestaña RESULTADOS" p. 78).

6.7.2 Pestaña SECUENCIA

En la pestaña SECUENCIA se registrará la secuencia activa.

Durante el análisis se puede seguir aquí su desarrollo. Las distintas muestras y funciones especiales están marcadas de la siguiente manera en la primera columna:

Marca	Significado
-	Todavía no medido/desarrollado.
O	Midiendo.
+	Ya se ha medido/desarrollado.

i Nota

Después de la medición se puede realizar una nueva medición de una muestra seleccionada. Para ello, el renglón de la muestra tiene que estar señalado en la secuencia y después hay que  confirmarlo en la barra de herramientas.

6.7.3 Pestaña RESULTADOS

En la pestaña RESULTADOS se presentan todos los resultados de la medición y evaluaciones estadísticas. Para tener una mejor visión de conjunto, los valores están distribuidos en tablas. Las pestañas para estas tablas se encuentran en el margen inferior de la ventana.

Los valores están ordenados de acuerdo con la secuencia de la medición. Para cada muestra se presentan respectivamente los elementos analizados.

Tabla ABS./TIEMPO

La tabla contiene los valores de absorbancia y la evaluación estadística de acuerdo con el método establecido (ventana METODO / QCC).

Columna	Descripción
N.º	Número en la sucesión de análisis
NOMBRE	Nombre de la muestra
LÍNEA	Línea de elementos
ABS.	Promedio de las absorbancias individuales medidas En la analítica de sólidos: absorbancia estándar
SD	Desviación del estándar (estadística promedio)
RSD%	Desviación relativa del estándar (estadística promedio)
FECHA/HORA	Momento de la medición
VALORES INDIVIDUALES ABS. (ABS.)	Valores individuales de las mediciones de absorbancia (o de emisión)

Tabla SÓLIDO

Columna	Descripción
N.º	Número en la sucesión de análisis
NOMBRE	Nombre de la muestra
LÍNEA	Línea de elementos
ABS. EST.	Promedio de la absorbancia estándar (absorbancia/pesada)
SD	Desviación del estándar de la Conc. 1 (estadística promedio)
RSD%	Desviación relativa del estándar de la Conc. 1 (estadística promedio)
PESO	Masa de analito absoluta media
UNIDAD	Unidad absoluta del analito
HUMEDAD[%]	Humedad relativa de la muestra
PESO NETO [MG]	Pesos netos de todas las cantidades individuales
FECHA/HORA	Momento de la medición

Tabla CONZ.1

La tabla CONC.1 muestra la concentración analizada de la muestra como se introdujo en el AAS.

Columna	Descripción
N.º	Número en la sucesión de análisis
NOMBRE	Nombre de la muestra
LÍNEA	Línea de elementos
UNIDAD	Unidad de concentración
CONC.1	Concentración analizada de la muestra
SD	Desviación del estándar de la Conc. 1 (estadística promedio)
RSD%	Desviación relativa del estándar de la Conc. 1 (estadística promedio)
R	Rango de la Conc. 1 (estadística promedio)
R%	Rango relativo de la Conc. 1 (estadística promedio)
R. CONF.	Rango de confianza
COM.	Comentarios (→"Esquema sobre las marcas de la indicación de valores" p. 202)
VF	Factor de dilución en caso de exceso de concentración Cuando se excede la concentración, se puede establecer una dilución automática en el método a través del cargador de muestras (→ "Cargador de muestras para técnica de llama e hidruro/HydrEA" p. 31 y "Cargador de muestras para la técnica de tubo de grafito (analítica de soluciones)" p. 34). El factor de dilución de esta dilución automática con el cargador de muestras se tendrá en cuenta al calcular la CONC.1.
ABS.	Promedio de las absorbancias individuales medidas En la analítica de sólidos: absorbancia estándar
SD (ABS.)	Desviación del estándar de la absorbancia (estadística promedio)
FECHA/HORA	Momento de la medición
VALORES INDIVIDUALES ABS. (ABS.)	Valores individuales de las mediciones de absorbancia (o de emisión)

Tabla Conc.2

La tabla CONC.2 muestra la concentración de la muestra original. Al calcular la CONC.2 se tendrán en cuenta los datos de información de las muestras (véase debajo la tabla ID DE MUESTRAS):

- Dilución previa
- Pesar sustancias sólidas y volumen de disoluciones
- Factor de conversión para otras unidades

Columna	Descripción
N.º	Número en la sucesión de análisis

NOMBRE	Nombre de la muestra
LÍNEA	Línea de elementos
UNIDAD	Unidad de concentración
CONC.2	Concentración de la muestra original teniendo en cuenta los datos de información de la muestra
SD	Desviación del estándar de la Conc. 2 (estadística promedio)
RSD%	Desviación relativa del estándar de la Conc. 2 (estadística promedio)
R. CONF.	Rango de confianza de la Conc. 2
COM.	Comentarios (→ "Esquema sobre las marcas de la indicación de valores" p. 202)
ABS.	Valor de absorbancia En la analítica de sólidos: absorbancia estándar
SD (ABS.)	Desviación del estándar de la absorbancia (estadística promedio)
R (ABS.)	Rango de la absorbancia (estadística promedio)
FECHA/HORA	Momento de la medición
VALORES INDIVIDUALES ABS. (ABS.)	Valores individuales de la medición de absorbancia (o de emisión)

Tabla Result. QC

En la pestaña Result. QC aparecerán los resultados de las muestras QC: el valor teórico y el valor real de la concentración, tasas de recuperación (no para blancos) y reacciones por desviaciones posibles (todos los tipos excepto el blanco).

Columna	Descripción	
N.º	Número en la sucesión de análisis	
NOMBRE	Nombre de la muestra	
LÍNEA	Línea de elementos	
QC (PARA FUNCIONES DE CALIBRACION)	R ² (adj.)	
	Rampa	
	Conc. caract. – Concentración característica	
QC (PARA MUESTRAS QC, NO PARA BLANCOS QC)	Conc.1	
	Valor teórico	
	TR	Tasa de recuperación Con muestras QC y est. QC se determina la tasa de recuperación de la concentración. Con stock QC, tendencia QC y matriz QC se calcula la tasa de recuperación del aumento de concentración producido por la adición.
QC (PARA LIMITE DE DETECCION EN VACIO)	SD	Desviación del estándar de las mediciones en vacío
	Lím. detecc.	límite de detección
	Lím. deter.	límite de determinación
ABS.	Promedio de las absorbancias individuales medidas En la analítica de sólidos: absorbancia estándar	
SD	Desviación del estándar de la absorbancia (estadística promedio)	

FECHA/HORA	Momento de la medición
VALORES INDIVIDUALES ABS. (ABS.)	Valores individuales de la medición de absorbancia

Tabla ERROR Si surgen errores a lo largo de la medición, las mediciones correspondientes se marcarán entonces en rojo en todas las tablas. En la tabla ERROR se documentará el error de medición surgido de forma escrita.

Tabla VALORES INDIVIDUALES La tabla VALORES INDIVIDUALES contiene los valores individuales medidos de la absorbancia.

Tabla ID DE MUESTRAS La tabla ID de muestras contiene los datos de información de las muestras (→ "Datos de información de las muestras" p. 65).

Columna	Descripción
N.º	Número en la sucesión de análisis
NOMBRE	Nombre de la muestra
LÍNEA	Línea de elementos
POS.	Posición de la muestra en el cargador de muestras
F. DILUC. PREV.	Factor de dilución previo. Factor con el que se diluyó la muestra original antes de introducirla en el cargador de muestras o, en el caso de trabajo sin cargador de muestras, antes de introducirla en el espectrómetro. El factor es necesario para calcular la concentración de la muestra original (CONC.2)
PESO NETO [g]	Sólo para la analítica de soluciones Peso neto en gramos Masa de la muestra original que se transformó en solución en el tratamiento de la muestra (en g). La masa es necesaria para calcular la concentración de la muestra original (CONC.2).
VOL. [mL]	Volumen del disolvente en el que se diluyó la pesada actual (en mL). El valor es necesario para calcular la concentración de la muestra original (CONC.2).
NOMBRE (2)	Nombre adicional de la muestra
F. DILUC. AS	Factor de dilución del cargador de muestras.
CORR. BLANCO	Corrección del blanco. OFF No se realizó ninguna corrección del blanco ON Para calcular la concentración de la muestra original se sustrajo el último blanco medido en la secuencia.

Tabla DEFINIDO POR USUARIO En la tabla DEFINIDO POR USUARIO usted puede seleccionar los parámetros para la salida de resultados y su orden en la tabla.

1. Haga clic en el botón [SELECCIONAR COLUMNAS] en la esquina inferior derecha de la tabla.
2. En la ventana SELECCIONAR COLUMNAS, marque los parámetros deseados con un clic del ratón.

3. Para modificar el orden en la visualización, marque el parámetro cuya posición desea cambiar y desplácelo en la tabla con las teclas  y . Si se han marcado varios parámetros simultáneamente, estos se desplazarán en bloque.
4. Al regresar a la ventana principal se mostrarán los resultados. Puede cambiar el ancho de las columnas de la tabla al colocar el puntero del ratón sobre la línea en la cabecera de la tabla (el puntero se transforma en una flecha doble) y, mientras mantiene presionado el botón del ratón, desplazar la columna hasta alcanzar el ancho deseado.

Nota:

El ancho de la columna se almacena en esta pantalla. En otras tablas de la ventana principal, los cambios en el ancho de las columnas se restablecen al abandonar la tabla.

6.7.4 Pestaña VISIÓN GENERAL

En la pestaña VISION GENERAL se resumen los resultados del análisis. En ella se pueden seleccionar distintas ediciones:

- Conc.1 – concentración 1
- Conc.2 – concentración 2
- Abs.(RSD%/R%) – absorbancia (desviación relativa del estándar o rango relativo)
- Lím. detecc. – Límite de detección
- Lím. deter. – Límite de determinación
- T. recup. (valor teórico) – Tasa de recuperación (valor teórico)
- R2(adj) – Correlación de la curva de calibración

Al activar las casillas de control, se pueden visualizar los siguientes tipos de muestras:

- Muestra
- Muestras QC
- Cal. est.
- Otros

Con  se abre la ventana VISUALIZACION PREVIA DE LA IMPRESION en la que puede iniciar la impresión después de especificar las líneas y los parámetros que se van a imprimir. Además de imprimir con la impresora conectada, puede guardar los datos como archivos TXT, HTML o PDF y presentarlos con la aplicación correspondiente (→ "Impresión en ASpect CS" p. 166).

6.7.5 Pestaña SÓLIDO

En la pestaña se registrará la sucesión de las mediciones individuales del análisis de sólidos.

La sucesión de mediciones de muestras y calibración establecida en la secuencia se dividirá en mediciones individuales y se mostrará e indicará su peso neto, tara y estado de dosificación (→ "Análítica de sólidos con técnica de tubo de grafito" p. 92).

6.8 Gestionar resultados del análisis

Abrir archivo de resultados

Un archivo de resultados se puede abrir para una nueva vista.

Si en un cálculo nuevo hay que tener en cuenta también datos de información de las muestras, p. ej. nombres de las muestras, factores de dilución, etc., hay que extraer entonces la información de la muestra al cargar el archivo. La información de las muestras está disponible en la ventana ID DE MUESTRAS (→ "Datos de información de las muestras" p. 65).

Para efectuar una función de calibración, los parámetros del método tienen que estar guardados en el archivo de resultados. Los parámetros de método se cargarán al abrir la función de calibración y se pueden ver y editar en la ventana METODO.

Sólo se puede acceder a los espectros lineales cuando con el archivo de resultado se guardó también un archivo con los espectros.

1. Abra con el comando ARCHIVO ► ABRIR ARCHIVO DE RESULTADOS la ventana estándar ABRIR.

2. Seleccione el archivo de resultados.

Se abrirá la ventana CARGAR RESULTADOS. Además de los nombres de archivo, aquí se editarán el nombre y número de los equipos, la técnica de análisis utilizada, la versión del software y la descripción opcional.

3. Si en fases de trabajo posteriores necesita los datos de información de las muestras, active el campo de control EXTRAER INFORMACION DE MUESTRAS.

4. Confirme la selección con O.K.

✓ El archivo de resultados se cargará y se mostrará en la ventana de resultados.



Nota

El nombre del archivo de resultados actualmente cargado aparece en el renglón de estado del ASpect CS.

Borrar la lista de resultados de la vista

- La lista de resultados se borra de la vista con el comando PROCESAR ►/ BORRAR LISTA DE RESULTADOS.



Nota

Una secuencia transmitida se mantiene en las ventanas de proceso y resultado y se seguirá mostrando.

Imprimir protocolo de resultados

El contenido del protocolo de resultados se establecerá en la ventana DATOS / PROTOCOLO (→ "Impresión en ASpect CS"

"Impresión en ASpect CS" p. 166). Los elementos clasificados se agrupan en un archivo de protocolo y se pueden guardar y volver a cargar.

1. Inicie la impresión del protocolo de resultados con el comando ARCHIVO ► IMPRIMIR ► PROTOCOLO.

Se abrirá la ventana DATOS / PROTOCOLO.

2. Realice los ajustes necesarios y pulse al final [IMPRIMIR].

6.9 Detalles de las muestras y espectros

Para cada medición en la ventana de resultados se pueden mostrar los valores individuales de la medición y, si se guardaron con ella, también los espectros en la ventana VALORES INDIVIDUALES DE MUESTRAS.



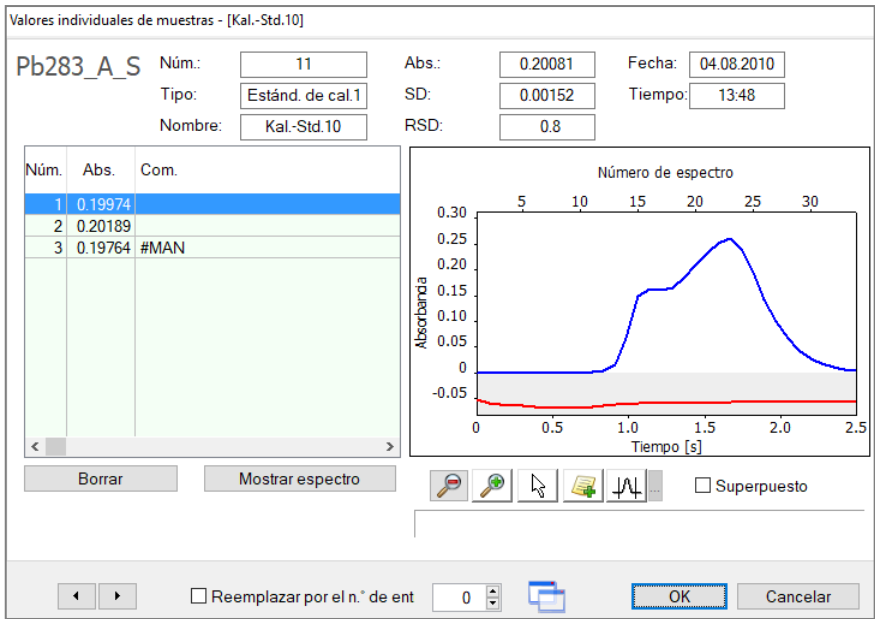
Nota

Puede establecer el almacenamiento de los espectros en la ventana METODO / EVALUACION (→ "Pestaña Salida: vista de la pantalla, impresión y contenidos" p. 58).

- Abra la ventana VALORES INDIVIDUALES DE MUESTRAS haciendo doble clic en el renglón de muestra correspondiente en la tabla de resultados.

Si no, también puede hacer clic con el botón derecho en el renglón de la tabla de resultados. En el menú contextual que se abre, haga clic en RESULTADOS DETALLADOS o marque el renglón de la muestra y seleccione el comando VISTA ► RESULTADOS DETALLADOS.

6.9.1 Mostrar detalles de los valores individuales de las muestras



Ventana VALORES INDIVIDUALES DE MUESTRAS

Indicaciones para la muestra

Campo	Descripción
Línea	Línea de elemento analizada
NÚM.	Número de la medición en la tabla de resultados
TIPO	Tipo de muestra
NOMBRE	Nombre de la muestra
ABS. /EM.	Valor de absorbancia (valor de emisión) (mediado por todos los valores individuales)

Indicación/Borrar los valores individuales

SD	Desviación del estándar (estadística promedio). La indicación se realiza independientemente del método de estadística seleccionado para la medición (promedio/mediana).
RSD	Desviación relativa del estándar (estadística promedio). La indicación se realiza independientemente del método de estadística seleccionado para la medición (promedio/mediana).
FECHA / HORA	Fecha y hora de la medición señalada en la tabla

Los valores calculados de las muestras se mostrarán en la tabla.

Columna	Descripción
N.º	Número del valor individual en la medición de las muestras
PESO NETO [MG]	En la analítica de sólidos: Peso neto de la muestras individuales
ABS.	Absorbancia calculada del valor individual En la analítica de sólidos: absorbancia estándar
COM.	NINGUNO El valor individual entra en el cálculo del promedio de la muestra. #MAN. El valor se extrajo manualmente del cálculo del valor de la muestra. #CORR. El valor se descartó automáticamente del cálculo del valor de la muestra debido a la prueba de valores erráticos Grubbs.

Opción / Botón	Descripción
[BORRAR]/[REACT.]	Extraer el valor individual de la muestra del cálculo de promedio o reactivar para el cálculo.
[MOSTRAR ESPECTRO]	Sólo cuando los espectros individuales se guardaron con la medición y el MODO CIENTÍFICO (comando EXTRAS ► / MODO CIENTÍFICO) está activado. Visualización de los espectros lineales medidos, dependientes de la longitud de onda, de los que resulta el valor individual de las muestras.
[SUPERPUESTO]	Los espectros individuales se muestran superpuestos en el gráfico. El espectro individual marcado se representa en negrita.
SUSTITUIR POR ENTRADA	Sólo para estándares de calibración La muestra actual debe ser sustituida por la muestra en la posición No. de la tabla de resultados al recalcular.
	No aplica para la técnica de llama Determinar límites de integración de la señal (ver en "Redefinir límites de integración")
	Cambiar entre las líneas de muestras individuales y de una muestra a la siguiente en la tabla de resultados.

En el gráfico a la derecha de la tabla se representa el curso de la señal y, para la técnica de tubo de grafito, también el curso del fondo inespecífico del valor individual

correspondiente marcado a lo largo del tiempo. El número de los puntos de medición corresponde al número de los espectros medidos. Este depende del tiempo de medición y se determina de forma específica en la ventana METODO / LINEAS para cada línea de elemento (→"Pestaña LINEAS: seleccionar líneas de elementos" p. 19). Los rangos de señal que se encuentran fuera del rango de integración se muestran sombreados en color gris. Los rangos en los que los espectros contienen estructuras específicas fuertes se muestran en amarillo en el procedimiento de corrección CON REFERENCIA. En dicho caso, compruebe la línea básica espectral con ayuda del botón [MOSTRAR ESPECTRO].

Descartar valores individuales de muestras

Se puede descartar manualmente un valor individual del cálculo del promedio de la muestra.

1. Señale el valor individual que vaya a descartar en la tabla.
2. Desactive con [BORRAR] el valor para el cálculo del promedio de la muestra en un nuevo cálculo de los resultados.
3. Vuelva a incluir en el cálculo el valor individual señalado con [REACT.].



Nota

Con la prueba de valores erráticos Grubbs se pueden buscar y eliminar automáticamente, durante el análisis, valores erráticos bajo los valores individuales.

Redefinir límites de integración

En el análisis simultáneo de varias líneas de elementos, los parámetros de análisis de la línea principal se tomarán en el método para las líneas adicionales. En la evaluación integral de señales (técnica de tubo de grafito) es recomendable adaptar los límites de integración de las líneas adicionales al curso real del pico:

1. Active  y marque en el gráfico el momento del comienzo de la integración con un clic del ratón.
2. Haga clic en la flecha , seleccione la opción DEFINIR FINAL DE INTEGRACION y marque después el final de la integración en el gráfico.
3. Con Adoptar los valores en el método actual usted transfiere los valores al método actual (ventana METODO / EVALUACION columnas LIMITES DE INTEGRACION).
4. Para aplicar los límites de integración seleccionados a los resultados actuales, calcule de nuevo los datos de resultados. Los rangos de señal que se encuentran fuera del rango de integración se muestran sombreados en color gris en la representación de señal.

6.9.2 Mostrar espectros

Esta función sólo está disponible cuando los espectros individuales se guardaron con la medición y el modo científico (comando EXTRAS ► MODO CIENTÍFICO) está activado.

Los espectros lineales de un valor individual se abren en la ventana VALORES INDIVIDUALES DE MUESTRAS.

1. Señale el valor individual en la tabla de la ventana VALORES INDIVIDUALES DE MUESTRAS.
2. Mediante [MOSTRAR ESPECTRO], abra la visualización de espectros.
Se abrirá la ventana ESPECTROS.

En la ventana ESPECTROS puede ejecutar las siguientes funciones:

- visualizar los espectros individuales
- modificar la corrección de fondo
- visualizar el grupo de espectros en una presentación 3D
- realizar una corrección de longitud de onda (→ "Corregir la posición de pico" p. 114).

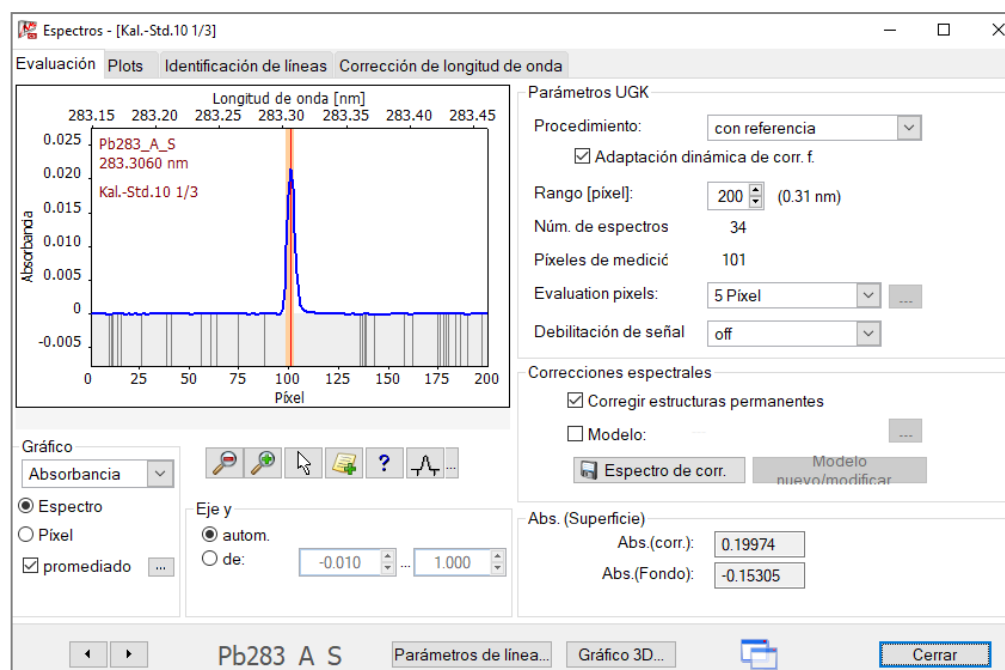
La corrección de longitud de onda en la ventana ESPECTROS – CORRECCION DE LONGITUD DE ONDA se describe en la sección "Corregir la posición de pico" p. 114 .

6.9.2.1 Mostrar espectros individuales y modificar la corrección de fondo

En la ventana ESPECTROS / EVALUACION se representarán los valores individuales de las muestras con distintas visualizaciones. En la secuencia del registro del valor de medición con línea CCD se origina un grupo de espectros tridimensionales de modificaciones de señal en base al rango de longitud de onda y al tiempo. A través del grupo de espectros, se establecerán secciones y así se podrán observar las curvas de medición en dos dimensiones:

- en una longitud de onda fija (píxeles) a través del tiempo
- en un momento determinado a través del rango de longitudes de onda.

Ambas representaciones se pueden visualizar en el gráfico.



Ventana ESPECTROS / EVALUACION: indicación de los espectros individuales y corrección de fondo

Representación gráfica

En la representación sobre el rango de longitud de onda, la abscisa será PIXEL. Tres valores de longitud de onda muestran el límite superior e inferior del rango espectral medido, al igual que la posición del píxel de medición (picos de la línea de elemento). Los píxeles de referencia para la corrección de fondo están marcados con líneas grises. El píxel de medición está resaltado con una línea roja continua. El rango del píxel de evaluación está marcado en rojo.

Al usar los procedimientos de corrección de fondo IBC e IBC-m se bloquean automáticamente los rangos con estructuras permanentes (bandas de absorción en el

espectro de referencia) con corrección desactivada de estructuras permanentes. Dichos rangos se muestran marcados en gris en la representación de espectros.

Opción	Descripción	
LISTA DE SELECCION PARA LA VISUALIZACION DE GRAFICOS	ABSORBANCIA	Espectro de absorbancia
	ENERGIA REFERENCIA	Energía del espectro de referencia (sólo promedio)
	ENERGIA MUESTRA	Energía del espectro de la muestra
ESPECTRO	Mostrar el recorrido espectral de una medición seleccionada sobre la longitud de onda. Seleccione en el campo con las flechas el número de la medición que desea visualizar. PROMEDIADO Cuando está activado se mostrará el recorrido espectral promediado sobre todas las mediciones. Con el botón [...] se abrirá una ventana en la que se limitará el rango de los espectros de los que se va a calcular un promedio. En este caso hay que indicar el espectro del principio y del final del rango del que se va a calcular el promedio.	
PÍXEL	Mostrar el recorrido espectral en un píxel seleccionado a través del tiempo. Seleccione en el campo con las flechas el número del píxel. EFFECTIVO Se mostrará la integral sobre el píxel de evaluación.	
	Aumento del gráfico Después de hacer clic con el botón izquierdo del ratón presionado, seleccione el área espectral que desea ampliar.	
	Devolver al tamaño original.	
	Activa el modo de texto. Al mantener pulsado el botón izquierdo del ratón es posible seleccionar un área de una ventana con la que se puede añadir texto al gráfico. Mediante un clic doble sobre un texto existente se abre la ventana para editar o borrar el texto. Con Ctrl+botón derecho del ratón, se puede desplazar el texto existente.	
	Activa el modo de marcación en representaciones del curso de las señales o espectros. Con el botón izquierdo del ratón se seleccionarán puntos de medición. Los valores del punto de medición seleccionado se mostrarán en el campo de salida debajo de los botones.	

	Fijar o borrar los puntos de referencia para la corrección de fondo. Al pasar por encima del gráfico de espectros con el ratón, se mostrará un cursor verde. Los puntos para la corrección de fondo se pueden establecer con el ratón. Si hace clic en un píxel ya seleccionado, borrará el punto para la corrección de fondo. Al arrastrar el ratón puede seleccionar rangos adyacentes al píxel. De este modo se borrarán de nuevo los rangos ya seleccionados. Al hacer clic en la flecha se abre la lista de función: MARCAR PUNTOS DE APOYO PARA CORRECCION DE FONDO Señala en la representación de espectros los puntos de referencia en el gráfico de espectros (marcas verdes). BORRAR TODOS LOS PUNTOS DE APOYO DE LA CORRECCION DE FONDO Borra todos los puntos de referencia seleccionados. MOSTRAR LISTA Edita una lista de los números de píxeles de los puntos de referencia seleccionados.
	Activa el modo de identificación de líneas. Al hacer clic o arrastrar con el ratón, se buscan líneas de elementos con la posición de longitud de onda seleccionada en una base de datos de líneas. El símbolo del elemento se muestra junto al puntero del ratón (→ "Identificación de líneas" p. 91).
	Mueve el cursor en 1 píxel o en fases del valor de medición por el gráfico. Emitir el dato para el punto de medición indicado en el campo bajo la flecha.
EJE Y	Escala del gráfico AUTO. Autoescala: el espectro se presentará con extensión óptima de las coordenadas. DE/HASTA Escala manual. Los límites de las coordenadas se mostrarán en los campos de abajo.

Modificar la corrección de fondo y los píxeles de evaluación

Para la corrección de fondo (UGK por sus siglas en alemán) se pueden seleccionar nuevos puntos de referencia. Los cambios resultantes de esta modificación en el curso de la señal se mostrarán de forma simultánea en el gráfico. El promedio de las muestras se calculará consecuentemente, si se requiere, o bien al mismo tiempo o con una gran cantidad de datos. Los píxeles de referencia nuevos que se encuentre se pueden añadir directamente al método abierto. De este modo se calculará para un nuevo método, la corrección de fondo ideal.

Área PARÁMETROS UGK

Opción	Descripción
PROCEDIMIENTO	Procedimiento utilizado en la corrección de fondo: CON REFERENCIA, SIN REFERENCIA o IBC (corrección iterativa de las líneas base).
NÚM. ESPECTROS	Número de mediciones del que se creó el valor individual de las muestras.
RANGO [PÍXEL]	El rango espectral entrante en la evaluación. Como máximo se pueden utilizar para la evaluación los espectros mediante el número guardado de píxeles. Al limitar el rango de evaluación, los píxeles a la izquierda y a la derecha del píxel de evaluación se repartirán simétricamente.

RANGE [NM]	Indicación del ancho del rango espectral que se utilizará para la evaluación. El rango depende del número de píxeles seleccionado.
PÍXELES DE MEDICIÓN	Indicación del píxel de medición. El píxel de medición es el píxel 101 en medio de la línea receptora.
EVAL. PÍXELES	Número de píxeles utilizados para la evaluación de la señal de medición. La integral se calcula sobre los valores de medición de este píxel, que representa el resultado de la medición.
ADAPTACION DINAMICA DE CORR. F.	Buscar el píxel de referencia automáticamente.

Área CORRECCIONES ESPECTRALES

Opción	Descripción
CORREGIR ESTRUCTURAS PERMANENTES	Corrección automática de las estructuras permanentes (sólo activo en procedimientos con la corrección de fondo "con referencia"). Las estructuras permanentes son estructuras espectrales que surgen en los espectros de muestras y de referencia, p. ej. bandas de absorción de los gases de la llama. El ajuste debe activarse cuando estas estructuras no se compensan totalmente.
MODELO	Selección de un modelo para la corrección espectral (→ "Utilización de espectros de corrección en ASpect CS" p. 205).

ABS. (PROMEDIO) / ABS. (SUPERFICIE)	Indicación del promedio de la muestra (Abs.(corr.)) Al utilizar la técnica de tubo de grafito, indicación adicional de la absorbancia de fondo (Abs.(Fondo).
--	---

Botones en la ventana
Espectros

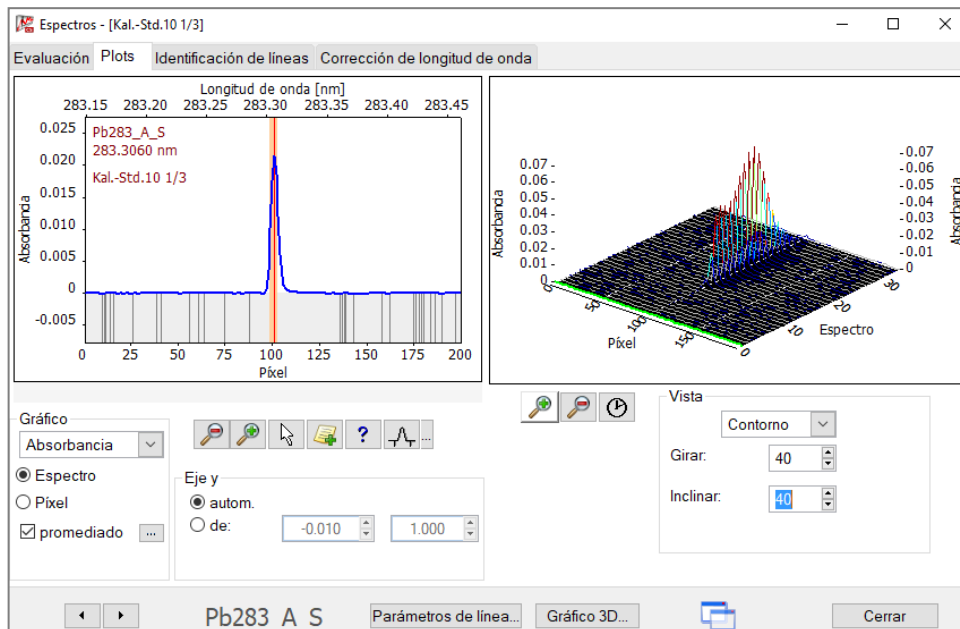
[PARÁMETROS DE LÍNEAS]	Cargar los parámetros de líneas para la corrección de fondo y la evaluación espectral desde el método o enviar al método.
[GRÁFICO 3D]	Abrir las gráficas de espectros en una ventana adicional.
	Cambiar entre las líneas de muestras individuales y de una muestra a la siguiente en la tabla de resultados (como en la ventana VALORES INDIVIDUALES DE MUESTRAS).

Cargar/enviar parámetros
de líneas

1. Haga clic en [PARAMETROS DE LINEAS] en la ventana ESPECTROS.
Se abrirá la ventana PARAMETROS DE LINEAS/EVALUACION.
2. Seleccione, en la tabla de líneas, la línea cuyos parámetros desea enviar al método o tomar del método.
3. Seleccione el tipo de manejo deseado.
En TRAER DE METODO/LINEA: se cargan los parámetros originales del método.
En COPIAR A MÉTODO/LÍNEA: actualiza los parámetros modificados.

6.9.2.2 Representación 3D de espectros de valores individuales de muestras

Los grupos de espectros de los valores individuales de las muestras se mostrarán en la ventana ESPECTROS / PLOTS.



Ventana ESPECTROS / PLOTS con representaciones 3D de espectros de valores de muestras individuales

El lado izquierdo de la pestaña PLOTS con los ajustes es idéntico al de la pestaña EVALUACION. En el lado izquierdo se mostrará el gráfico del grupo de espectros en tres dimensiones con inclinaciones variables.

El espectro/píxel seleccionado en el lado izquierdo se marcará en verde claro en la gráfica Plot.

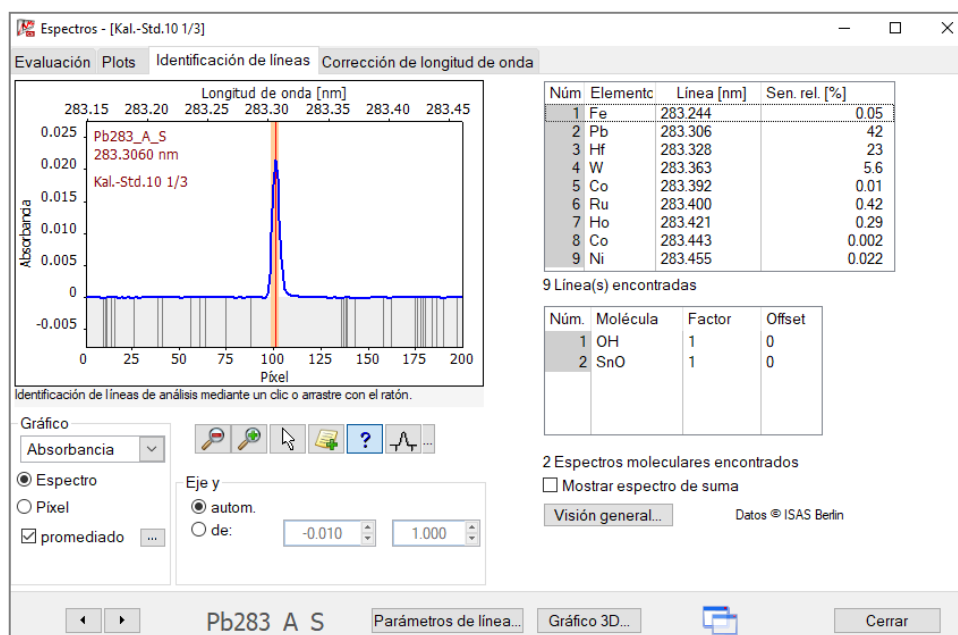


Gráfico del grupo de espectros con distintas velocidades desde MUY LENTO hasta RÁPIDO.

VISTA	3D	Representación en tres dimensiones El ángulo de reflexión se puede modificar con las flechas en los campos GIRAR e INCLINAR.
	2D	Representación en dos dimensiones de los espectros dependiendo de los píxeles.
	CONTORNO	Vista en planta en el grupo de espectros Las absorbancias del mismo tamaño están unidas por líneas continuas.

6.9.2.3 Identificación de líneas

Los picos de espectros y las bandas moleculares en los datos medidos son identificados de acuerdo con una base de datos de espectros y líneas.



Ventana ESPECTROS / IDENTIFICACION DE LINEAS

La lista superior muestra las entradas de la base de datos de líneas encontradas en el rango espectral actual. La selección de un renglón coloca el cursor del gráfico sobre la longitud de onda de la línea.

Al hacer clic o arrastrar con el ratón, se buscan líneas de elementos con la posición de longitud de onda seleccionada en la base de datos de líneas. El símbolo del elemento se muestra junto al puntero del ratón y la correspondiente entrada de la lista es marcada.

La lista inferior muestra las bandas moleculares encontradas en el rango espectral señalado. La selección de un renglón de la lista muestra el espectro molecular correspondiente. FACTOR multiplica el espectro mostrado por el valor indicado, OFFSET desplaza el espectro en proporción al valor. La opción MOSTRAR ESPECTROS DE SUMA activa una columna adicional para mostrar la suma de varios espectros. Con ello se pueden aclarar también espectros de fondo complejos.

6.10 Analítica de sólidos con técnica de tubo de grafito

En la analítica de sólidos, las muestras sólidas se colocan y atomizan en una plataforma de grafito en el tubo de grafito. No es necesaria la digestión de las muestras. En comparación con los ajustes para la analítica de soluciones, para la analítica de sólidos son necesarias otras preparaciones o especificaciones de muestras:

- Dosificar las muestras en las plataformas
- Pipetear los componentes líquidos sobre las plataformas de muestras
- Determinación del peso neto
- Limpieza de las plataformas de muestras por medio de quemado
- Si es el caso, determinación de la tara de las plataformas

Los trabajos preparatorios de determinación de pesos netos y carga de las plataformas de muestras pueden realizarse manualmente o de manera automatizada utilizando el

SSA 600. Al utilizar el SSA 600 con dosificación de líquidos, el cargador realiza también la dosificación de modificadores y estándares.

Si las acciones anteriores se han realizado antes del inicio de una secuencia, el desarrollo de la secuencia se lleva a cabo de forma automática y sin interrupciones.

6.10.1 Preparar muestras sólidas y medirlas

La preparación de muestras para la analítica de sólidos se lleva a cabo en la pestaña SOLIDO en la ventana principal. La pestaña SOLIDO muestra una lista con todas las mediciones que se van a ejecutar. Las mediciones de muestras y estándares configuradas en la secuencia son divididas aquí en mediciones individuales (series estadísticas) y se determina la distribución de las muestras en las plataformas.

6.10.1.1 Funciones de diálogo en la pestaña SOLIDO

ASPECT CS 2.2.1.1009 Tech: Horno de grafito sólido

Archivo Procesar Vista Desarrollo de métodos Rutina Sistema extras ?

Mét: "NWG Optimierung" Sec: "Desconocido" Muestra: Desconocido

analitykjena

Secuencia/Resultados Secuencia Resultados Visión general **Sólido**

Núm.	Sec. Renglón	Pos.	Tipo	Nombre	Línea	#	Peso neto [mg]	Est. Mod.
1	1	1	Muestra	Muestra 1	Cu324	1	2.049	*
2	1	2	Muestra	Muestra 1	Cu324	2	2.056	*
3	1	3	Muestra	Muestra 1	Cu324	3		
4	2	4	Muestra	Muestra 2	Cu324	1		
5	2	5	Muestra	Muestra 2	Cu324	2		
6	2	6	Muestra	Muestra 2	Cu324	3		
7	3	7	Muestra	Muestra 3	Cu324	1		
8	3	8	Muestra	Muestra 3	Cu324	2		
9	3	9	Muestra	Muestra 3	Cu324	3		
10	4	10	Muestra	Muestra 4	Cu324	1		
11	4	11	Muestra	Muestra 4	Cu324	2		
12	4	12	Muestra	Muestra 4	Cu324	3		
13	5	13	Muestra	Muestra 5	Cu324	1		
14	5	14	Muestra	Muestra 5	Cu324	2		
15	5	15	Muestra	Muestra 5	Cu324	3		
16	6	16	Muestra	Muestra 6	Cu324	1		
17	6	17	Muestra	Muestra 6	Cu324	2		
18	6	18	Muestra	Muestra 6	Cu324	3		
19	7	19	Muestra	Muestra 7	Cu324	1		
20	7	20	Muestra	Muestra 7	Cu324	2		
21	7	21	Muestra	Muestra 7	Cu324	3		
22	8	22	Muestra	Muestra 8	Cu324	1		
23	8	23	Muestra	Muestra 8	Cu324	2		
24	8	24	Muestra	Muestra 8	Cu324	3		
25	9	25	Muestra	Muestra 9	Cu324	1		
26	9	26	Muestra	Muestra 9	Cu324	2		
27	9	27	Muestra	Muestra 9	Cu324	3		
28	10	28	Muestra	Muestra10	Cu324	1		
29	10	29	Muestra	Muestra10	Cu324	2		
30	10	30	Muestra	Muestra10	Cu324	3		

Medir región(es) Preparar medición a partir

Borrar entradas Medir de nuevo valores individuales 1

Preparar muestras

Tara Dosificar Pesar

Cargar/Guardar Est./Mod. Preparar

Reset atomizer drive

24.04.2018 15:27

Ventana principal con pestaña SOLIDO

Elementos de la tabla

Columna	Descripción
N.º	Número de la medición individual.
SEC./REGLÓN	Número del renglón en la secuencia

Pos.	Posiciones de la plataforma de muestras en el plato del SSA 600. Con el modo de un plato: de 1 a 42, con el modo de dos platos: de 1 a 84. Nota: las posiciones se ajustan internamente en el programa. Hay que cargar las plataformas con las muestras según las posiciones predeterminadas.
TIPO	Tipo de muestra que ha de colocarse en la plataforma o ya se ha colocado.
NOMBRE	Nombre de la muestra.
LÍNEA	Línea de análisis
#	Número de la serie estadística
PESO NETO (MG)	Masa de la muestra Si en la columna aparece la indicación "-----", quiere decir que no hay que pesar la muestra y que esta sólo contiene líquidos (p. ej., estándar líquido). Nota: Antes determinar el peso neto, es necesario determinar la tara de la plataforma de muestras.
TARA (MG)	Masa de la plataforma vacía. Para muestras que no se deben pesar aparece la indicación "-----".
Dos.	Cuando está marcado con "*", quiere decir que se ha dosificado muestra en la plataforma.
EST./MOD.	Cuando está marcado con "*", quiere decir que se ha realizado la dosificación de componentes líquidos (estándares o modificadores) en la plataforma.
PREPARAR	Solo si se ha establecido una preparación térmica en el método. Si está marcado con "*", se llevó a cabo una preparación térmica para la plataforma.

Los siguientes valores se pueden introducir, si se conocen, directamente en la tabla de muestras:

- Peso neto: cuando se realizó la preparación de las muestras en una báscula externa.
- Tara
- Señalización para plataforma de muestras ya dosificada.
- Marca para los modificadores pipeteados
- Marca para la preparación térmica

Botones para la preparación de muestras

Botón	Descripción
[TARA]	Determinar el peso de las plataformas vacías para posiciones de plato marcadas. Para ello se transportarán las plataformas a la báscula y después de pesarlas, a sus posiciones. El peso determinado se introducirá en la columna TARA.

[DOSIFICAR]	Traer consecutivamente las plataformas de las posiciones señaladas a la posición de dosificación. Aparecerá la ventana de dosificación con las indicaciones acerca de qué muestra que hay que dosificar. Dependiendo de las opciones establecidas se pueden realizar, antes y después, otras preparaciones para las posiciones señaladas. Si ya existen indicaciones en la tabla, se omitirán las preparaciones correspondientes. Hay que mantener necesariamente la secuencia Tara - Dosificar - Pesar - (Dosificar) - (Pesar) - Pipeteo mod./est. CON FUNCION DE TARA Determinación del peso de la plataforma vacía anteriormente. CON PESAJE Después de la dosificación se pesa la muestra dosificada. CON PIPETEO MOD/EST. Después del pesaje se llevará la plataforma a la dosificación líquida. Si en la ventana METODO / ALIMENTACION DE MUESTRAS está configurada la opción PESAR CON CONFIRMACION (→ "Cargador de muestras para la técnica de tubo de grafito (analítica de sólidos)" p. 37), las fases "Dosificar" y "Pesar" se pueden repetir todas las veces que desee. Si se han establecido las tres opciones, se puede realizar en el transcurso una preparación de muestras completa. Las plataformas que permanecen cargadas al final en el plato están completamente preparadas para el análisis. Si una de las preparaciones no se realiza, se solicitará la fase correspondiente en el transcurso del análisis.
[PESAR]	Pesar las plataformas dosificadas
[CARGAR/GUARDAR]	Guardar y volver a cargar los datos de dosificación y pesada de los renglones seleccionados. Si se modifica la secuencia o el método, la tabla de muestras se volverá a elaborar en la pestaña SÓLIDOS. Así se pierden las entradas existentes. Con la función [CARGAR/GUARDAR] puede rescatar los datos y recuperarlos.
[EST./MOD.]	Traer consecutivamente las plataformas de las posiciones señaladas a la posición de dosificación para dosificar los componentes líquidos del análisis (estándares líquidos, modificadores). Aparece el cuadro de dosificación para la dosificación líquida. Allí se mostrarán los líquidos y los volúmenes que se van a dosificar.
[PREPARAR]	Quemar las plataformas de la posición señalada. Las plataformas se introducirán en el horno, el programa de calentamiento se pondrá en marcha y se volverán a transportar las plataformas al plato después del enfriamiento del horno. En el tratamiento térmico se pipetea primero los modificadores correspondientes en las plataformas. Después, el programa del horno se pondrá en marcha hasta la fase "E/P". Después del enfriamiento del horno, las plataformas son transportadas de regreso a los platos. Si se ha señalado la opción CON FUNCION DE TARA, las plataformas se pesarán a continuación y el peso se introducirá en la columna TARA.

Volver a medir muestras/Corregir entradas de peso neto

Botón	Descripción
[MEDIR RENGLÓN(ES)]	Volver a determinar un elemento en una muestra o medir individualmente por líneas una secuencia en el desarrollo del método (→ "Volver a medir las muestras de un análisis de sólidos" p. 98). Nota: En la medición por líneas de la sucesión de muestras, el comienzo debe realizarse siempre con la serie estadística 1 o con la siguiente serie de la última serie estadística medida.
[PREPARAR MEDICIÓN]	Crea la pestaña SOLIDO actual de la serie estadística que se va a medir a partir de las entradas de la tabla de resultados marcados para la medición. Posteriormente, dichas plataformas de muestras pueden ser dosificadas y pesadas según corresponda.
[MEDIR DE NUEVO VALORES INDIVIDUALES]	Iniciar medición de las muestras seleccionadas con [PREPARAR MEDICIÓN].
[BORRAR ENTRADAS]	En los renglones señalados de la tabla se borrarán todas las entradas de las posiciones seleccionadas en las columnas a partir de PESO NETO [MG] y a su derecha.

6.10.1.2 Medir muestras sólidas

Análisis de sólidos manual

Si las muestras han sido colocadas en el tubo de grafito mediante el cargador de muestras manual SSA 6(z), el peso debe ser determinado en una báscula separada. En tal caso, los pesos deben ser indicados directamente en la pestaña SOLIDO.

Análisis automático de sólidos con muestras no sensibles al tiempo

Para muestras no sensibles al tiempo se pueden agrupar muchas fases de preparación. El procesamiento de muestras no sensibles al tiempo es indicado mediante la desactivación de la opción PROCESO PARA MUESTRAS SENSIBLES AL TIEMPO en la ventana METODO / ALIMENTACION DE MUESTRAS (→ "Cargador de muestras para la técnica de tubo de grafito (analítica de sólidos)" p. 37).

Al utilizar el SSA 600 con dosificación líquida automática, la dosificación de modificadores y estándares puede realizarse durante el procesamiento de la secuencia y no hay que prepararla manualmente. Se pueden posicionar hasta cuatro estándares y tres modificadores en el SSA 600. Si se necesitan más estándares o modificadores, hay que pipetearlos manualmente. Con el tratamiento térmico previo, los modificadores son colocados de manera automática en las plataformas utilizando la unidad de dosificación líquida y preparados a continuación para el análisis en el horno de tubo de grafito.

Un análisis automático sin intervención del usuario requiere una plataforma de muestra para cada medición individual:

Número total de plataformas de muestra = Número de las muestras de análisis x Número de las líneas de análisis x Número de medición de la muestra en una serie estadística.

Si el número de muestras supera el número de plataformas establecido en el método, se volverán a asignar las plataformas según el procesamiento.

1. Cree un método y una secuencia.
2. Cambie a la pestaña SOLIDO en la ventana principal.

En la columna POS. se mostrará la asignación de la muestra en los platos de muestras. Esta asignación se calcula internamente en el programa y no se puede modificar.

3. Comience el procesamiento de la secuencia con un clic en .
4. Prepare las plataformas de muestras de acuerdo con las indicaciones del programa. Coloque en ellas las muestras y pipetee los componentes líquidos, si es necesario.
Si todas las muestras están preparadas o si ha sido ocupado el número de plataformas de muestras definido en el método, se inicia la medición.
5. Si después del primer ciclo de medición quedan aún muestras restantes, marque con el ratón los renglones de las muestras correspondientes en la secuencia. Para marcar varios renglones al mismo tiempo, mantenga presionada la tecla Ctrl.
6. Continúe la medición con  y agregue los resultados a los existentes activando la opción ADJUNTAR ARCHIVO en la ventana INICIAR MEDICION SECUENCIA.
7. Prepare de nuevo las plataformas de muestras de acuerdo con las indicaciones del programa. Después, la medición se inicia automáticamente.
8. Continúe con el paso (6) hasta que hayan sido procesadas todas las muestras.

Análisis automático de sólidos con muestras sensibles al tiempo

Para las muestras que se volatizan fácilmente o que se "escurren" de la plataforma debido a la alta adhesión y humedecen el borde y el asa de la plataforma, se requiere un procesamiento rápido de la plataforma después de la aplicación de las muestras. El análisis de dichas muestras es indicado mediante la activación de la opción PROCESO PARA MUESTRAS SENSIBLES AL TIEMPO en la ventana METODO / ALIMENTACION DE MUESTRAS (→ "Cargador de muestras para la técnica de tubo de grafito (analítica de sólidos)" p. 37).

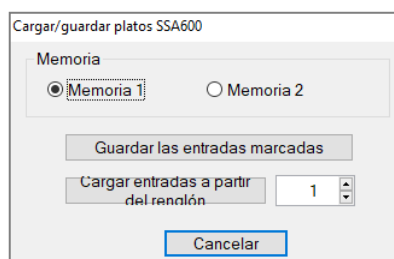
1. Cree un método y una secuencia.
2. Comience el procesamiento de la secuencia con un clic en .
3. Siga las indicaciones en la pantalla para la preparación de muestras. Se preparará y medirá una muestra. Después se visualiza un mensaje en el que se pide la preparación de la siguiente plataforma de muestra, hasta que todas las muestras hayan sido procesadas.

El proceso de medición para muestras sensibles al tiempo requiere la presencia permanente del usuario.

6.10.2 Guardar los datos de las muestras ya preparadas

Si se realiza algún cambio en la secuencia o en el método, la tabla de sólidos se volverá a configurar y se efectuará de nuevo la distribución de las muestras en las plataformas. Así se pierden los datos de peso existentes. Para evitarlo puede guardar los datos temporalmente. Para ello dispone de dos memorias para conjuntos relacionados.

1. Marcar las muestras ya preparadas.
Las muestras deben estar en un conjunto relacionado.
2. Con [CARGAR/GUARDAR], abra la ventana CARGAR/GUARDAR PLATOS SSA600.



Ventana para guardar y cargar las entradas de la tabla de sustancias sólidas

3. Seleccionar una de las dos MEMORIAS.
4. Haga clic en [GUARDAR LAS ENTRADAS MARCADAS] y confirme el mensaje siguiente con [OK].
5. Salga de la ventana CARGAR/GUARDAR PLATOS SSA600 con [CERRAR].
6. Después de la reconstrucción de la tabla SOLIDOS, abra de nuevo la ventana CARGAR/GUARDAR PLATOS SSA600.
7. Seleccione la MEMORIA.
8. Introduzca en el cuadro de lista el número de renglón de la tabla SOLIDOS a partir del cual se debe introducir el conjunto de datos.
9. Haga clic en [CARGAR ENTRADAS A PARTIR DEL RENGLON] y confirme el mensaje siguiente con [CERRAR].
10. Salga de la ventana CARGAR/GUARDAR PLATOS SSA600 con [CERRAR].
El conjunto de datos se agregará en la tabla SOLIDOS a partir del renglón indicado.
11. Redistribuya, si fuera necesario, las plataformas del plato de muestras.

6.10.3 Volver a medir las muestras de un análisis de sólidos

En un análisis de sólidos, se pueden repetir tanto las mediciones individuales como también las mediciones para un elemento en una muestra.

Repetición de mediciones individuales

1. Cambie a la tabla RESULTADOS en la ventana principal
2. Abra con un doble clic en la muestra con el valor errático la ventana VALORES INDIVIDUALES DE MUESTRAS.
3. Señale el valor errático en la tabla.
4. Haga clic en [MARCAR PARA MEDIR].
5. Cierre la ventana VALORES INDIVIDUALES DE MUESTRAS.
6. Señale del mismo modo el resto de los valores erráticos de otras muestras.
7. Regrese a la tabla SOLIDOS.
8. Haga clic en [PREPARAR MEDICION].
Se crea la tabla SOLIDOS que se va a procesar.
9. Prepare las muestras para el análisis en base a la asignación de las plataformas.
10. Inicie la medición con [MEDIR DE NUEVO VALORES INDIVIDUALES].
En la ventana RESULTADOS se agregarán, al final de la tabla, los resultados de las muestras calculadas nuevamente en base a los valores erráticos medidos de nuevo.



Nota

Esto borrará los valores individuales y otras entradas existentes, pues la tabla será reestructurada. Si es necesario, los datos deben ser guardados previamente (→ "Guardar los datos de las muestras ya preparadas" p. 97).

Nueva determinación de un elemento de una muestra

En la tabla SOLIDOS marque todas las mediciones individuales del elemento de la muestra.

1. Haga clic en [MEDIR RENGLÓN(ES)]
2. Introduzca en la ventana COMIENZO MEDICION SECUENCIA un nombre de archivo nuevo o establezca que los datos se adjunten al archivo existente.
3. Inicie la medición con [OK].

Mida por renglones la tabla de sólidos (elaboración de métodos)

En la elaboración de métodos se puede procesar por renglones la tabla SOLIDOS.

1. En la tabla SOLIDOS, marque las mediciones individuales del elemento de la muestra.
2. Haga clic en [MEDIR RENGLÓN(ES)]
3. Introduzca en la ventana COMIENZO MEDICION SECUENCIA un nombre de archivo nuevo o establezca que los datos se adjunten al archivo existente.
4. Inicie la medición con [OK].



Nota

La medición de un elemento de una muestra debe iniciarse con la serie #1 o la serie siguiente a la serie estadística medida en la última ocasión.

6.11 Lavado del sistema

Las fases de lavado se inician, para los distintos sistemas, con el comando RUTINA ► LAVAR. Además las ventanas de técnicas y accesorios, como sistema de hidruro o cargador de muestras, contienen comandos de lavado.

Tecnología de llama

El cargador de muestras se sumerge en la solución de lavado y lava la cánula. Si se conecta un módulo de inyección como accesorio, éste se abrirá. De este modo se garantiza el lavado del recorrido de la muestra. Gracias a la bomba de lavado se suministrará siempre solución de lavado.

Técnica de hidruro/HydrEA

Lavar el sistema de hidruro con ácido (o si fuera necesario también con agente reductor). Los parámetros de lavado para el sistema de hidruro se establecen en el método (→ "Pestaña HIDRURO: especificar sistema de hidruro" p. 26).

7 Calibración

La calibración se lleva a cabo durante la medición de la muestra de acuerdo con los ajustes en la secuencia. Las curvas y funciones de calibración se pueden mostrar y editar después de la medición.

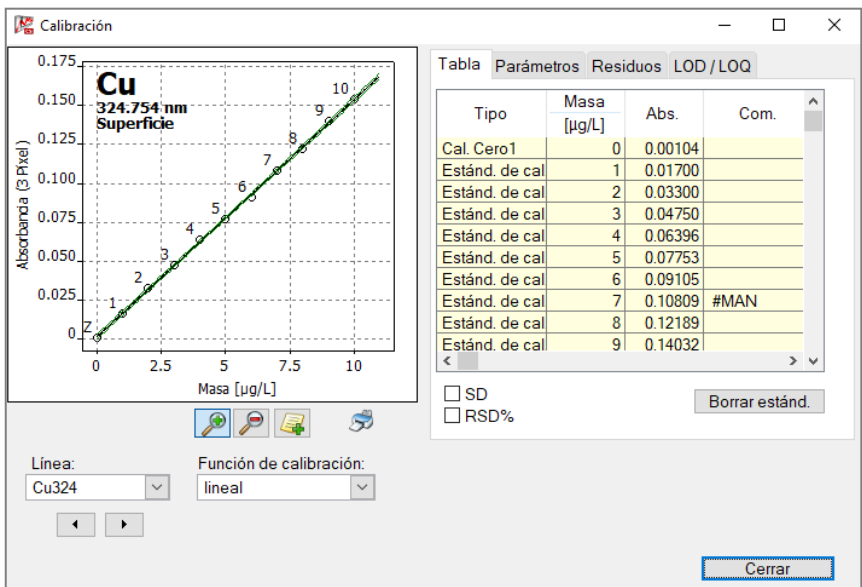
 Nota

Después de abrir los resultados guardados, sólo se puede visualizar la calibración cuando se guardaron los métodos con los resultados.

- Abra la ventana CALIBRACION con el comando DESARROLLO DE METODOS ► CALIBRACION o con el símbolo



La ventana CALIBRACION muestra la curva de calibración calculada (considerando los parámetros de curvas).



CALIBRACION

La ventana contiene la siguiente información:

- Representación gráfica de la curva de calibración.
- Tabla de calibración
- Parámetros
- Residuos
- Límite de detección y determinación

Campos de elección en la ventana Calibración

Campo	Descripción
LÍNEA	Seleccionar línea de elemento cuya calibración se mostrará.

FUNCIÓN DE CALIBRACIÓN	Indicación de la función de calibración utilizada (establecida en la ventana METODO / CALIB.). La función de calibración es específica para cada línea de elemento. La función se puede volver a elegir en el cuadro de lista y se vuelve a calcular la calibración.
ATENUACIÓN DE SEÑAL	Selección de un nivel para la atenuación de la señal (→ "Pestaña EVALUACION: rango espectral y correcciones de fondo" p. 40) Al seleccionar un nivel de atenuación de la señal se toma en cuenta solo una superficie de pico parcial del pico espectral para el cálculo de la señal. La función se utiliza para ampliar el rango de trabajo de la calibración (calibración de rango amplio). Si se selecciona DESACTIVADA no se realiza la atenuación.

7.1 Representación de la curva de calibración

En la representación gráfica se mostrarán los puntos de medición de la curva de calibración calculada, al igual que los residuos. Los números en los puntos de medición corresponden a los de la pestaña TABLA.

Identificaciones

Identificación	Descripción
Z	Cero. Valor de calibración cero.

Colores de los puntos de medición

Color	Descripción
Negro	Punto de medición normal
Gris claro	Borrado/valor errático (no incluido en el cálculo)
Azul	Sospecho de ser un valor errático (incluido en el cálculo)

Colores de las curvas

Color	Descripción
Negro	Curva de calibración en el rango de calibración válido
Azul	Curva de calibración fuera del rango de calibración válido
Verde	Límite superior e inferior del rango de pronóstico en el rango de calibración válido
Gris claro	Límite superior e inferior del rango de pronóstico fuera del rango de calibración válido



Nota

La posición de la banda de pronóstico depende de la seguridad estadística seleccionada y es un porcentaje de la "calidad" de la calibración, de la cual también depende la seguridad estadística de las mediciones de las muestras de análisis. La banda de pronóstico sirve además para establecer los puntos de calibración sospechosos de ser valores erráticos. La seguridad estadística se selecciona en la ventana METODO/ESTADISTICA (→ "Pestaña Estadística: definir la evaluación estadística" p. 50)

7.2 Indicación de los resultados de calibración

Edición de los valores de medición de los estándares de calibración: pestaña TABLA

En la ventana CALIBRACION / TABLA se indicarán los pares de valores de los estándares (concentración y valor de medición introducidos).

La desviación del estándar (SD), la desviación del estándar relativa (RSD%), el rango (R) y el rango relativo (RSD%) se pueden editar al activar el campo de control correspondiente, si se midieron los estándares varias veces y se estableció una evaluación estadística en el método.

Nota

La evaluación estadística se establece en el método.

Para excluir algunos estándares de calibración del cálculo, seleccione el estándar haciendo clic con el ratón en la tabla y haga clic en [BORRAR ESTAND.].

El valor de medición no se borrará definitivamente y se puede reactivar en todo momento.

Mostrar los datos de calibración: pestaña PARAMETROS

Los datos de calibración se especificarán mientras sean calculables.

Parámetros	Descripción
R ² (ADJ.)	Grado de determinación
RAMPA	Rampa de la función de calibración
PROC. SD	Desviación estándar del proceso
CONC. CARACT. / MASA CARACT.	La concentración o la masa característica (concentración o masa necesaria para absorber un 1% de la energía luminosa presente en el atomizador; corresponde al valor de absorbancia de aprox. 0,0044)

Nota

En la ventana OPCIONES / CALIBRACION puede seleccionarse el grado de determinación (R o R²(ADJ.)).

Pestaña RESIDUOS

En el gráfico de la pestaña RESIDUOS se representarán las desviaciones de los puntos de calibración de la curva de calibración calculada, al igual que de los límites de la banda de pronóstico.

Límites de detección y determinación de la calibración actual: pestaña LIM. DETECC./LIM. DETER.

Los límites de detección y determinación del AAS se pueden determinar en base a los resultados de calibración actuales.

Los valores para el procedimiento de vacío y de curvas de calibración sólo se mostrarán en este rango cuando se haya calibrado el AAS.

Parámetros	Descripción
LÍMITE DE DETECCIÓN	La masa (concentración) del elemento a analizar, que se puede detectar con una seguridad estadística predeterminada.
LÍMITE DE DETERMINACIÓN	La masa más pequeña (concentración) del elemento a analizar, que todavía se puede determinar con una seguridad estadística predeterminada.

LÍM. DETECC. EN VACÍO SD	Sólo con procedimiento en vacío. La desviación del estándar medida del valor en vacío (muestra IDL = límite de detección individual).
[CALCULAR]	Iniciar el cálculo de los límites de detección y determinación, p. ej. después de una modificación de la curva de calibración.

Procedimiento de curvas de calibración

Para calcular el límite de detección y determinación según el procedimiento de curvas de calibración, se requiere una curva de calibración lineal. La calibración se debería realizar en el rango de concentración inferior. Parámetros fundamentales para el resultado del cálculo:

- Número y posición de los puntos de calibración
- Número de las mediciones de repetición por estándar
- Calidad de la compensación
- Rampa de la curva de calibración
- Seguridad estadística relativa (nivel de probabilidad)

Los valores del procedimiento de curvas de calibración sólo se pueden considerar significativos cuando se ha calibrado en el rango de concentración inferior. El límite de detección y el límite de determinación solo se pueden visualizar e imprimir en la ventana CALIBRACION. No se guardan en el protocolo de resultados.

Procedimiento en vacío

La desviación del estándar del valor en vacío se determinará dentro de la medición. Para ello se introducirá la medición del valor en vacío en la secuencia (LÍM. DETECC. EN VACÍO) (→"Especificar secuencias de muestras y acciones" p. 62).

Instrucciones de cálculo para el procedimiento en vacío:

Se medirá el valor en vacío 11 veces. De estos valores se determinará la desviación del estándar absoluta (SD) del valor en vacío. Para el límite de detección y determinación sirven las siguientes fórmulas:

Límite de detección (Lím. detecc.)	$\text{Lím. detecc.} = 3 * \text{SD} / (\text{rampa de la curva de calibración})$
Límite de determinación (Lím. deter.)	$\text{Lím. deter.} = 9 * \text{SD} / (\text{rampa de la curva de calibración})$

El límite de detección y el límite de determinación según el procedimiento de vacío se muestran en porcentaje.

7.3 Modificar curva de calibración

Puede modificar una curva de calibración existente a través de

- Cambio de la función de calibración utilizada
- Desactivar/Activar estándares

La función de calibración se modifica cuando selecciona un nuevo modelo en el cuadro de lista FUNCION DE CALIBRACION.

Un estándar se excluye del cálculo cuando lo selecciona en la pestaña TABLA y después acciona [BORRAR ESTAND.]. El valor de medición no se borrará definitivamente y se puede reactivar en todo momento.

El programa vuelve a calcular la curva de calibración y representa la curva modificada.

Los parámetros de calibración modificados se aplicarán a los resultados cuando abra el comando RUTINA ► CALCULAR DE NUEVO o haga clic en la barra de herramientas en  (→ "Calcular de nuevo los resultados del análisis" p. 75).

8 Control de calidad

El control de calidad sirve para la supervisión de los resultados de la medición de un método a lo largo de un periodo de tiempo largo. Para ello se establecerán en el método muestras QC especiales de distintos tipos que se introducirán en la línea de medición. Al evaluar las muestras QC, los resultados se compararán con muestras QC previas.

La evaluación se editará en las tarjetas de control de calidad (tarjetas QC) y se guardará con el método. Cuando abra el método, tendrá a su disposición las tarjetas QC y se actualizarán con el siguiente tipo de medición.

El tipo de las muestras QC y sus parámetros se establecen en la ventana METODO / QCS (→"Pestaña QCS: muestras de control de calidad" p. 52) y en la SECUENCIA se establece la inclusión de la muestra QC dentro de la línea de medición (→"Especificar secuencias de muestras y acciones" p. 62).

Las tarjetas QC del método cargado (activo) las puede ver en la ventana QC. En ella también puede establecer los parámetros para el contenido y la vista de las tarjetas QC.

- Abra la ventana QC con el comando DESARROLLO DE METODOS ► QC o con el símbolo



8.1 Parámetros de las tarjetas QC

Tipo de gráfico		Gráfico de control	Gráfico de valores previstos
Muestra QC:	Valores medios	☐	☒
Estánd. QC:	Valores medios	☐	☒
Stock QC:	Tasas de recuperación	☒	☐
Tendencia QC:	Tendencias	☒	☐
Matriz QC:	Tendencias	☒	☐
Blanco QC:		☒	☐

Representación	
Tamaño de los puntos:	2
☒ Unir puntos	

Ventana QC / PESTAÑA PARAMETRO DE TARJETAS QC

Tipo de tarjeta

El tipo y la representación de las tarjetas QC se define en la ventana QC / Pestaña Parámetro de tarjetas QC.

Tipo de muestra QC	Tipo de evaluación QC
MUESTRA QC	Promedios
ESTÁND. QC	Valores medios (estándar)
	Tasas de recuperación
TENDENCIA QC	Tendencias
MATRIZ QC	Rangos
	Precisiones
BLANCO	Ninguna selección prevista. Se mostrará la absorbancia de los blancos.

Para el tipo de tarjetas TARJETAS DE CONTROL (tarjeta de registro de proceso), los parámetros de destino y los límites de control (C) y de advertencia (W) se determinan a partir del valor promedio y la dispersión de los valores del periodo previo. Para el tipo TARJETAS VALOR DESTINO las magnitudes de destino y los límites de exclusión se determinan a partir de los valores esperados y los límites especificados de las muestras de control de calidad (→ "Pestaña QCS: muestras de control de calidad" p. 52).

Configuración de los gráficos

Para la representación gráfica puede establecer el tamaño de los puntos, al igual que una conexión de los puntos con una línea poligonal.

Opción	Descripción
TAMAÑO DE LOS PUNTOS	Los diferentes puntos se representarán en un círculo. El círculo se agranda con un valor mayor.
UNIR PUNTOS	Unir puntos del gráfico con una línea poligonal.

8.2 Entradas y límites de las tarjetas QC

El contenido de las tarjetas QC se establecerá en la ventana QC / ENTRADAS Y LIMITES y se puede ajustar a los requisitos del laboratorio correspondiente en relación a la frecuencia de las entradas.

Ventana QC / ENTRADAS Y LÍMITES

Opción	Descripción	
ESQUEMA DE ENTRADA	TODOS LOS VALORES	Introducir todos los controles QC ejecutados.
	1 VALOR/DÍA	Introducir sólo los últimos controles QC del día.
	2 VALORES POR DÍA	Introducir sólo los primeros y últimos controles QC del día.
	Definición de "día": un día corresponde a un día según el reloj del ordenador, es decir que durante un día se sobrescribirá una entrada precedente en la tarjeta QC con un nuevo valor QC. En cambio, al comenzar un día nuevo, se crea una nueva entrada.	
VALORES DE CANTIDAD PERIODO PREVIO	Sólo para tarjeta de control / Tarjeta de registro de proceso El periodo previo es un número de las entradas de las tarjetas QC que se utilizarán para el cálculo de los límites de control (C) y de advertencia (W). El periodo previo contiene siempre las entradas antiguas de las tarjetas. Con el valor 0 (sin periodo previo) se utilizarán todos los datos QC introducidos para el cálculo de los límites de error y de control.	
LÍMITES DE EXCLUSIÓN PARA TARJETAS DE VALOR DESTINO / FACTOR	Solo para tarjetas de valor destino Los límites de exclusión se calculan a partir los límites especificados para las muestras de control de calidad multiplicados por el factor (valor predefinido: 1) (→ "Pestaña QCS: muestras de control de calidad" p. 52).	

Renovar la tarjetas

Establecimiento de cómo se debe continuar con tarjetas (casi) completas:

Opción	Descripción
ASUMIR PERIODO PREVIO, BORRAR RESTO	El periodo previo se tomará y creará el periodo previo de la nueva tarjeta.

ÚLTIMOS VALORES -> NUEVO PERIODO PREVIO	Los últimos valores medidos de la tarjeta antigua forman el periodo previo de la nueva tarjeta. El resto de los valores se borran de la tarjeta. Los valores de medición nuevos se evaluarán con el nuevo periodo previo creado.
BORRAR TODO, NUEVO PERIODO PREVIO	Se borrarán todos los valores. Los nuevos valores de medición rellenan primero el periodo previo.
[EJECUTAR]	Renovar las tarjetas según la opción seleccionada arriba.

8.3 Mostrar tarjetas QC

Las tarjetas QC se mostrarán en la ventana QC / TARJETAS QC. Para cada tipo de muestra QC establecido en el método y cada línea de elemento tenida en cuenta existe una tarjeta distinta.

Opciones/Mostrar

Campo / Opción	Descripción
TIPO	Seleccionar tipo de muestra QC para la visualización.
LÍNEA	Seleccionar línea de elemento para la visualización.
VALORES MOSTRADOS	Número de los valores mostrados y fecha del primer y último valor mostrado.
ENTRADAS	Número total de las entradas en la tarjeta QC actual y fecha del primer y último valor
x(MÁX.)	Ajustar el número de las entradas que deben representarse en el gráfico.
	Imprimir gráfico QC incluyendo los datos alfanuméricos y valores de medición.

Área de gráfico

Color	Descripción
RANGO AMARILLO	Periodo previo
LÍNEA HORIZONTAL EN GRIS CLARO	Promedio calculado del periodo previo
LÍNEA HORIZONTAL EN ROJO	Límite de control superior e inferior (C) calculado del periodo previo (3 sigmas)
LÍNEA HORIZONTAL EN VERDE	Límites de advertencia calculados (W; 2 sigmas)
CÍRCULO PEQUEÑO EN NEGRO	Punto de medición

Cuando hace clic en un valor de medición en el gráfico, se abre una ventana con las siguientes indicaciones sobre este valor de medición.

Opción	Descripción
NÚMERO	Número del valor de medición en la línea QC
VALOR	Valor de medición (calculado según la forma de representación de la tarjeta QC)
FECHA/HORA	Momento de la medición

USUARIO	El usuario registrado en el momento de la medición
VERSIÓN	Versión del método utilizado
ELIMINAR ENTRADA / ACTIVAR ENTRADA	Marcar el valor de medición como borrado o volver a activar
INTRODUCIR COMENTARIO	Introducir un comentario acerca del punto de medición, p. ej., razón de la eliminación

9 Gestionar y controlar el equipo y los accesorios

9.1 Espectrómetro

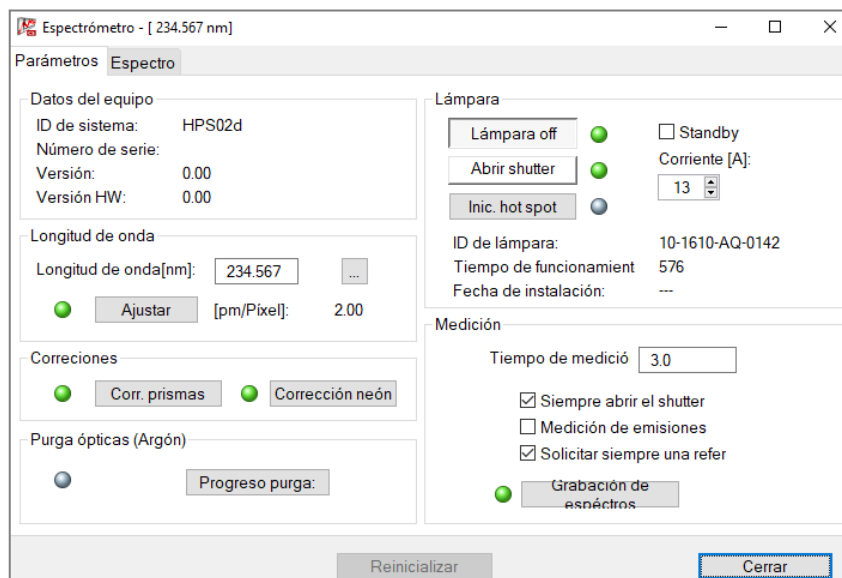
La ventana ESPECTROMETRO sirve para comprobar las funciones del espectrómetro y elaboración de métodos. Se pueden ajustar y consultar los siguientes datos:

- Datos del equipo
- Encendido y apagado de la lámpara de xenón
- Prueba de las correcciones de longitud de onda
- Visualización de los parámetros de selección de la línea CCD
- Iniciar una medición en una longitud de onda de prueba
- Inicio de una medición continua para optimizaciones del equipo
- Corrección de desplazamientos de pico (offsets)

Abra la ventana ESPECTROMETRO con el comando DESARROLLO DE METODOS ►

ESPECTROMETRO o con el símbolo .

9.1.1 Prueba de función del equipo en contrAA



Ventana ESPECTROMETRO / PARAMETROS

En la ventana ESPECTROMETRO / PARAMETROS se controlan las funciones básicas del equipo y se inicia una medición de prueba en una longitud de onda seleccionada.

En principio es suficiente cuando el contrAA está encendido y se ha iniciado. Todas las lámparas de control tienen que estar encendidas y en verde.

Si hace clic en el botón correspondiente, se comprobará la función correspondiente del equipo. Con un desarrollo satisfactorio del test, la lámpara de control se pondrá verde.

Datos del equipo

Indicación del AAS conectado y de la versión de software instalada.

Lámpara

Opción	Descripción
[LÁMPARA APAGADA]/[LÁMPARA ENCENDIDA]	Apagar o encender la lámpara de xenón.
[ABRIR SHUTTER]/[CERRAR SHUTTER]	Abrir o cerrar shutter.
INIC. [HOT SPOT]	Volver a iniciar el sistema para el seguimiento hot spot.
STANDBY	Cuando está activado, la corriente de la lámpara se pondrá en modo standby. De este modo se prolonga la vida útil de la lámpara.
CORRIENTE[A]	Cambiar la corriente de la lámpara La corriente de la lámpara definida está optimizada respecto a la combustibilidad y vida útil.
Información acerca de la lámpara de xenón instalada	Sólo está activa cuando en la ventana OPCIONES / VISTA está activada la opción MOSTRAR TIEMPO DE FUNCIONAMIENTO DE LAMPARA (ESPECTROMETRO). ID DE LAMPARA Código de identificación de la lámpara TIEMPO DE FUNCIONAMIENTO Cuando se superen las 1000 h de tiempo de servicio garantizadas se mostrará un mensaje de advertencia al respecto. FECHA DE INSTALACION Fecha del último cambio de lámpara Si la lámpara no ha sido cambiada, no se mostrará ninguna fecha.

Longitud de onda/Correcciones

Opción	Descripción
LONGITUD DE ONDA	Indicación de la longitud de onda seleccionada Al hacer clic en [...] se abre la ventana Seleccionar elemento/línea para definir la longitud de onda deseada (→ "Pestaña LINEAS: seleccionar líneas de elementos" p. 19). Con [Ajustar] el monocromador se desplaza a la longitud de onda seleccionada.
[CORR. PRISMAS]	Comprobar la posición de los prismas y ajustar de forma automática si fuera necesario.
[CORRECCIÓN NEÓN]	Comprobar la corrección de longitud de onda mediante líneas de neón.

Lavado del sistema óptico

Sólo para contrAA 800

Opción	Descripción
[PROGRESO DE LAVADO]	Consultar el estado del lavado de gas (lavado con aire o argón). Para obtener resultados de medición fiables, el lavado debe haber concluido (LED de estado en verde). Este botón sólo está activo, si el lavado del sistema óptico está activo (→ "Opciones de lavado del sistema óptico" p. 185).

Medición

Opción	Descripción
TIEMPO DE MEDICIÓN [s]	Indicar tiempo total para la medición de espectros
[GRABACIÓN DE ESPECTROS]	Iniciar la medición del espectro con los parámetros establecidos.
SIEMPRE ABRIR EL SHUTTER	Cuando está activado, las mediciones en la ventana ESPECTROMETRO se realizan siempre con el shutter abierto. Si se debe comprobar el sistema con el shutter cerrado, p. ej. en la representación de la corriente de oscuridad, hay que desactivar la casilla de control. Nota: el ajuste del shutter en esta ventana no influye en las mediciones fuera de esta ventana. En el resto de los casos, el shutter se controla de forma automática.
MEDICIÓN DE EMISIONES	Si se desactiva, se registrará el espectro de absorbancia Cuando está activado, se registrará el espectro de emisión.
SOLICITAR SIEMPRE UNA REFERENCIA	Realizar una medición de referencia antes de una medición de espectros.

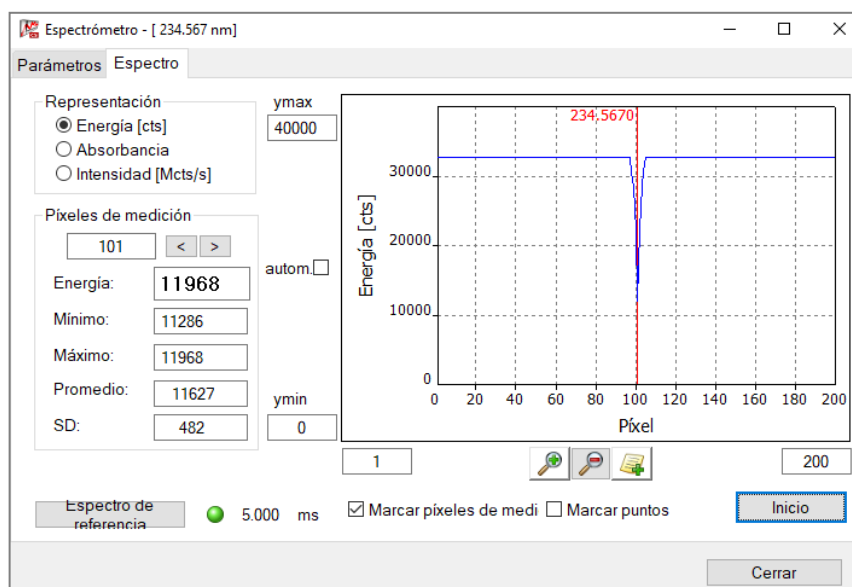
9.1.2 Medir pico de espectros en una longitud de onda seleccionada

Inicie una medición de prueba en una longitud de onda seleccionada en la ventana ESPECTROMETRO / PARAMETROS.

1. En LONGITUD DE ONDA/CORRECCIONES, abra con [...] la ventana SELECCIONAR ELEMENTO/LINEA y seleccione la línea de elemento deseada.
2. También puede introducir directamente el valor en el campo LONGITUD DE ONDA.
3. Ponga con [AJUSTAR] el policromador en la longitud de onda deseada.
Si el ajuste se completa satisfactoriamente, la marca al lado del ajuste se pondrá en verde.
4. Ajuste el TIEMPO DE MEDICIÓN [s].
5. Active la casilla de control SOLICITAR SIEMPRE UNA REFERENCIA.
6. Inicie la medición con [GRABACION DE ESPECTROS] y siga las indicaciones para la medición de referencia y finalmente la de muestras.

Los resultados de la medición se mostrarán en la ventana ESPECTROS (→ "Mostrar detalles de los valores individuales de las muestras" p. 84).

9.1.3 Iniciar medición continua



Ventana ESPECTROMETRO / ESPECTRO

Inicie en la ventana ESPECTROMETRO / ESPECTRO una medición continua en una longitud de onda predeterminada.

Las mediciones continuas se utilizarán en el servicio de atención al cliente para la optimización del equipo.

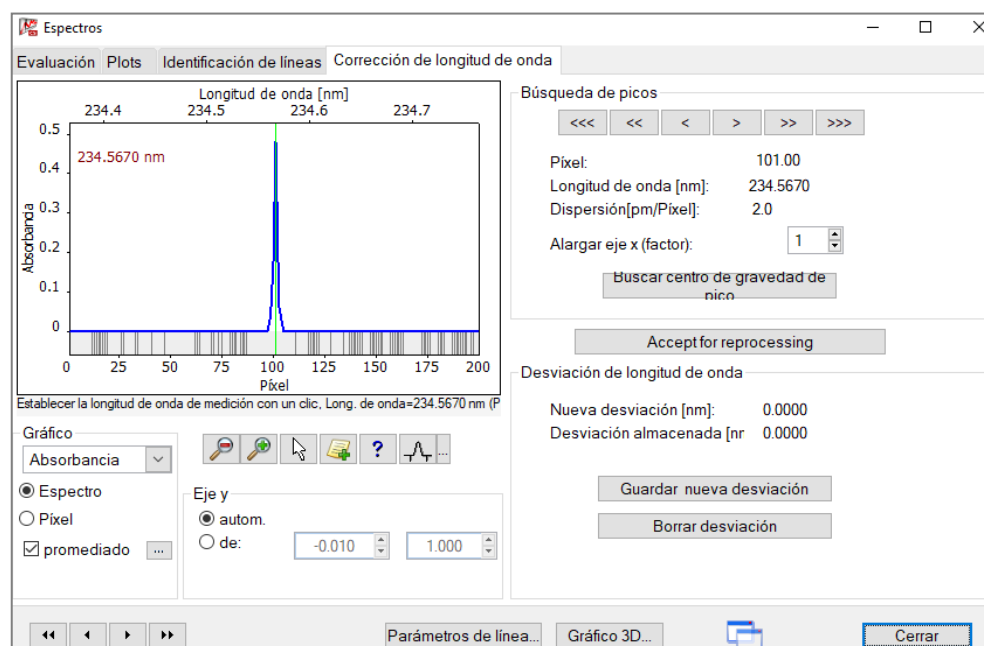
Representación gráfica y
evaluación digital

Opción	Descripción
REPRESENTACIÓN	Opciones para la representación del espectro:
ENERGIA	Indicación del espectro de energía, unidad de medida: cts (Counts) Para obtener resultados de medición con el menor ruido posible, los tiempos de integración para la línea CCD se seleccionarán de tal modo que el máximo de energía se encuentre aprox. en 30.000 cts.
ABSORBANCIA	Indicación del espectro de absorbancia.
INTENSIDAD	Representación de la energía por unidad de tiempo, unidad de medida: Mcts/s (Megacounts por segundo) Por medio de la intensidad, se pueden comparar distintos picos en relación a su absorción e independientemente de su tiempo de integración.
PÍXELES DE MEDICIÓN	Selección del píxel cuyo valor se mostrará continuamente en el campo ENERGIA. En los campos MAXIMO, MINIMO, PROMEDIO y SD aparecerán los resultados correspondientes de la medición continua.
MARCAR PÍXELES DE MEDICIÓN	Marcar los PÍXELES DE MEDICION establecidos en el gráfico con una línea roja perpendicular.
MARCAR PUNTOS	Marcar los valores de medición para cada píxel en el gráfico con un punto.

ESCALA DEL GRÁFICO	Indicar directamente los valores para el punto de inicio y final de la coordenada y abscisa en los campos de los ejes, o después de activar el modo de ZOOM, seleccionar con el botón izquierdo del ratón presionado el área que se desea visualizar (→ "Elementos de manejo más utilizados" p. 10). Volver a la escala al activar la función autom. o desactivar el modo de zoom.
--------------------	--

1. Introduzca en la ventana ESPECTROMETRO / PARAMETROS la longitud de onda.
2. Cambie a la pestaña ESPECTRO.
3. Inicie la medición de referencia con [ESPECTRO DE REFERENCIA].
Con una medición de referencia existente, la marca de al lado del botón está verde.
4. Inicie la medición continua con [INICIO].
Los valores de medición se registran con los parámetros establecidos y se repiten continuamente hasta que se pulsa [STOP].

9.1.4 Corregir la posición de pico



Ventana ESPECTROS / CORRECCION DE LONGITUDES DE ONDA, corrección de longitudes de onda con desplazamientos de pico

El contrAA viene preajustado cuando se suministra, es decir que las longitudes de onda de análisis más utilizadas vienen ajustadas y comprobadas de fábrica. Si debe utilizar longitudes de onda de análisis menos comunes, puede comprobar la exactitud de la longitud de onda de análisis en la ventana ESPECTROS / CORRECCION DE LONGITUD DE ONDA. Puede corregir desplazamientos de picos en el rango de subpíxeles, es decir, menor que la dispersión de píxeles.

Los factores de corrección encontrados se guardarán en el archivo de líneas/longitudes de onda y sirven para las siguientes mediciones. Los factores de corrección introducidos se pueden volver a borrar de este archivo. El archivo de líneas/longitudes de onda se

puede copiar y volver a abrir para visualizarlo (→ "Copiar archivo de líneas/longitudes de onda" p. 174).

Búsqueda de picos

Opción / Botón	Descripción
TECLAS DE FLECHAS	Mover la longitud de onda del pico.
PÍXEL	Píxel seleccionado actual.
LONGITUD DE ONDA	Longitud de onda de análisis actual.
DISPERSIÓN [PM/PÍXEL]	Resolución espectral en picómetros por píxel.
ALARGAR EJE X (FACTOR)	Unidad de las abscisas.
[BUSCAR CENTRO DE GRAVEDAD DE PICO]	Buscar el pico de forma automática y corregir la desviación.
[ACEPTAR PARA NUEVO CÁLCULO]	Al hacer el nuevo cálculo se tomará en cuenta la desviación de las longitudes de onda modificada en el cálculo de la posición del pico.

Desviación de longitud de onda

Opción / Botón	Descripción
NUEVA DESVIACIÓN [NM]	Indica la desviación encontrada.
DESVIACIÓN ALMACENADA [NM]	Indica la desviación almacenada hasta ahora.
[GUARDAR NUEVA DESVIACIÓN]	Guardar la nueva desviación en un archivo de líneas/longitudes de onda. Los valores guardados en este archivo se utilizarán para las siguientes mediciones. Nota: Accionar sólo una vez el botón [GUARDAR NUEVA DESVIACION]
[BORRAR DESVIACIÓN]	Borrar la entrada del archivo de líneas/longitudes de onda para la longitud de onda de análisis actual.

Comprobar la posición de pico

1. Introduzca en la ventana ESPECTROMETRO / PARAMETROS la longitud de onda e inicie la medición del pico de análisis (→ "Medir pico de espectros en una longitud de onda seleccionada" p. 112).
Los resultados de la medición se mostrarán en la ventana ESPECTROS.
2. Cambie a la pestaña CORRECCION DE LONGITUD DE ONDA.
3. Alargue el eje x para que el pico se pueda visualizar bien.
4. Cuando el pico está centrado en el píxel de análisis 101 (la línea roja coincide con el pico), el pico se ha detectado correctamente. En este caso no se requiere ninguna actuación más.
5. Si el pico se encuentra al lado de la línea roja, mueva la línea verde al pico con las flechas
o
determine la posición del pico de forma automática con la función [BUSCAR CENTRO DE GRAVEDAD DE PICO].
6. Guarde la nueva posición del pico encontrada con [GUARDAR NUEVA DESVIACIÓN].
7. Inicie de nuevo una medición en la longitud de onda de análisis en la ventana ESPECTROMETRO / PARAMETROS.

En la vista de la ventana ESPECTROS ahora el pico tiene que estar centrado en el píxel de análisis 101.

9.2 Llama

Técnica utilizada: Llama

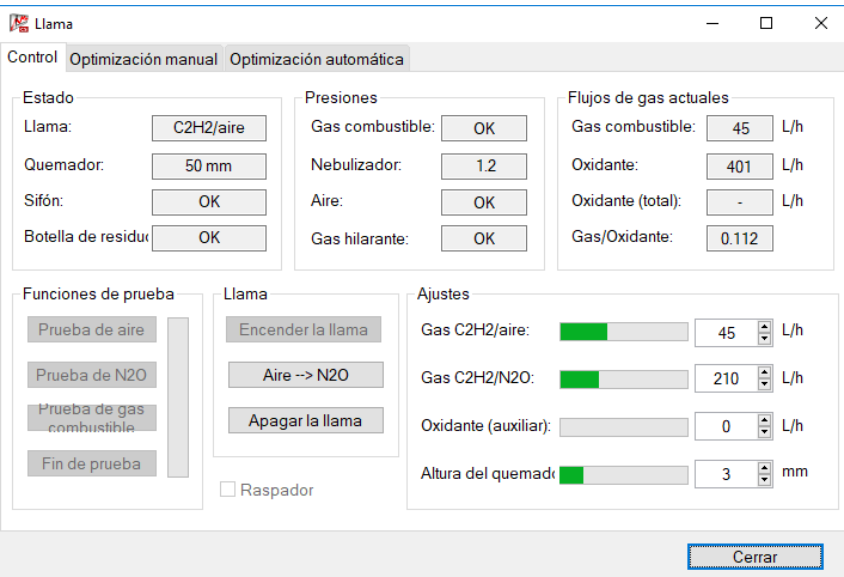
En la ventana LLAMA puede comprobar las distintas funciones del sistema de pulverizador de quemador y ajustar de forma individual los parámetros para el análisis de los diferentes elementos.

- Abra la ventana LLAMA con el comando DESARROLLO DE METODOS ► LLAMA o con el símbolo



9.2.1 Controlar las funciones de llama

Compruebe en la ventana LLAMA / CONTROL el estado actual del sistema de pulverizador de quemador.



Ventana LLAMA / CONTROL

Estado

Opción / Botón	Descripción	
LLAMA	Indicación de estado de la llama:	
	OFF	La llama no está prendida.
	C2H2/AIRE	La llama de aire-acetileno está prendida.
	C2H2/NO2	La llama de óxido nitroso-acetileno está prendida.
MECHERO	Quemador aplicado:	
	100 MM	Quemador de una ranura de 100 mm
	50 MM	Quemador de una ranura de 50 mm
	ERROR	Quemador no disponible

SIFÓN	Se controla el nivel del sifón en la cámara de mezcla al que se transporta el líquido no pulverizado: OK El sifón está lleno de líquido hasta el desagüe. Error El nivel del sifón es insuficiente. El sifón tiene que estar siempre suficientemente lleno para evitar el retroceso de la llama, en especial de la llama de óxido nitroso. En caso de que se muestre un mensaje de error, retire el quemador y rellene la cámara de mezcla con agua destilada hasta que desaparezca el mensaje de error.
BOTELLA DE RESIDUOS	Nivel de la botella de residuos. (Siempre que no se utilice una botella de residuos con control de nivel, hay que ajustarlo en el enchufe de conexión correspondiente del conector cortacircuitos). OK La botella de residuos no está llena (correcto). ERROR La botella de residuos está llena. Vacíela. En este caso, se pueden realizar mediciones pero aparece una advertencia al comienzo de la medición.

Presiones

Opción	Descripción
GAS DE COMBUSTIÓN	Estado de la presión de gas combustible en la entrada del equipo "-": presión del quemador no disponible.
PULVERIZADOR	Presión en el pulverizador de muestras en bar.
AIRE	Estado de la presión inicial de aire. Sólo se muestra cuando el suministro de aire está abierto.
ÓXIDO NITROSO	Estado de la presión inicial de óxido nitroso. Sólo se muestra cuando el suministro de óxido nitroso está abierto.

Flujos de gas actuales

Opción	Descripción
GAS DE COMBUSTIÓN	Flujo de gas combustible
OXIDANTE	Flujo de oxidante a través del pulverizador.
OXIDANTE (TOTAL)	Flujo de oxidante total (oxidante + oxidante adicional) Sólo se muestra cuando el oxidante adicional está activado.
GAS/OXIDANTE	Proporción del flujo de gas combustible respecto al flujo de oxidante.

Funciones de prueba

Sólo puede acceder a las funciones de prueba cuando la llama está apagada. La disponibilidad de las funciones de prueba depende del contexto.

Prueba	Descripción
[PRUEBA DE AIRE]	La válvula magnética en el recorrido del aire se abrirá. Condición previa: la presión de entrada del aire y el gas combustible están abiertos. Se mostrarán: la presión del pulverizador, el flujo de oxidante y, si está activado el oxidante adicional (ventana METODO / LLAMA), también el oxidante total.

[PRUEBA N2O]	Sólo con llama de óxido nitroso-acetileno y quemador de una ranura de 50 mm activado. La válvula magnética en el recorrido del óxido nitroso se abrirá. Condición previa: la presión de entrada del óxido nitroso y el gas combustible están abiertos. Se mostrarán: la presión del pulverizador, y el flujo de oxidante y, si está activado el oxidante adicional, también el oxidante total.
[PRUEBA DE GAS COMBUSTIBLE]	Se ajustará el flujo de gas teórico (válvula proporcional). Se mostrarán: flujo de gas combustible para la llama de aire-acetileno (con [PRUEBA DE AIRE] o la llama de óxido nitroso-acetileno (con [PRUEBA N2O])). Antes de la [PRUEBA DE GAS COMBUSTIBLE], la [PRUEBA DE AIRE] o la [PRUEBA N2O] tienen que estar activadas.
[FIN DE PRUEBA]	Terminar la función de prueba.

Llama/Raspador

Opción / Botón	Descripción
[ENCENDER LA LLAMA]	Encender la llama de aire-acetileno: El aire se libera. El brazo del encendedor gira hacia fuera y el filamento se enciende. Se ajusta el acetileno del flujo de gas teórico (válvula proporcional) cuando la presión del pulverizador y el flujo de oxidante han alcanzado los valores teóricos. Interrupción siempre y cuando la llama no se encienda en 10 s. Cuando la llama se encienda, [APAGAR LA LLAMA] se activa.
[AIRE→N2O]	Cambiar de llama de aire-acetileno a llama de óxido nitroso-acetileno: La válvula de oxidante (3/2 de válvula magnética) cambia de aire a óxido nitroso. El flujo de gas combustible para la llama de óxido nitroso-acetileno (válvula proporcional) se ajusta. El botón cambia a [N2O→Aire].
[N2O→AIRE]	Cambiar de llama de óxido nitroso-acetileno a llama de aire-acetileno: La válvula de oxidante (3/2 de válvula magnética) cambia de óxido nitroso a aire. El flujo de gas combustible para la llama de aire-acetileno (válvula proporcional) se ajusta. El botón cambia a [Aire → N2O].
[APAGAR LLAMA]	Apagar llama: Mientras arda la llama de óxido nitroso-acetileno, se cambia a la llama de aire-acetileno y hay unos segundos de espera. El flujo de gas combustible (válvula proporcional) se corta. Después de unos segundos de espera (agotamiento del gas combustible de la cámara de mezclas y el quemador) se corta el aire (válvula magnética).
RASPADOR	Sólo con quemador de 50 mm con raspador integrado y llama de óxido nitroso-acetileno. Activa el raspador para la limpieza del quemador.

Ajustes

En **Ajustes** puede editar los flujos de gas:

Opción	Descripción
GAS C ₂ H ₂ /AIRE	Llama de aire-acetileno (flujo de gas combustible = 40 –120 NL/h)
GAS C ₂ H ₂ /NO ₂	Llama de óxido nitroso-acetileno (flujo de gas combustible = 120 -315 NL/h)
OXIDANTE (TOTAL)	Ajuste del flujo de oxidante adicional a través del ajuste del flujo de oxidante total (oxidante (total) = flujo de oxidante + flujo de oxidante adicional). 30-300 NL/h El uso de oxidante adicional tiene sentido cuando se analizan líquidos combustibles, se necesita una mayor cantidad de oxidante o hay que aumentar la velocidad de combustión.
ALTURA DEL QUEMADOR	Altura del quemador respecto al eje óptico.



Nota

El quemador conectado es reconocido de forma automática por el sensor del quemador. Sólo se puede cambiar entre C₂H₂/aire y C₂H₂/N₂O con la llama prendida y un quemador instalado de 50 mm.

9.2.2 Optimizar la llama

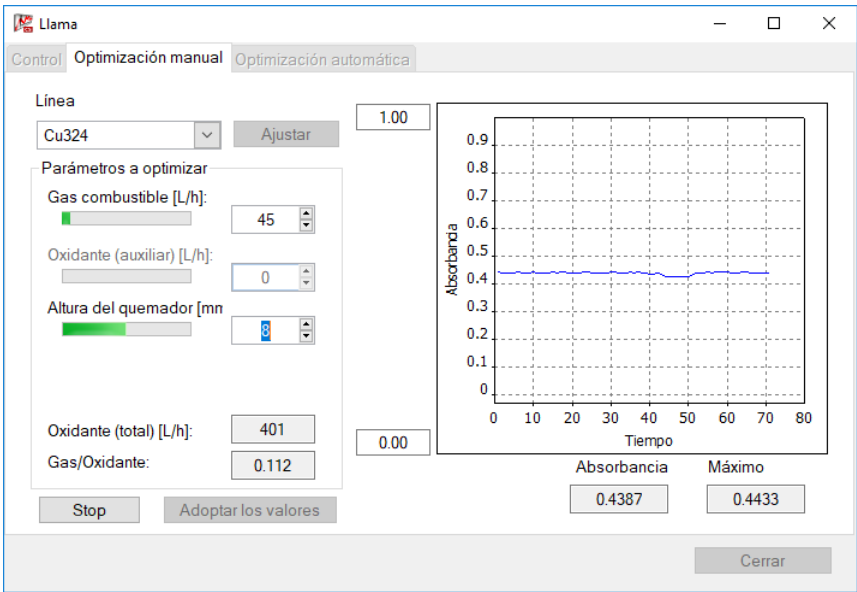
Para un análisis puede optimizar la llama para cada línea de elemento con respecto a:

- Flujo de gas combustible
- Altura del quemador
- El flujo de oxidante total, siempre y cuando el uso de oxidante adicional se haya establecido en el método.

Puede realizar la optimización manualmente modificando los parámetros y observando el curso de la señal o dejando que los parámetros busquen de forma automática por el programa. En ambos casos puede añadir los parámetros calculados al método haciendo clic en el botón.

9.2.2.1 Optimizar la llama manualmente

La optimización manual de la llama se realiza en la ventana LLAMA / OPTIMIZACION MANUAL.



Ventana LLAMA / OPTIMIZACIÓN MANUAL

Opción / Botón	Descripción
LÍNEA	Seleccionar la línea de elemento para la que hay que optimizar la llama. En el método se incluyen longitudes de onda configuradas para la selección.
[AJUSTAR]	Ajustar el monocromador con la longitud de onda seleccionada.
GAS COMBUSTIBLE [L/H]	Ajustar el flujo de gas combustible.
ALTURA DEL QUEMADOR [MM]	Ajustar la altura del quemador respecto al eje óptico del recorrido del haz de la lámpara de xenón.
OXIDANTE (TOTAL) [L/H]	Ajustar el flujo de oxidante total, suma de flujo de oxidante y oxidante adicional.
OXIDANTE [L/H]	Muestra el flujo de oxidante en L/h.
GAS/OXIDANTE	Mostrar la proporción del flujo de gas combustible respecto al flujo de oxidante.
[INICIO]	Iniciar la medición y registrar la señal continuamente. El botón cambia a [STOP].
[STOP]	Terminar la medición.
[ADOPTAR LOS VALORES]	Adoptar en el método los parámetros de llama calculados para la línea de elemento establecida.
GRÁFICO	Indicación del curso de la señal. Puede ajustar la extensión de las coordenadas en los campos del eje Y.
ABSORBANCIA	Muestra el valor actual de absorbancia.
MÁXIMO	Muestra el valor máximo de absorbancia durante la medición en curso.

2. Ponga con [AJUSTAR] el monocromador en la longitud de onda de la línea.
3. Introduzca la manguera de aspiración de muestras del pulverizador en la solución de muestra.
4. Inicie la medición con [INICIO].
5. Modifique con las flechas la configuración de GAS COMBUSTIBLE y observe el curso de la señal en el gráfico y en el campo ABSORBANCIA. Establezca el máximo de la absorbancia.
6. Del mismo modo, modifique la ALTURA DEL QUEMADOR hasta que encuentre el máximo de absorbancia.
7. Cuando utilice la llama con oxidante adicional, modifique el parámetro OXIDANTE (TOTAL) hasta que el máximo de la señal quede aquí ajustado también.
8. Repita la fase 5-7 hasta que deje de producirse un aumento relevante de la señal.
9. Termine la medición con [STOP].
10. Añada al método con [ADOPTAR] los parámetros para la línea de elemento seleccionada.

Resuelva, de este modo, los parámetros apropiados para todas las líneas de elemento en el método.



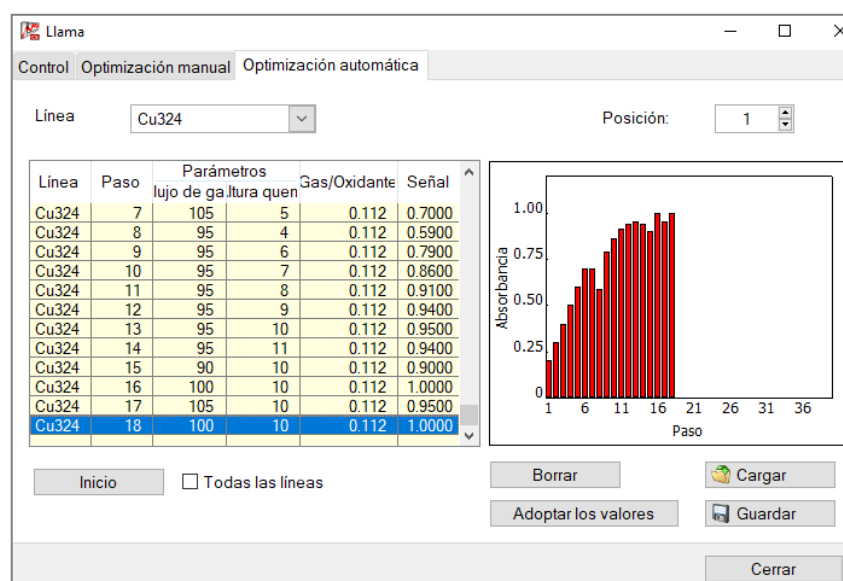
Nota

Al modificar los parámetros, la intensidad de la señal puede reaccionar con un poco de retraso.

9.2.2.2 Optimizar la llama automáticamente

La optimización automática de la llama se realiza en la ventana LLAMA en la pestaña OPTIMIZACION AUTOMATICA.

El algoritmo de optimización utilizado modifica los ajustes para el flujo de gas combustible y altura del quemador con el objetivo de conseguir una ganancia en la señal útil. En este caso se tendrán en cuenta las interacciones entre los tamaños (flujo de gas y altura del quemador). Si con tres fases consecutivas no se consigue ninguna ganancia, el algoritmo se termina. Esto significa que o bien se alcanzó el máximo o que una modificación de los parámetros no influye en la señal útil.



Ventana LLAMA / OPTIMIZACIÓN AUTOMÁTICA

Opción / Botón	Descripción
LÍNEA	Seleccionar la línea de elemento para la que hay que optimizar la llama. En el método se incluyen longitudes de onda configuradas para la selección.
POSICIÓN	Ajustar la posición de la muestra de prueba en el cargador de muestras.
[INICIO]	Iniciar la medición y registrar la señal continuamente. El botón cambia a [STOP].
TODAS LAS LÍNEAS / TODAS LAS LÍNEAS PRINCIPALES	Realizar la optimización para todas las líneas del método con una solución de muestra. La solución de muestra tiene que contener en este caso todos los elementos del método. Si el método contiene líneas de elementos que se miden simultáneamente (definición de líneas principales en la ventana METODO / LINEAS), la selección de las líneas a optimizar puede restringirse a TODAS LAS LINEAS PRINCIPALES.
[STOP]	Terminar la medición.
[BORRAR]	Borrar los valores calculados.
[CARGAR]	Cargar los parámetros de llama optimizados.
[GUARDAR]	Guardar los parámetros de llama optimizados.
[ADOPTAR LOS VALORES]	Adoptar en el método los parámetros de llama calculados para la línea de elemento establecida.
TABLA	Representación de los parámetros calculados.
GRÁFICO	Indicación del curso de la señal.

Ejecución

1. Seleccione en la lista LINEA una línea de elemento o active la opción TODAS LAS LINEAS.
2. Introduzca la manguera de aspiración de muestras del pulverizador en la solución de muestra.

3. Inicie la optimización con [INICIO].
Se abrirá la ventana OPTIMIZACION AUTOMATICA.
4. Active, si es necesario, las opciones:

Opción / Botón	Descripción
INCORPORAR LOS VALORES OPTIMIZADOS AUTOMATICAMENTE EN EL METODO.	Con la optimización automática de todas las líneas del método, esta opción tiene que estar activada, ya que cuando termina la optimización sólo los datos de la última línea están disponibles en la memoria temporal.
GUARDAR LOS DATOS OPTIMIZADOS AUTOMÁTICAMENTE.	Cuando está activado, introducir en el campo NOMBRE DEL ARCHIVO el nombre de archivo deseado.

4. Optimización de líneas individuales: Si no se estableció antes de la optimización, agregue al método los parámetros para la línea de elemento después de una optimización satisfactoria con [ADOPTAR].



Nota

Nuestros especialistas de aplicación le ofrecerán indicaciones especiales acerca de la evaluación multilínea.

9.2.3 Apagar llama

Puede apagar la llama de distintos modos.

- En la ventana LLAMA / CONTROL se apaga la llama con el BOTON [APAGAR LA LLAMA].
También puede apagar la llama con el comando RUTINA ► APAGAR LA LLAMA.

9.3 Horno

Técnica utilizada: Tecnología de tubo de grafito

En la ventana HORNO puede comprobar las distintas funciones del sistema de horno de tubo de grafito y ajustar de forma individual los parámetros para el análisis de los diferentes elementos.

- Abra la ventana HORNO con el comando DESARROLLO DE METODOS ► HORNO o con el símbolo



Botones/campos en la ventana HORNO

Campo / Botón	Descripción
LÍNEA	Cuadro de lista para establecer la línea de análisis para la que se mostrarán y modificarán los parámetros del horno. Con las flechas se puede hojear en la lista de líneas.
[→MÉTODOS]	Adoptar en el método las modificaciones de los parámetros del horno para la línea de análisis.

9.3.1 Editar programa de horno

En la ventana HORNO / PROGRAMA DE HORNO se muestra el programa de horno (programa de temperatura-tiempo (TZP)) para la línea de análisis seleccionada. El modo de edición se activa cuando se abre la ventana en el método (ventana METODO / HORNO, [EDITAR PROGRAMA DE HORNO]).

El programa de horno puede constar de un máximo de 20 fases.

Horno

Programa de horno

Modif.+extras

Gráfico

Paso	*	Nombre	Temp. [°C]	Rampa [°C/s]	antenimier [s]	Tiempo [s]	Gas		Iny.	E/P
							Lavado	Adic.		
1		Secar	85	5	15	27.0	Máx.	Stop		
2		Secar	95	1	15	25.0	Máx.	Stop		
3		Secar	110	2	15	22.5	Máx.	Stop		
4		Pirólisis	350	50	10	14.8	Máx.	Stop		
5		Gas cerrado	350	0	5	5.0	Stop	Stop		
6		Atomizar	1500	1200	4	5.0	Stop	Stop		
7		Calcinar	2400	500	4	5.8	Máx.	Stop		

Renglón

Adjuntar

Insertar

Borrar

Tiempo total:

141 s

Borrar tabla

Retardo en el comienzo de l

Tiempo [s]:

0.0

Programa libro de recetas

Comprobar programa

Línea:

Pb283_A_S

OK

Cancelar

Ventana HORNO / PROGRAMA DE HORNO

Representación de la tabla

La tabla muestra todas las fases pertenecientes al programa de horno actual. Se mostrarán los siguientes parámetros:

Columna	Descripción
Fase	Número de fase
*	<i>Todavía no se ha asignado ninguna función al campo.</i>
NOMBRE	Nombre de la fase del programa de horno.
TEMP.	Temperatura objetivo en la fase [°C]
RAMPA	Tasa de calentamiento en la fase [°C/s]
MANTENER	Tiempo de mantenimiento de la temperatura objetivo en la fase [s]
TIEMPO	Duración total de la fase [°C]
GAS	Suministro de gas de lavado (LAVADO) y gas adicional (ADIC.). Estados posibles: STOP Sin suministro Mín. Tasa de suministro mínima (sólo gas de lavado) Máx. Tasa de suministro máxima
INY.	Fase de inyección La muestra se inyecta en el horno después de esta fase.

Botones y campos

E/P	Fase de enriquecimiento o para tratamiento térmico de los distintos componentes.
Opción / Botón	Descripción
[NUEVO]	Introducir renglones nuevos al final de la lista.
[INSERTAR]	Introducir un nuevo renglón antes de la posición marcada de la lista.
[BORRAR]	Borrar los renglones seleccionados.
[BORRAR TABLA]	Borrar toda la tabla de programa de horno.
RETARDO EN EL COMIENZO DE LA MEDICION	Definir el registro retrasado de la señal de medición cuando sea necesario. El registro de la señal de medición comienza, de serie, con el comienzo de la fase del programa de horno ATOMIZAR. Al definir un tiempo, el comienzo del registro de la señal de medición se retrasará hasta el momento indicado. La función se utilizará para iniciar la medición después del enriquecimiento de la temperatura de atomización al nivel de temperatura de estancamiento.
	Copia los parámetros del renglón en todos los renglones siguientes.
[PROGRAMA LIBRO DE RECETAS]	Carga del libro de recetas el programa de horno para la línea de análisis seleccionada.
[COMPROBAR PROGRAMA]	Comprueba el programa de horno. Si el programa de horno contiene errores que imposibilitan un procedimiento, se mostrará la fase con errores en una ventana de aviso. No es posible iniciar el programa. Modifique la fase con errores (o modifique el programa de horno anterior a la fase). Al iniciar el programa se comprobará si hay una posible sobrecarga térmica del horno (cuando se conocen todas las limitaciones). Si las temperaturas o los tiempos seleccionados son demasiado elevados, al iniciar el programa aparecerá el mensaje de error "Sobrecalentamiento térmico del horno" y el programa de horno no se desarrollará. Modifique las fases con la temperatura de horno más elevada y el tiempo de mantenimiento más largo.
[ENCARGARSE DEL SECADO]	Añade a los programas del horno de todas las líneas, los parámetros de secado establecidos.
[ENCARGARSE DE LA CALCINACIÓN]	Añade a los programas del horno de todas las líneas, los parámetros para la calcinación del tubo de grafito.

Especificar los parámetros de las distintas fases del programa de horno

Al seleccionar la línea de análisis, se cargará, a continuación, un programa de horno adecuado del libro de recetas.

- Con los botones [NUEVO], [INSERTAR] o [BORRAR] modifica el programa de horno como desee.
- Para editar, haga clic en una celda de la tabla.

En una preselección limitada, se abre una lista en la celda. Las cifras se editarán directamente en el campo.

Fases del programa

SECADO	Evaporación del disolvente en la muestra.
--------	---

PIRÓLISIS	Tratamiento térmico en el que la muestra sin suministro de oxígeno se digiere térmicamente.
INCINERAR	Tratamiento térmico en el que la muestra con el uso de un gas adicional seleccionado de forma adecuada (p. ej. suministro de oxígeno) se digiere térmicamente.
AJUSTE DE GAS	Adaptación del flujo de gas a las condiciones de atomización
ATOMIZAR	Liberar los átomos de analito
CALCINAR	Desintegración de los residuos de las muestras.

Parámetros de temperatura

Opción	Descripción
TEMPERATURA	Temperatura final de la fase. Rango de valores: Temperatura máxima hasta 3.000°C en fases de 1°C Temperatura mínima de por lo menos 20°C sobre la temperatura de agua de refrigeración (preferentemente 35 °C) del refrigerador por circulación.
RAMPA	Tasa de calentamiento para alcanzar la temperatura objetivo. Rango de valores: 1... 3.000°C/s en fases de 1°C/s; FP (potencia total), NP (sin potencia) son tasas marginales posibles.
MANTENIMIENTO	Tiempo en el que se debe mantener la temperatura objetivo. Rango de valores: de 0 a 999 s sin contar el tiempo de calentamiento.
TIEMPO	Tiempo total de la fase (suma del tiempo de calentamiento y de mantenimiento). Se calcula de forma automática.

Suministro de gas

Opción	Descripción
LAVADO	Flujo de gas inerte. STOP Sin suministro. Tiene efecto 2 s antes del cambio de fase Mín. Tasa de suministro mínima (0,1 L/min Ar) MÁX. Tasa de suministro máxima (2,0 L/min Ar)
ADIC.	Flujo de gas adicional, p. ej. aire, nitrógeno, etc. STOP Sin suministro. Tiene efecto 2 s antes del cambio de fase MÁX. Tasa de suministro máxima (0,5 L/min Ar)

Fase de inyección/Tratamiento térmico

Opción	Descripción
INY.	Cuando está marcada con "*", la muestra (el gas en la técnica HydrEA) se conduce después de esta fase al tubo de grafito (pipeteo en el tubo precalentado).

E/P	Enriquecimiento / Tratado térmicamente (enriquecimiento / pretratamiento) Sólo con analítica de soluciones Con el enriquecimiento, se tratará la muestra durante los ciclos de medición hasta la fase de enriquecimiento, después se enfriará el tubo a temperatura ambiente y se inyectará el siguiente volumen de muestra. Con el tratamiento térmico de solución de analito y/o modificadores, este tratamiento se realiza hasta la fase determinada. Al final de la fase se debe enfriar el tubo de grafito e inyectar la muestra. El número de ciclos de enriquecimiento, el uso de modificadores y tipo de tratamiento térmico se especificará en la ventana HORNO / MODIF.+EXTRAS (→ "Seleccionar modificadores de matriz, enriquecimiento y tratamiento" p. 127).
-----	--

9.3.2 Seleccionar modificadores de matriz, enriquecimiento y tratamiento

Analítica de soluciones

En la ventana HORNO / MODIF.+EXTRAS se muestran los siguientes parámetros para la analítica de soluciones:

- Modificadores de matriz
- Parámetros para el enriquecimiento
- Parámetros para el tratamiento térmico de la muestra

El modo de edición se activa cuando se abre la ventana en el método (ventana METODO / HORNO, [MODIF.+EXTRAS]).

Ventana HORNO / MODIF.+EXTRAS en analítica de soluciones

El uso de modificadores para la separación de la matriz y el tratamiento térmico se establecerá para cada línea. Para el análisis de una línea de elemento se pueden especificar hasta 5 modificadores distintos.

Modificadores de matriz

En cada medición se pueden añadir 5 modificadores de matriz como máximo. Se activarán haciendo clic en la casilla de control del modificador correspondiente.

Para evitar errores de arrastre, se realiza el registro de los componentes del análisis de forma estándar con el orden siguiente:

- Blanco (con dilución)
- Modificador 1
- ...otros modificadores (si se han establecido)
- Solución de muestra

La secuencia de alimentación en el tubo de grafito se realiza a la inversa para que se inyecte la muestra en primer lugar. Los residuos de las muestras se lavarán con el resto de los componentes de la manguera de dosificación y se inyectarán en el tubo de grafito. La secuencia estándar de la muestra y los modificadores se puede modificar si fuera necesario.

Hay que indicar los siguientes parámetros para los modificadores:

Opción	Descripción
Casilla de control	Activa el modificador para el análisis.
NOMBRE	El cuadro de lista contiene los nombres de los modificadores más utilizados. Seleccionar un nombre de la lista o introducir directamente en el campo.
VOL.	Indicar volumen de toma (de 1 a 50 µL).
POS.	Indicar la posición del modificador en el cargador de muestras.
DESPUÉS DE MUESTRA	Cuando está activado, el modificador correspondiente se absorberá después de la muestra a través del cargador de muestras, es decir que se inyectará antes que la muestra en el tubo de grafito.
PREP.	Modificador tratado térmicamente.

Enriquecimiento

En un enriquecimiento, el programa de horno se ejecutará repetidamente hasta la fase determinada (columna E/P). La cantidad de muestra especificada en la tabla de muestras se inyectará y preparará, después se enfriará el tubo a temperatura ambiente y se inyectará el siguiente volumen de muestra. De este modo se puede suministrar una cantidad de muestra mayor al horno. El volumen de los modificadores sólo se inyecta una vez.

Se pueden especificar los siguientes modos de enriquecimiento:

Opción	Descripción
OFF	No se realiza ningún enriquecimiento.
PERMANENTE (SÓLO MUESTRAS)	Enriquecimiento con cada muestra (sin muestras especiales como estándares, etc.)
PERMANENTE (INCL. CALIBRACIÓN)	Enriquecimiento con cada muestra, incluidos los estándares, muestras QC y estándares de adición.
POR DEBAJO DEL LÍMITE DE DETERMINACIÓN	Enriquecimiento sólo con muestras cuya concentración es inferior al límite de determinación.

CICLOS	Número de los ciclos de enriquecimiento (de 2 a 100). Nota: Ya que además del elemento a medir, también se enriquecen todas las contaminaciones en el tubo, el número de las fases de enriquecimiento en las muestras reales debería mantenerse dentro los límites.
--------	---

Tratamiento térmico

Con el tratamiento térmico de solución de analito y/o modificadores, este tratamiento se realiza hasta la fase determinada en el programa de horno. Al final de la fase se debe añadir una fase de enfriamiento antes de que los componentes restantes se inyecten en el tubo precalentado.

 Atención:

Después del tratamiento térmico es necesario enfriar el tubo al menos hasta los 300 °C, pues de lo contrario, al introducir los componentes restantes en el tubo caliente se destruye la punta de la manguera. Con temperaturas superiores no se produce aviso de error.

Opción	Descripción
TRATAMIENTO TÉRMICO	Cuando está activado, se realiza un tratamiento térmico de los modificadores o la muestra. En MODIFICADORES tienen que estar activadas las casillas de control PRETRAT. para los modificadores a tratar.
PRECALENTAR MUESTRA	Tratar previamente la solución de analito. Añadir modificadores y otros componentes.
TIEMPO DE RETARDO CALEFACCIÓN	Tiempo de espera entre la alimentación de los componentes a tratar térmicamente y los componentes siguientes.

Analítica de sólidos con el cargador de muestras SSA 600

Para la **analítica de sólidos** es posible ajustar la alimentación de modificadores de matriz y el tratamiento térmico previo.. Si uno de los modificadores está activado, se pueden definir el nombre y el volumen (como se indica arriba).

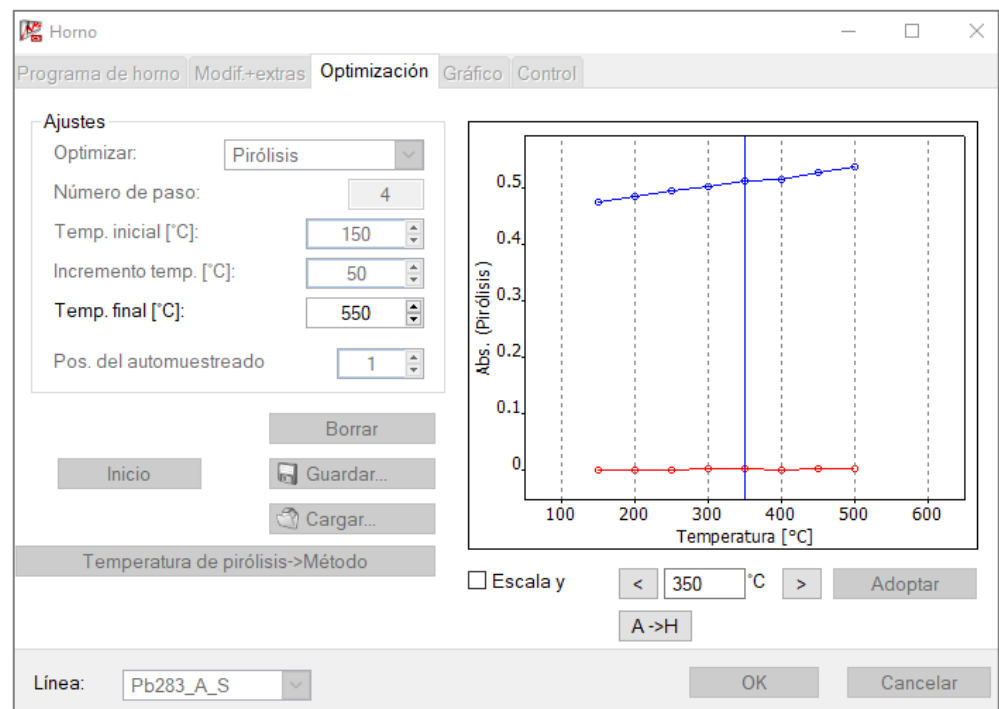
Con un **SSA 600 sin dosificación líquida** hay que pipetear los modificadores manualmente en la muestra. La alimentación se realiza siempre antes de que la plataforma se introduzca en el horno o como última fase de la preparación completa de una muestra con el SSA 600.

Con el **SSA 600 con dosificación líquida**, el modificador o las muestras líquidas se pipeteen de forma automática.

9.3.3 Optimizar la temperatura de atomización

En la ventana HORNO / OPTIMIZACION se calcula y define la temperatura óptima de atomización y pirólisis para una línea de elemento a través de la ejecución de una serie de medición con temperaturas finales y de fase en aumento.

Los parámetros del horno optimizados para la atomización y pirólisis se pueden guardar y cargar en otros métodos.



Ventana HORNO / PROGRAMA DE HORNO

Parámetros y botones

Opción / Botón	Descripción
OPTIMIZAR	Seleccionar parámetros para la optimización: PIRÓLISIS o ATOMIZACIÓN
NÚMERO DE PASO	Muestra el número de la fase seleccionada en el programa de horno.
TEMP. INICIAL [°C]	Temperatura final más baja de la fase del programa de horno a optimizar dentro de una serie de medición.
INCREMENTO TEMP. [°C]	Incremento, al que se aumenta la temperatura de la fase del programa de horno que se va a optimizar de una ejecución de medición a otra.
TEMP. FINAL [°C]	Temperatura final más alta de la fase del programa de horno a optimizar dentro de una serie de medición. Nota: sólo se pueden seleccionar parámetros que resulten prácticos respecto al programa de horno actual.
POSICIÓN DEL CARGADOR	Posición de la muestra en el cargador de muestras con la que se llevará a cabo la optimización (pirólisis/atomización).
[INICIO]/[STOP]	Iniciar o terminar la optimización.
[BORRAR]	Borrar los valores calculados.
[GUARDAR...]	Guardar los parámetros de horno optimizados.
[CARGAR...]	Cargar los parámetros de horno optimizados.
[ADOPTAR]	Adoptar los valores calculados en el programa de horno actual.

Indicación de resultados

Los resultados de la optimización se mostrarán en la ventana de resultados.
La representación gráfica se realiza en la ventana HORNO / OPTIMIZACION. Se mostrarán el valor de equilibrio a cero y la absorbancia medida:

Marca / botón	Descripción
LÍNEA ROJA	Señal de fondo que depende de la temperatura de atomización o pirólisis.
LÍNEA AZUL	Absorción específica que depende de la temperatura de atomización o pirólisis.
CURSOR VERTICAL	Temperatura óptima de atomización o pirólisis seleccionada por el usuario.
ESCALA Y	Si la casilla de control está marcada, se seleccionará la escala del eje "y" para que la señal de fondo se pueda representar de forma óptima. La optimización para la pirólisis y la atomización pueden seleccionarse independientemente una de la otra.
[A->H]/[H->A]	Cambiar la representación del gráfico entre la superficie de la señal (Area, superficie) y altura de la señal (Height, altura).
[<] / [>]	Mover las líneas verticales de temperatura de la pirólisis o atomización (de acuerdo con la fase seleccionada para la optimización) hacia la izquierda o hacia la derecha para establecer la temperatura óptima del horno.

i Nota

Los colores del gráfico se corresponden con los ajustes previos. Pueden ser modificados en la ventana OPCIONES / VISTA.

Realizar la optimización

Para la serie de medición se requiere un cargador de muestras.

Objetivo de la optimización

Objetivo	Descripción
Temperatura de pirólisis	Sin pérdidas de absorción específicas y señal mínima de fondo.
Temperatura de atomización	Una absorbancia específica constante.

1. Defina un programa de horno para la línea de análisis actual.
2. Introduzca en la ventana HORNO / OPTIMIZACION los parámetros de optimización (Fases del programa, TEMP. INICIAL [°C], INCREMENTO TEMP. [°C], TEMP. FINAL [°C], posición de la muestra en el cargador de muestras).
3. Prepare la muestra en el cargador de muestras.
4. Inicie la optimización con [INICIO].
5. La optimización se ejecuta automáticamente.
Los resultados de la medición se mostrarán en la ventana de resultados y se representarán gráficamente en la ventana HORNO / OPTIMIZACION.
La visualización de los valores individuales de la muestra se abre haciendo clic en el punto de medición del gráfico o haciendo doble clic en el renglón de la muestra en la ventana de resultados.
6. Mueva el cursor vertical en el gráfico con los botones [<] / [>] o con las teclas de flechas para ajustar la temperatura óptima. Añada el valor con [ADOPTAR] en el programa de horno.
7. Proceda del este modo con las siguientes líneas de análisis en el método actual.

9.3.4 Representar gráficamente el programa de horno / recubrir tubo de grafito

La ventana HORNO / GRÁFICO contiene las siguiente funciones:

- Representación gráfica del programa de horno
- Comprobar la ejecución del programa de horno actual
- Recubrir el tubo de grafito con iridio para la técnica HydrEA.

Representación gráfica del programa de horno

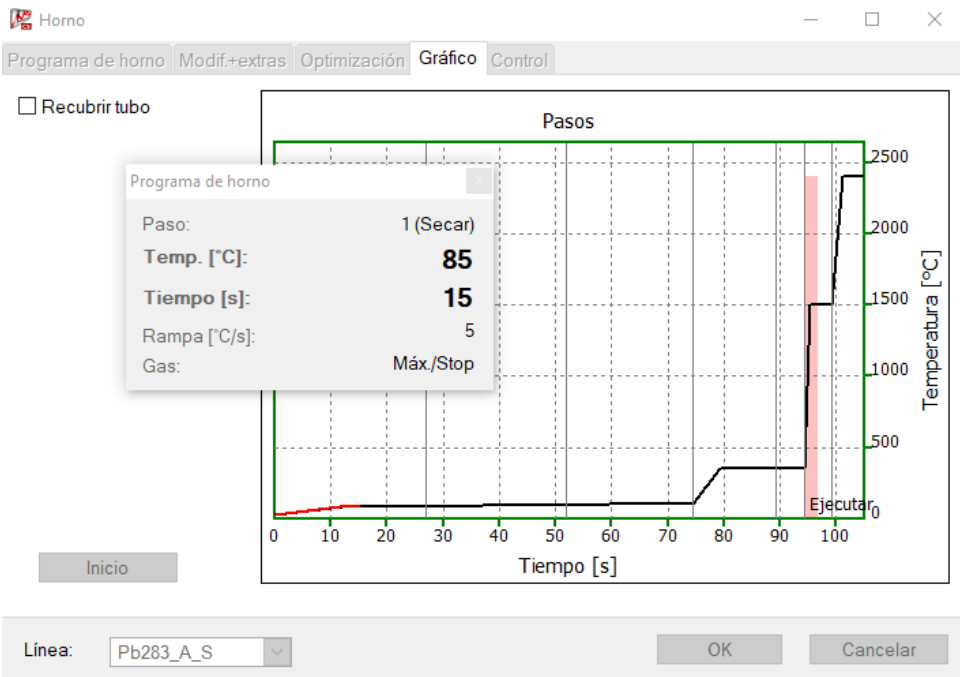
El programa de horno se representa en el sistema de coordenadas de tiempo-temperatura.

Color	Descripción
Línea negra	Desarrollo programado temperatura-tiempo
Línea roja	Durante una prueba, una línea roja (desarrollo temperatura-tiempo realizado) se superpondrá a la línea negra en la fase tratada del programa del horno.
Iny.	La fase de inyección está marcada con la identificación "Iny." en el diagrama.
Barra verde	La fase de enriquecimiento se marca con una barra verde horizontal.
Barra rosa claro	La fase de integración (registro del valor de medición) se marca con una barra rosa claro vertical.

Comprobar el programa de horno con una operación de prueba

La ejecución del programa de horno actual se comprobará con una operación de prueba que se representará gráficamente.

Durante esta operación de prueba se mostrarán las temperaturas y los tiempos; no se inyectará ninguna muestra y no se realizará el equilibrio a cero ni la integración.



Ventana HORNO / GRAFICO: Comprobar programa del horno

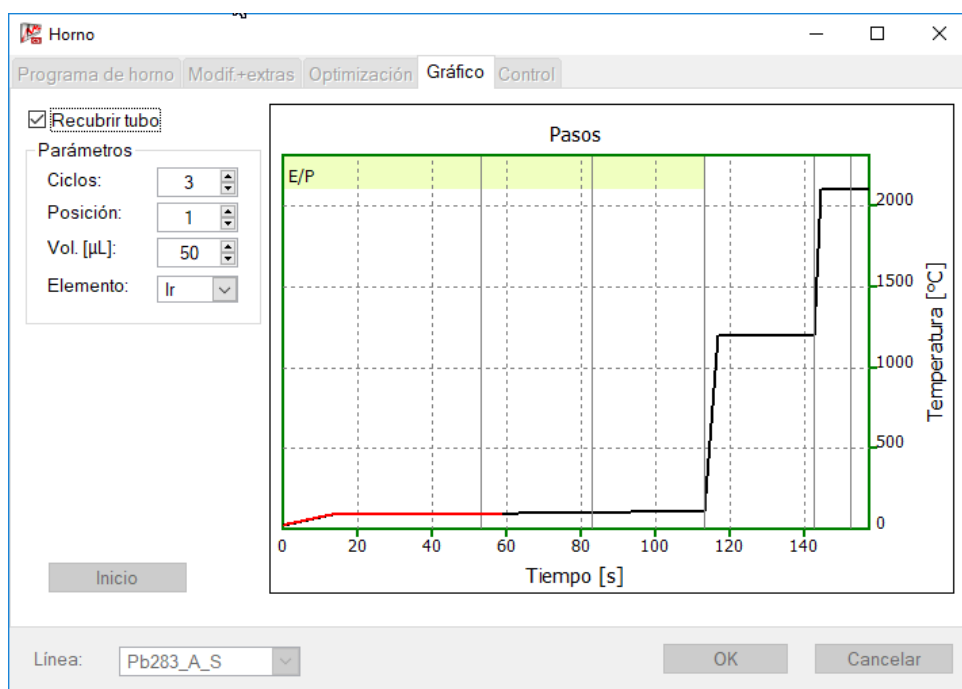
En el gráfico se representan las fases del programa de horno. La línea roja muestra la temperatura del horno real durante la ejecución.

Los siguientes valores se mostrarán digitalmente durante la ejecución:

Parámetros	Descripción
FASE	Paso ejecutado del programa de horno.
TEMP. [°C]	Temperatura actual del horno.
TIEMPO [s]	Tiempo transcurrido desde el inicio del programa.
RAMPA [°C/s]	Tasa de calentamiento actual.
GAS	Flujos de gas actual.

Recubrir tubo de grafito

Para la técnica HydrEA se necesitará un tubo de grafito recubierto de iridio u oro. El recubrimiento se controla en la ventana HORNO / GRÁFICO.



Ventana HORNO / GRÁFICO: Recubrir tubo de grafito

Al activar la casilla de control RECUBRIR TUBO se activarán los parámetros de entrada para este procedimiento.

Opción / Botón	Descripción
CICLOS	Número de los ciclos de enriquecimiento para el recubrimiento.
POSICIÓN	Posición del plato de muestras con la solución de recubrimiento.
VOL.[µL]	Volumen de la solución de recubrimiento que hay que pipetear en el tubo en cada fase de enriquecimiento.
ELEMENTO	Selección del material de recubrimiento Use iridio (Ir) para el análisis de componentes de hidruro y oro (Au) para el análisis de mercurio.
[INICIO]	Iniciar recubrimiento.

9.3.5 Otras funciones del horno

La ventana HORNO / CONTROL contiene las siguientes funciones:

- Información sobre el tubo de grafito
- Formación de tubo de grafito
- Calcinar horno de tubo de grafito
- Abrir/cerrar horno de tubo de grafito
- Indicación de la temperatura de agua de refrigeración actual
- Ajuste de la temperatura para la apertura del shutter delante del receptor

Ventana HORNO / CONTROL

Datos sobre el tubo de grafito

La categoría TUBO contiene información acerca del tubo de grafito, que se introduce al cambiar el tubo y después se actualiza de forma automática. Si se coloca un tubo nuevo, ponga los valores a 0.

Opción	Descripción
TIPO	Tipo de tubo según la configuración en la ventana PANTALLA DE CONEXION
CICLOS DE CALENTAMIENTO	Número de los ciclos de calentamiento del tubo.
VIDA ÚTIL	Medida del desgaste térmico del tubo de grafito como producto de parámetros de control y tiempos de las fases del programa de horno actual. La evaluación de la cifra sólo es posible dependiendo de la técnica.

 Nota

Le recomendamos que, antes de eliminar un tubo de grafito que se pueda utilizar todavía, anote en el lugar adecuado los datos en el área TUBO para poder volver a introducir estos valores al colocar otro tubo y después se actualicen de forma automática.

Formar horno

Con la formación del horno se

- expulsa oxígeno atmosférico del horno y se ajusta la fuerza de apriete de la parte móvil del horno;
- recalibra la temperatura del tubo;
- prepara un tubo de grafito recién colocado para el análisis;
- limpia el horno después de las pausas.

Hay que formar el horno:

- después de poner en marcha el espectrómetro
- después de cerrar el horno abierto

Inicie el proceso de formación con un clic en el botón [FORMAR].

Calcinación del horno

La calcinación es un programa de limpieza de una fase. El flujo de gas está ajustado con un flujo máximo. Los parámetros modificables actuales se guardarán con el método.

Opción	Descripción
TEMP.	Temperatura de calentamiento
RAMPA	Tasa de calentamiento
MANTENIMIENTO	Tiempo de calentamiento
[INICIO]	Iniciar proceso de calcinación: aparece la ventana CALCINAR que muestra los datos de medición del horno más actuales.

Otras funciones del horno

Opción	Descripción
TEMP. AGUA DE REFR. [°C]	Muestra la temperatura actual del agua de refrigeración.
ILUMINACIÓN / CÁMARA DEL HORNO	Cuando está activado, se enciende la cámara del horno. Aparecerá una ventana en la pantalla con una imagen del tubo de grafito. La inyección de la muestra se puede controlar. En el preajuste, la cámara del horno siempre está encendida. La opción para ello se encuentra en la ventana OPCIONES / TRANCURSO DEL ANALISIS (→ sección "Opciones para el transcurso del análisis" p. 183).
[ABRIR HORNO]	Abre el horno de tubo de grafito. El tubo de grafito se puede extraer y colocar.
[CERRAR HORNO]	Cierra el horno de tubo de grafito.
TEMPERATURA PARA LA APERTURA DEL SHUTTER	Temperatura del horno a partir de la cual se abrirá el shutter ante el receptor. A partir de este punto, la cámara del horno se apagará y preparará la toma del valor de medición.

Test

Comprobar que no haya errores en los sensores del horno. Las mediciones se interrumpirán si surge alguno de los errores aquí registrados (en la pantalla aparecerá un mensaje de error).

Inicie la prueba de errores con [TEST]. El resultado de la prueba se indicará del siguiente modo: si la prueba sale bien, la luz de control se pondrá verde, si sale mal, la luz de control se pondrá roja.

9.4 Sistema de hidruro

Técnica utilizada: sistema de hidruro/Hg o sistema HydrEA

En la ventana SISTEMA DE HIDRURO puede

- controlar el estado del sistema de hidruro
- comprobar los errores de distintas funciones del sistema
- volver a iniciar el sistema de hidruro
- llenar las mangueras del sistema con reactivos antes del comienzo del análisis
- lavar el sistema, p. ej. al final del análisis para limpiar.
- Abra la ventana SISTEMA DE HIDRURO con el comando DESARROLLO DE METODOS ► HIDRURO... o con el símbolo



Botones en la ventana
Sistema de hidruro

Botón	Descripción
[INICIAR]	Iniciar el sistema de hidruro.
[CARGAR EL SISTEMA]	Llenar las mangueras del sistema de hidruro con reactivos. El llenado con reactivos es necesario antes del inicio de los análisis y después de una nueva instalación o limpieza del sistema de hidruro.
[LAVAR EL SISTEMA]	Lavar el sistema de hidruro con ácido (o si fuera necesario también con agente reductor). Los parámetros correspondientes se indicarán en la ventana Método - Hidruro (→"Pestaña HIDRURO: especificar sistema de hidruro" p. 26).

Control de las funciones del sistema de hidruro

La ventana SISTEMA DE HIDRURO / CONTROL muestra el estado de los distintos módulos controlables del sistema de hidruro.

Ventana Sistema de hidruro / Control

Control de las bombas

Opción	Descripción
BOMBA DE COMPONENTE	Encendido y apagado de la bomba de componente Esta bomba transporta los reactivos del sistema de hidruro.
BOMBA DE MUESTRAS	Encendido y apagado de la bomba de muestras Esta bomba transporta la muestra líquida del análisis.

Nota

Si al encender una de las dos bombas, ninguna de las dos válvulas (n.º 3 ó 4) está activada, se activará automáticamente la válvula 3 para evitar que el líquido retroceda. Cuando la bomba de muestras está activada, se activará además la bomba de componente para evitar una congestión del líquido en el separador de gas y líquido.

Control de los recorridos del gas

En RECORRIDO DE GAS se pueden activar a través de válvulas magnéticas (grupos de válvulas magnéticas) los 10 recorridos de flujo de gas-argón para el curso del análisis.

Con GAS->VALVULA 2 -> CUBETA se puede, con recorridos de gas que no se dirigen a la cubeta, activar un flujo adicionalmente de gas mayor que vaya directamente a la cubeta, abriéndose así la válvula 2.

Encendido de las válvulas de muestra

En VALVULAS DE MUESTRA se puede activar el recorrido de muestras, a través de la pareja de válvulas magnéticas (V6, V7), para desechos o para reactor.

Válvulas en el flujo de gas

LA VALVULA 1 activa y apaga el flujo de gas a través de la punta del módulo Batch.

LA VALVULA 3 activa 6 l/h de argón en el recorrido establecido.

LA VALVULA 4 activa 25 l/h de argón en el recorrido establecido.

Control de la cubeta

Opción	Descripción
ALTURA DE CUBETA	Ajustar la altura de la cubeta en el recorrido del haz óptico.

CALEFACCIÓN ON	Encender el calentamiento de la cubeta. La cubeta se calentará a la temperatura indicada en el campo Valor teórico . Después de encender y apagar la calefacción de la cubeta, la temperatura se mostrará en el campo Valor real . Esta función se puede utilizar para precalentar la cubeta.
----------------	--

Calentar colector de oro

Sólo para sistemas de hidruro con enriquecimiento

En COLECTOR se puede visualizar y modificar la configuración del colector de oro.

Opción / Botón	Descripción
OFF	Apagar la calefacción y refrigeración del colector de oro.
CALEFACCIÓN ON	Encender la calefacción del colector de oro.
REFRIGERACIÓN ON	Enciende el ventilador del colector de oro. El colector de oro es enfriado.
PODER CALORÍFICO	Parámetros para la temperatura de calentamiento del colector de oro. Este valor viene ajustado de fábrica y sólo se debe modificar cuando el rendimiento térmico de la calefacción del colector de oro se ha modificado. Un valor más alto corresponde a una temperatura de calentamiento superior.
[AJUSTAR]	Guardar el poder calorífico mostrado como valor nuevo en el sistema de hidruro.

Limpieza sensor de burbujas

El sensor de burbujas produce una señal cuando ha entrado líquido en el recorrido de gas después del separador de gas y líquido. Si se avisa de los errores en la prueba de errores del sistema de hidruro o durante la medición a través del sensor de burbujas, hay que limpiar el recorrido de gas, en el sensor de burbujas, con un flujo de gas adicional. El proceso de limpieza concluye con éxito cuando no se detecta ninguna burbuja en el recorrido de gas durante 30 s.

Opción	Descripción
Luz de control	Sólo está activada durante el proceso de limpieza.
SENSOR DE BURBUJAS	ROJO Se detectan burbujas en el recorrido de gas (líquido). VERDE El recorrido de gas no tiene burbujas.
[INICIO]	Iniciar proceso de limpieza.

9.4.1 Comprobar errores en el sistema de hidruro

En la ventana SISTEMA DE HIDRURO / TEST DE ERRORES se puede comprobar el estado actual del sistema de hidruro. Los análisis se interrumpirán inmediatamente si surge alguno de los errores aquí registrados y en la pantalla aparecerá el mensaje de error correspondiente.

Ventana SISTEMA DE HIDRURO / TEST DE ERRORES

Sistema de hidruro
conectado

Opción / Botón	Descripción
TIPO	Sistema de hidruro conectado e iniciado
VERSIÓN	Versión del firmware del sistema de hidruro
FRECUENCIA DE LA RED	Se calienta la frecuencia de la red medida a 50 ó 60 Hz. Se toleran las desviaciones de 2 Hz hacia arriba o hacia abajo, de lo contrario aparecerá el mensaje de error "Frecuencia de la red".

Test de errores

El resultado de la prueba se indicará con las luces de control: verde (resultado positivo) y rojo (resultado negativo):

Inicie la comprobación de errores con el botón [TEST].

Un resultado negativo de la prueba se puede deber a:

Opción	Descripción
PRESIÓN DE GAS	No hay presión de gas de argón.
+24 V	No hay una tensión de servicio de +24 V.
RELÉ DE SEGURIDAD	No se ha activado el relé de seguridad.
TEMPERATURA TRANSFORMADOR	El transformador está muy caliente o el sensor está defectuoso.
TEMPERATURA COLECTOR	El colector de oro está muy caliente o el sensor está defectuoso.
TIEMPO CALEFACCIÓN DEL COLECTOR	No se puede alcanzar la temperatura del colector de oro.
TEMPERATURA CUBETA	La cubeta está muy caliente o el elemento térmico está defectuoso.

TIEMPO CALEFACCIÓN DE CUBETA	No se puede alcanzar la temperatura teórica de la cubeta.
FRECUENCIA DE LA RED	La frecuencia de la red no es ni de 50 ni de 60 Hz.
SENSOR DE BURBUJAS	El líquido se encuentra en el recorrido de gas después del separador de gas y líquido.
SENSOR DE TEMPERATURA CUBETA	El sensor de temperatura de la cubeta está defectuoso.

9.5 Automuestreador

9.5.1 Cargadores de muestras AS 51s/AS 52s y AS-F/AS-FD

El cargador de muestras es un accesorio opcional. Dependiendo del tipo de funcionamiento del espectrómetro y de las necesidades del usuario respecto a las tareas de análisis, se pueden instalar cargadores de muestras controlados por el equipo. El tipo de cargador se identifica al comienzo en la pantalla de conexión a través del ASpect CS.

En la ventana CARGADOR DE MUESTRAS se

- mostrará el tipo de cargador conectado
- ajustará el cargador
- volverá a lavar y reiniciar
- realizará un autotest.

Los parámetros para el análisis (posiciones en el plato de muestras, dilución, mezcla y fases de lavado) se especifican en el método, la secuencia y la identificación de muestras.

- Abra la ventana CARGADOR con el comando DESARROLLO DE METODOS ► CARGADOR DE MUESTRAS o con el símbolo



Botones en la ventana CARGADOR

Botón	Descripción
[INICIALIZAR]	Reinicializar el cargador El cargador de muestras se iniciará al principio del trabajo con el AAS en la ventana PREAJUSTES (→ "Ajustes preparatorios: selección de la tarea" p. 14). Puede ser necesaria una nueva inicialización cuando el cargador de muestras pierde la orientación, p. ej., debido a un golpe mecánico. Se creará la conexión entre el cargador de muestras, el AAS y el ordenador.
[LAVADO]	Lavar la cánula del cargador de muestras. Con el módulo de inyección SFS 6 conectado se abrirá el recorrido de la muestra y también se lavará todo. Gracias a la bomba de lavado se suministrará siempre solución de lavado. También puede iniciar la fase de lavado con el comando RUTINA ► LAVAR.

 Atención:

Conecte el cargador de muestras sólo cuando el AAS esté apagado.

No conecte el cargador de muestras con el equipo AAS encendido ya que puede dar lugar a errores de comunicación o a la destrucción del puerto de conexión.

9.5.1.1 Especificar cargador de muestras

En la ventana CARGADOR / PARAMETROS se especificarán o mostrarán los siguientes ajustes para los parámetros:

- Tipo de cargador
- Parámetros de lavado
- Ajustes para el control de limpieza
- Función para el lavado del recipiente de mezcla

Los parámetros LAVAR y CONTROL DE LAVADO se adoptarán del método actual (→ "Cargador de muestras para técnica de llama e hidruro/HydrEA" p. 31). Las modificaciones en la pestaña CARGADOR DE MUESTRAS / PARAMETROS no tienen ninguna influencia a la inversa en las entradas del método.

Ventana CARGADOR / PARÁMETROS

Área CARGADOR

Opción	Descripción
TIPO	Selección/visualización del cargador de muestras conectado
"_"	No se ha seleccionado ningún cargador.
AS 51s / AS-F	Cargador para técnica de llama, de hidruro e HydrEA sin función de dilución
AS 52s / AS-FD	Cargador para técnica de llama, de hidruro e HydrEA con función de dilución

PLATO (AS-F / AS-FD)	"-" 139 Pos 54 Pos	No se ha colocado ningún plato Plato para 129 muestras en recipientes Sarstedt de 15 mL en las filas exteriores y 10 muestras en recipientes Sarstedt de 30 mL en la fila interior. Plato de muestras de 54 posiciones para recipientes Sarstedt de 50 mL.
PLATO (AS 51s / AS 52s)	"-" 87 Pos 49 Pos 30 Pos	No se ha colocado ningún plato Plato para 77 muestras en recipientes Sarstedt de 15 mL en las filas exteriores y 10 muestras en recipientes Sarstedt de 30 mL en la fila interior. Plato de muestras con espacio para 49 muestras en recipientes de muestras Sarstedt de 30 mL en tres filas. Plato de muestras con espacio para 30 muestras en recipientes de muestras Sarstedt de 50 mL en tres filas.
VERSIÓN	Número de la versión del software del cargador de muestras.	

Área LAVAR

Opción	Descripción	
LAVADO	OFF	El lavado está desactivado. No se lavará de forma automática.
	DESPUES DE CADA MUESTRA	Lavado después de cada muestra, pero no dentro de una serie estadística.
TIEMPO DE LAVADO RECIPIENTE [S]	Tiempo en el que se aspira medio de lavado del recipiente de lavado.	
CICLOS RECIPIENTE DE MEZCLA	Número de ciclos de lavado para el recipiente de mezcla En un ciclo de lavado, el recipiente de mezcla se llena con líquido de lavado o diluyente y se vuelve a vaciar.	

Área CONTROL DE LIMPIEZA

Opción	Descripción	
CONTROL DE LIMPIEZA	Iniciar lavado de limpieza. El proceso de lavado se comprobará a través de una medición repetida.	
LÍMITE DE CONTROL (ABS.)	El valor al que tiene que volver el valor de la señal durante el lavado, antes de que se midan las muestras diluidas o con escasa concentración.	

Área FUNCIONES ESPECIALES

Opción	Descripción	
LAVADO RECIPIENTE DE MEZCLA	Lavar el recipiente de mezcla por separado, fuera de una secuencia de medición.	
	VOLUMEN [ML]	Indicar el volumen de lavado.
	INICIO	Lavar recipiente de lavado.

9.5.1.2 Parámetros técnicos del cargador de muestras

Especifique en la ventana CARGADOR / PARAMETROS TECN.:

- la profundidad de inmersión de la cánula/manguera de dosificación en los distintos recipientes
- la velocidad de trabajo del dosificador

- la orientación del brazo del cargador de muestras respecto a los recipientes

Ventana CARGADOR / PARAMETROS TECN.

Para los diferentes tipos de recipientes se toman en cuenta las siguientes acciones:

Recipiente	Acción
RECIPIENTES DE MUESTRAS	Absorber las muestras a través del dosificador o el pulverizador (técnica de llama) o aspirarlas a través de la bomba de manguera (técnica de hidruro).
RECIPIENTES ESPECIALES	Absorber o aspirar muestras especiales.
RECIPIENTE DE MEZCLA	Dosificar diluyente y solución de analito y absorber muestras después de la dilución.
RECIPIENTE DE LAVADO	Lavar cánula y recorrido de aspiración (sólo con técnica de llama e hidruro).

Elementos de la tabla

Opción	Descripción
ACCIÓN	Acciones posibles: ABSORBER: absorber la muestra del recipiente para dosificarla en el recipiente de mezcla o en la llama. DOSIFICAR: dosificar la muestra en el recipiente de mezcla. LAVAR: absorber la solución de lavado.
TIPO	Tipo de cargador de muestras conectado
LUGAR	Recipiente en el que se realiza la acción.
PROFUNDIDAD [MM]	Profundidad de inmersión de la cánula en mm

VEL. ETAPA	Velocidad de trabajo del dosificador. El dosificador trabaja más rápido con valores mayores y más despacio con valores menores. Valores recomendados: ABSORBER MUESTRAS Niveles de velocidad medios DOSIFICACION EN EL RECIPIENTE DE MEZCLA Uno de los dos niveles más altos para que la inyección rápida dé lugar a una mezcla completa. La mezcla completa se complementa además con un tiempo de medición fijo antes de la absorción del recipiente de mezcla (o del recipiente de muestras). La absorción del diluyente y del segmento de aire separador se realiza con una velocidad fija.
---------------	---

Área TABLA

Con los elementos de manejo en TABLA puede modificar los parámetros del renglón marcado en la tabla.

Opción	Descripción
VELOCIDAD	Velocidad del dosificador
PROFUNDIDAD [MM]	Ajustar la profundidad de inmersión de la cánula o de la manguera de dosificación. La profundidad de inmersión se calculará desde la posición más alta del brazo del cargador de muestras.
PROFUNDIDAD EN POS.	Posición del recipiente de muestras o el especial en la que se comprobará la profundidad de inmersión.
AJUSTAR	Cuando está activada, el brazo del cargador de muestras se mueve sobre el recipiente para el que hay que cambiar la posición. Con recipientes de muestras y recipientes especiales, se trata de la posición de muestra definida en PROFUNDIDAD EN POS. Cuando no está activada, la profundidad de inmersión y la velocidad se modificarán sin que el brazo del cargador de muestras se mueva sobre un recipiente.

9.5.1.3 Ajustar la profundidad de inmersión y la velocidad de dosificación

1. Marque en la pestaña CARGADOR / PARAMETROS TECNICOS los renglones de la tabla cuyos parámetros desea modificar.
2. Al especificar los recipientes de mezclas o de muestras, determine en el campo PROFUNDIDAD EN POS. la posición en el plato de muestras en la que quiere comprobar la profundidad de inmersión.
3. Active la casilla de control AJUSTAR para mover el brazo a la posición del recipiente.
4. Observe el movimiento del brazo del cargador de muestras y modifique los parámetros VELOCIDAD y PROFUNDIDAD hasta obtener el resultado deseado.

9.5.1.4 Comprobación de funcionamiento del cargador de muestras

Las funciones del cargador de muestras se pueden comprobar en la pestaña CARGADOR / PRUEBA DE FUNCIONAMIENTO.

Cargador

Parámetros | Parámetros técn. | **Prueba de funcionamiento** | Posiciones | Añadir reactivo

Selección de vía/rotación del plato (108 P)

☐ N° de recipiente: 1
☒ Posición de lavado
☐ Posición de mezcla
☐ Posición del tubo

Sifón

Profundidad [n]: 0

Test de errores

Versión: 14.530

- Accionamiento de vía/plato
- Identificación del plato
- Dosificador (accionamiento)
- Dosificador (volumen)

Test

Pipeteador

Velocidad: 3

Volumen [μL]: 0

Aceptar Rechazar

☐ Válvula hacia la botella

Reinicializar

Programas de prueba

☒ Programa de prueba
☐ Programa de prueba
☐ Programa de prueba

Inicio

Alinear el cargador de muestras

Lavado Inicializar OK Cancelar

Ventana CARGADOR / PRUEBA DE FUNCIONAMIENTO

SELECCIÓN DE VÍA/ROTACIÓN DEL PLATO

Dirigirse con el brazo del cargador de muestras a distintas posiciones:

Opción	Descripción
N° DE RECIPIENTE	Dirigirse al recipiente de muestra seleccionado en el campo de al lado de la lista.
POSICIÓN DE LAVADO	Dirigirse al recipiente de lavado.
POSICIÓN DE MEZCLA	Sólo con AS 52s y AS-FD Dirigirse al recipiente de mezcla.

PIPETEADOR

Sólo AS 52s y AS-FD

Opción / Botón	Descripción
VELOCIDAD	Definir la velocidad de dosificación Nivel 1: velocidad de dosificación mínima Nivel 12: velocidad de dosificación máxima
VOLUMEN [μL]	Definir el volumen de pipeteo que se va a absorber.
VÁLVULA HACIA LA BOTELLA	Dirigir la válvula hacia la botella. La válvula cambia el flujo entre la botella con diluyente y la muestra. Al cambiar tiene que oírse un clic en la válvula.
[ABSORBER]	Absorber el volumen ajustado con la velocidad de dosificación definida.
[DOSIFICAR]	Dosificar el volumen ajustado con la velocidad de dosificación definida.
[REINICIAR]	Volver a dosificar el volumen tomado.

ELEVADOR DE INMERSIÓN

Descender el brazo del cargador de muestras a la posición escogida de la selección de vía/rotación del plato.

Opción	Descripción
PROFUNDIDAD [MM]	Definir profundidad a la que tiene que descender el brazo del cargador de muestras.

BOMBAS

Opción	Descripción
BOMBA DE LAVADO	Iniciar la bomba para la alimentación del recipiente de lavado.
BOMBA DEL RECIPIENTE DE MEZCLA	Iniciar la bomba para el bombeo del recipiente de mezcla.

PROGRAMAS DE PRUEBA

Comprobación del cargador de muestras con programas preconfigurados de prueba de secado en marcha. Para realizar la prueba los **recipientes tienen que estar vacíos**.

Al finalizar el programa de prueba, aparece un aviso para comunicar que la prueba se ha realizado de forma satisfactoria.

El inicio del programa de prueba seleccionado se realiza con el botón [INICIO].

Prueba	Descripción
Programa de prueba 1	Dirigir a la posición 1 y sumergir Lavar cánula Dirigir a la posición 33 y sumergir Lavar cánula Dirigir a la posición 42 y sumergir Lavar cánula
Programa de prueba 2	Desarrollar programa de prueba 1 Dosificar 5 mL de diluyente en el recipiente de mezcla Lavar cánula Vaciar recipiente de mezcla Dosificar 5 mL de diluyente en el recipiente de mezcla Lavar cánula Vaciar recipiente de mezcla

TEST DE ERRORES

Comprobar que no haya errores en los sensores del cargador de muestras. Las mediciones se interrumpirán si surge alguno de los errores aquí registrados (en la pantalla aparecerá un mensaje de error).

Inicie la prueba de errores con [TEST]. El resultado de la prueba se indicará del siguiente modo: si la prueba sale bien, el círculo de control se pondrá verde, si sale mal, el círculo de control se pondrá rojo.

Si no se supera una prueba, puede que se deba a las siguientes causas de errores:

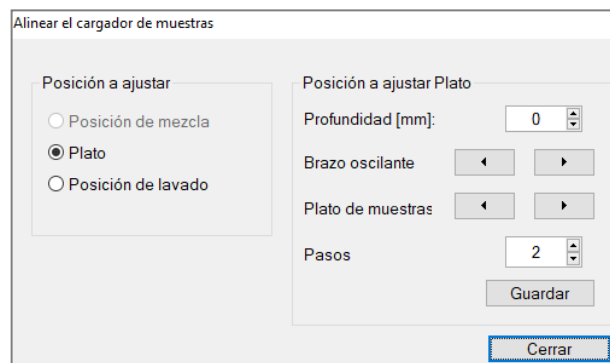
Prueba	Descripción
NIVEL SOLUCIÓN DE LAVADO	El nivel de la botella de suministro es demasiado bajo (recipiente vacío)
NIVEL BOTELLA DE SUMINISTRO	El nivel de la botella de suministro es demasiado bajo (recipiente vacío)
ACCIONAMIENTO DE VÍA/PLATO	Movimiento oscilante del brazo del cargador de muestras y giro del plato defectuosos.

Ajustar cargador de muestras	IDENTIFICACIÓN DEL PLATO	No se reconoció el plato de muestras
	DOSIFICADOR (ACCIONAMIENTO)	Error del dosificador
	DOSIFICADOR (VOLUMEN)	Se absorbió demasiado volumen del dosificador.
	[AJUSTAR CARGADOR DE MUESTRAS]	Abre el cuadro de diálogo del mismo nombre para volver a ajustar el cargador de muestras. (→ "Ajustar el cargador de muestras" p. 147)

9.5.1.5 Ajustar el cargador de muestras

Los cargadores de muestras vienen ajustados de fábrica.

Tendrá que realizar un reajuste en muy pocos casos (p. ej. tras un transporte inadecuado) cuando el brazo del cargador de muestras no se sumerja centrado en los recipientes. El reajuste se realiza controlado por ordenador en la ventana de diálogo **ALINEAR EL CARGADOR** (haga clic en la ventana **CARGADOR / PRUEBA DE FUNCIONAMIENTO** en **[ALINEAR EL CARGADOR]**).



Cuadro de diálogo ALINEAR EL CARGADOR para AS –FD

Seleccionar la posición a ajustar

Opción	Descripción
POSICIÓN DE MEZCLA	Sólo con AS 52s/AS-FD Alinear el brazo del cargador de muestras respecto al recipiente de mezcla
POSICIÓN DE PLATO 1	Alinear el brazo del cargador de muestras respecto al recipiente de muestras en la posición 1 del plato de muestras
POSICIÓN DE LAVADO	Alinear el brazo del cargador de muestras en la posición de lavado

Ajustar posición de mezcla/
Posición de plato 1

Opción / Botón	Descripción
PROFUNDIDAD	Profundidad de inmersión en mm. Con este campo, el brazo de inmersión puede introducirse o extraerse del recipiente correspondiente. La profundidad de inmersión para la POSICION DE MEZCLA y la POSICION DE PLATO 1 no es un parámetro que se pueda optimizar aquí. La posibilidad de modificar la profundidad de inmersión sirve solamente para estimar mejor el centro del recipiente.

BRAZO OSCILANTE [◀]/[▶]	Botones para modificar la posición del brazo del cargador de muestras. Si no, también se pueden utilizar los botones del cursor "Cursor a la derecha" y "Cursor a la izquierda."
PLATO DE MUESTRAS [◀]/[▶]	Botones para girar el plato de muestras. Si no, también se pueden utilizar los botones del cursor "Cursor hacia arriba" y "Cursor hacia abajo."
[GUARDAR]	Guarda los parámetros nuevos para la posición seleccionada. Se siguen utilizando hasta que se vuelvan a guardar nuevos estados de ajuste.

Bomba de lavado

Sólo con cargadores con la versión de firmware más reciente

Opción / Botón	Descripción
NIVEL	Ajustar la velocidad de la bomba de lavado (nivel 1-24).
[GUARDAR]	Guarda la velocidad de la bomba de lavado.

Ajustar cargador de muestras

1. Ajuste un recipiente de muestras en la posición 1 del plato de muestras.
2. Seleccione en el cuadro de diálogo ALINEAR EL CARGADOR la posición a ajustar.
3. Ajuste la profundidad de inmersión de modo que la posición respecto al recipiente se pueda calcular bien.
4. Reajuste la posición del brazo del cargador de muestras con los botones. Adicionalmente con posición del plato 1: reajuste la posición del plato de muestras con los botones.
5. Guarde los parámetros nuevos con [GUARDAR] en el firmware del cargador de muestras.
6. Repita las fases anteriores para la posición que no se ha ajustado todavía.

9.5.1.6 Visualización de las posiciones en el cargador de muestras

En la ventana CARGADOR / POSICIONES se mostrarán las posiciones utilizadas del plato de muestras en la secuencia actual.

Para la visualización se pueden seleccionar los modos TODAS LAS POSICIONES o SOLO POSICIONES ESPECIALES.

Nota:

En el método actual debe estar cargada al menos una línea.

9.5.1.7 Agregar reactivos a la muestra

En la ventana CARGADOR / AÑADIR REACTIVO es posible pipetear automáticamente un reactivo a las muestras cuando se usa el cargador de muestras AS 52s. El reactivo debe estar disponible en un recipiente en el plato de muestras. La tarjeta AÑADIR REACTIVO solo se muestra si se han activado un método y una secuencia correspondiente.

Pos.	Tipo	/ol. muestr. [mL]	Vol. reactivo [μL]	Factor	*
2	Muestra	1.0	50	1.05000000	*
3	Muestra	1.0	50	1.05000000	*
4	Muestra	1.0	50	1.05000000	*
5	Muestra	1.0	50	1.05000000	*
6	Muestra	1.0	50	1.05000000	*
7	Muestra	1.0	50	1.05000000	*
8	Muestra	1.0	50	1.05000000	*
9	Muestra	1.0	50	1.05000000	*
10	Muestra	1.0	50	1.05000000	-
11	Muestra	1.0	50	1.05000000	-

Ventana CARGADOR / AÑADIR REACTIVO

1. Introduzca los siguientes parámetros para el reactivo:

Parámetros	Descripción
NOMBRE	Denominación del reactivo
POSICIÓN	Posición del reactivo en el plato de muestras
VOLUMEN [μL]	Volumen del reactivo que debe ser añadido a las muestras.
CONSIDERAR FACTOR	Si se activa, el factor de dilución se toma en cuenta al añadir el reactivo.

2. Inicialice la lista de muestras con [POS. DE SECUENCIA].
3. Introduzca el volumen de analito de las muestras en la lista de muestras.
4. Marque todas las muestras a las que se les añadirá reactivo.
5. Inicie la adición del reactivo con [INICIAR ADICIÓN].
 - ✓ Las muestras procesadas se marcan con un "**".

9.5.2 Unidad de micropipeta MPE 60 / AS-GF

Los cargadores de muestras MPE 60 y AS-GF se utilizan en la técnica de tubo de grafito y en la de HydrEA. Existen varios dos modelos de cargadores:

- MPE 60: Cargador de muestras para la técnica de tubo de grafito con recipiente de mezcla
- MPE 60/1 y AS-GF: Cargadores de muestra sin recipiente de mezcla

El tipo de cargador se identifica al comienzo en la pantalla de conexión a través del ASpect CS.

En la ventana CARGADOR DE MUESTRAS se

- mostrará el tipo de cargador conectado
- ajustará el cargador
- volverá a lavar y reiniciar

- realizará un autotest.

Los parámetros para el análisis (posiciones en el plato de muestras, dilución, mezcla y fases de lavado) se especifican en el método, la secuencia y la identificación de muestras.

- Abra la ventana CARGADOR con el comando **DESARROLLO DE METODOS ► CARGADOR DE MUESTRAS** o con el símbolo



Botones en la ventana
Cargador

Botón	Descripción
[INICIALIZAR]	Reinicializar el cargador El cargador de muestras se iniciará al principio del trabajo con el AAS en la ventana PREAJUSTES (→ "Ajustes preparatorios: selección de la tarea" p. 14). Puede ser necesaria una nueva inicialización cuando el cargador de muestras pierde la orientación, p. ej. debido a un golpe mecánico. Se creará la conexión entre el cargador de muestras, el AAS y el ordenador.
[LAVADO]	Lavar MPE El líquido de lavado es bombeado mediante el módulo de dosificación a través de la manguera de muestras y depositado en el recipiente de lavado.



Atención:

conecte el cargador de muestras sólo cuando el AAS esté apagado.

No conecte el cargador de muestras con el equipo AAS encendido ya que puede dar lugar a errores de comunicación o a la destrucción del puerto de conexión.

9.5.2.1 Especificar cargador de muestras

En la ventana CARGADOR / PARAMETROS se especificarán o mostrarán los siguientes ajustes para los parámetros:

- Tipo de cargador
- Parámetros de lavado
- Ajustes para el control de limpieza
- Función para el lavado del recipiente de mezcla

Los parámetros LAVAR y CONTROL DE LAVADO se adoptarán del método actual (→ "Cargador de muestras para la técnica de tubo de grafito (analítica de soluciones)" p. 34). Las modificaciones en la pestaña CARGADOR DE MUESTRAS / PARAMETROS no tienen ninguna influencia a la inversa en las entradas del método.

Ventana CARGADOR / PARÁMETROS para AS-GF

Tipo de cargador de
muestras

Opción	Descripción	
TIPO	"_"	No se ha seleccionado ningún cargador.
	MPE 60 o AS-GF	Cargadores de muestras para la técnica de tubo de grafito
PLATO	"_"	No se ha colocado ningún plato
	89 Pos	para MPE 60 Plato de muestras con espacio para 77 muestras en recipientes de muestras de 2 mL, 4 muestras especiales en recipientes de muestras de 5 mL y 8 muestras especiales en recipientes de muestras de 2 mL.
	108 Pos	para AS-GF Plato de muestras con espacio para 100 muestras en recipientes de muestras de 1,5 mL, 4 muestras especiales y 8 muestras especiales en recipientes de muestras de 5 mL.
VERSIÓN	Número de la versión del software del cargador de muestras.	

Modos de lavado

Opción	Descripción	
LAVADO	OFF	El lavado está desactivado. No se lavará de forma automática.
	DESPUES DE CADA MUESTRA	Lavado después de cada muestra, pero no dentro de una serie estadística.
	DESPUES DE CADA MEDICION	Lavado después de cada medición, por lo tanto, también dentro un serie estadística.
	DESPUES DE CADA COMPONENTE	Después de la introducción de cada componente (modificador, estándar, muestra, etc.) en el tubo de grafito, se lava el cargador de muestras.

CICLOS DE LAVADO RECIPIENTE DE LAVADO	Número de ciclos de lavado en cada ocasión: de 1 a 5.
--	---

Control de limpieza

Opción	Descripción
CONTROL DE LIMPIEZA	Iniciar lavado de limpieza. El proceso de lavado se comprobará a través de una medición repetida.
LÍMITE DE CONTROL	El valor al que tiene que volver el valor de la señal durante el lavado, antes de que se midan las muestras diluidas o con escasa concentración.

Lavar el recipiente de mezcla del MPE 60

LAVADO RECIPIENTE DE MEZCLA	Lavar el recipiente de mezcla por separado, fuera de la medición de una secuencia.
	VOLUMEN Indicar el volumen de lavado.
	INICIO Lavar recipiente de lavado.
CICLOS RECIPIENTE DE MEZCLA	Número de ciclos de lavado para el recipiente de mezcla En un ciclo de lavado, el recipiente de mezcla se llena con líquido de lavado o diluyente y se vuelve a vaciar.

9.5.2.2 Parámetros técnicos del cargador de muestras

Especifique en la ventana CARGADOR / PARAMETROS TECN.:

- la profundidad de inmersión de la cánula/manguera de dosificación en los distintos recipientes
- la velocidad de trabajo del dosificador
- la orientación del brazo del cargador de muestras respecto a los recipientes
- el ajuste de profundidad automático en la toma de volumen durante el análisis
- la alineación del cargador de muestras respecto al horno de tubo de grafito.

Cargador

Parámetros **Parámetros técn.** Prueba de funcionamiento Posiciones

Acción	Tipo	Lugar	Profundidad mm	Vel. Etapa
Absorbedor	AS-GF	Recipiente de mue:	50	3
Absorbedor	AS-GF	Recipiente especia	50	3
Inyectar muestra	AS-GF	Horno de grafito	-1.1	1
Inyectar especial	AS-GF	Horno de grafito	-1.1	1

☒ Ajuste de profundidad automático

Recipientes de muestras

Align sampler to furnace

☐ Iluminación/Cámara del horno vaciar vasos mezcladores

Tabla

Velocidad: 3

Profundidad [mm]: 50

Profundidad en pos: 1

☐ Ajustar

Lavado Inicializar OK Cancelar

Ventana CARGADOR / PARAMETROS TECN.

Para los diferentes tipos de recipientes se toman en cuenta las siguientes acciones:

Recipiente	Acción
RECIPIENTES DE MUESTRAS	Absorber las muestras a través del dosificador.
RECIPIENTES ESPECIALES	Absorber muestras especiales.
RECIPIENTE DE MEZCLA	Dosificar diluyente y solución de analito y absorber muestras después de la dilución.
TUBO DE GRAFITO	Injectar muestras o muestras especiales en el tubo de grafito.

Tabla

Columna	Descripción
ACCIÓN	Acciones posibles: ABSORBER: absorber muestra del recipiente de muestras, especial o de mezcla. DOSIFICAR: dosificar la muestra en el recipiente de mezcla. INYECTAR: inyectar muestra o muestra especial en el tubo de grafito.
TIPO	Tipo de cargador de muestras conectado.
LUGAR	Recipiente en el que se realiza la acción.
PROFUNDIDAD	Profundidad de inmersión de la cánula en mm
VEL. ETAPA	Velocidad de trabajo del dosificador. El dosificador trabaja más rápido con valores mayores y más despacio con valores menores. Valores recomendados: ABSORBER MUESTRAS 3 DOSIFICACION EN EL RECIPIENTE DE MEZCLA 9 INYECCION EN EL TUBO DE GRAFITO 1

Área TABLA

Con los elementos de manejo en TABLA puede modificar los parámetros del renglón marcado en la tabla.

Opción	Descripción
VELOCIDAD	Velocidad del dosificador
PROFUNDIDAD [MM]	Ajustar la profundidad de inmersión de la cánula o de la manguera de dosificación. La profundidad de inmersión se calculará desde la posición más alta del brazo del cargador de muestras.
PROFUNDIDAD EN POS.	Posición del recipiente de muestras o el especial en la que se comprobará la profundidad de inmersión.
AJUSTAR	Cuando está activada, el brazo del cargador de muestras se mueve sobre el recipiente para el que hay que cambiar la posición. Con recipientes de muestras y recipientes especiales, se trata de la posición de muestra definida en PROFUNDIDAD EN POS. Cuando no está activada, la profundidad de inmersión y la velocidad se modificarán sin que el brazo del cargador de muestras se mueva sobre un recipiente.

Ajuste de profundidad automático

Opción	Descripción
AJUSTE DE PROFUNDIDAD AUTOMÁTICO	La profundidad de inmersión de la manguera de dosificación en los recipientes de muestras y especiales se ajustará automáticamente, después de la toma de la muestra, al nuevo volumen.
[RECIPIENTES DE MUESTRAS]	Sólo está activo cuando el AJUSTE DE PROFUNDIDAD AUTOMÁTICO está activado. Abre la ventana POSICIONES, VOLUMEN Y PROFUNDIDADES CARGADOR DE MUESTRAS para el ajuste de geometrías de recipientes y volúmenes diferentes de recipientes individuales. Los ajustes se tendrán en cuenta en el ajuste de profundidad automático (→ "Ajuste de profundidad automático" p. 154.).

Otras funciones

Opción	Descripción
[VACIAR RECIPIENTES DE MEZCLAS]	Sólo con MPE 60/2 y AS-GF Sólo se activa cuando se han utilizado recipientes de muestras como recipientes de mezclas. Las posiciones definidas en la ventana METODO / ALIMENTACION DE MUESTRAS se liberan para un nuevo uso.
[ABRIR HORNO] / [CERRAR HORNO]	Abre o cierra el horno para cambiar el tubo del horno.
[ALINEAR EL MPE CON EL HORNO]	Al accionar el botón, se iniciará el ajuste del MPE, dirigido en la pantalla, para el horno de tubo de grafito (→ "Alinear el MPE 60 respecto al horno de tubo de grafito" p. 156).

9.5.2.3 Ajustar la profundidad de inmersión y la velocidad de dosificación

1. Marque en la pestaña CARGADOR / PARAMETROS TECNICOS los renglones de la tabla cuyos parámetros desea modificar.
2. Al especificar los recipientes de mezclas o de muestras, determine en el campo PROFUNDIDAD EN POS. la posición en el plato de muestras en la que quiere comprobar la profundidad de inmersión.
3. Active la casilla de control AJUSTAR para mover el brazo a la posición del recipiente.
4. Observe el movimiento del brazo del cargador de muestras y modifique los parámetros VELOCIDAD y PROFUNDIDAD hasta obtener el resultado deseado.

9.5.2.4 Ajuste de profundidad automático

Con el reajuste automático de la profundidad de inmersión de la manguera de dosificación en los recipientes de muestras y especiales se evita la contaminación innecesaria de la manguera de dosificación. La manguera de dosificación se sumerge en el recipiente de muestras sólo lo suficiente para realizar la toma de la muestra. Con una toma en aumento, la profundidad de inmersión se regula de forma automática.

Las profundidades de inmersión definidas en la ventana CARGADOR / PARAMETROS TECN. para recipientes de muestras o especiales sirven, en un principio, para todos los recipientes en el plato de muestras.

Los volúmenes de inyección o tamaños de los recipientes diferentes de los recipientes estándar pueden especificarse por separado, y se tendrán en cuenta con el ajuste automático de profundidad.

1. Active en la ventana CARGADOR / PARAMETROS TECN. la casilla de control AJUSTE DE PROFUNDIDAD AUTOMATICO.
2. Haga clic en [RECIPIENTES DE MUESTRAS].

Se abre la ventana POSICIONES, VOLUMEN Y PROFUNDIDADES CARGADOR DE MUESTRAS.

Ventana POSICIONES, VOLUMEN Y PROFUNDIDADES AUTOMUESTREADOR

Se pueden especificar los siguientes parámetros para los distintos recipientes de muestras y especiales:

Opción / Botón	Descripción
POSICIÓN	Definir la posición del recipiente (a la que se aplican los tres valores mostrados: volumen, profundidad y diámetro) en el plato de muestras. Hay que realizar algunos ajustes para los recipientes que se van a modificar.
VOLUMEN	Indica el volumen que ya se ha tomado del recipiente o permite la inyección del volumen de muestra que falta en un recipiente que no está completamente lleno. El programa actualiza el valor después de cada toma de muestra.
PROFUNDIDAD	Indica la profundidad adicional correspondiente al volumen de muestra ya tomado. El valor se actualiza después de cada toma de muestra. La profundidad total de inmersión es la suma de la profundidad de inmersión especificada (columna PROFUNDIDAD en la pestaña PARAMETROS TECN.) y de la profundidad adicional aquí indicada.
DIÁMETRO	Indica el diámetro del recipiente. La profundidad se calcula sobre la base del volumen tomado.
CASILLA DE CONTROL DIÁMETRO	Para recipientes con dimensiones diferentes de los recipientes estándar. Cuando está marcada, se puede especificar el diámetro para cada recipiente de forma individual.
[BORRAR VOLUMEN]	Poner a 0 los valores de los volúmenes para todos los recipientes de muestras o especiales.
[REINICIAR]	Poner todos los volúmenes y profundidades de todos los recipientes a 0 y reiniciar los diámetros con los últimos valores guardados con [OK].

Máximas profundidades de inmersión (autoajuste)

Al especificar una profundidad de inmersión máxima se evita que la manguera de dosificación se golpee con el suelo del recipiente y se doble.

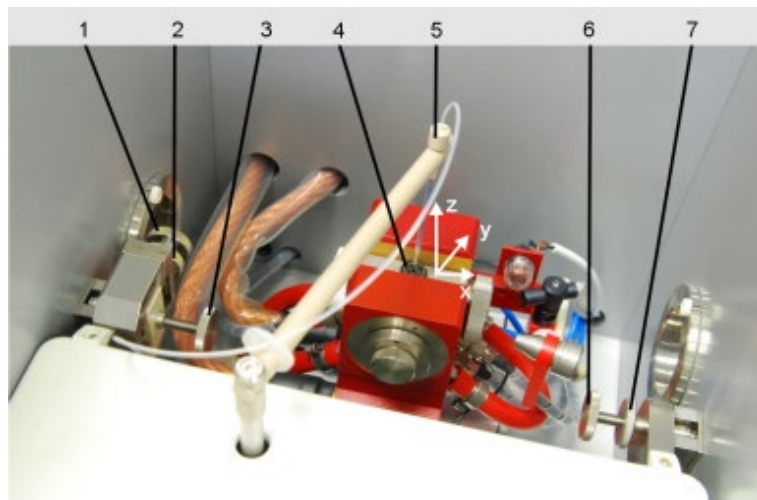
Opción	Descripción
RECIPIENTE DE MUESTRAS	Cuando está marcado, se aplican los ajustes de profundidad máxima de inmersión para los recipientes de muestras.
RECIPIENTES ESPECIALES	Cuando está marcado, se aplican los ajustes de profundidad máxima de inmersión para los recipientes de especiales.
PROFUNDIDAD [MM]	Profundidad de inmersión máxima del cargador de muestras en el recipiente de muestras o especial. Atención: cuando la casilla de control AJUSTAR está activada, el cargador de muestras se sumerge directamente con la nueva profundidad. Asegúrese de que el recorrido del cargador de muestras no está bloqueado. Guardar después la profundidad de inmersión modificada con [GUARDAR].
POSICIÓN	Posición en el plato de muestras en la que se prueban los ajustes de profundidad de inmersión.
AJUSTAR	Cuando la casilla está marcada, la manguera de dosificación se sumerge, de acuerdo con la profundidad definida en PROFUNDIDAD [MM], en el recipiente especificado en POSICION. La profundidad de inmersión se puede comprobar entonces visualmente. Atención: cuando la casilla de control AJUSTAR está activada, el cargador de muestras se sumerge directamente con la profundidad ajustada. Asegúrese de que el recorrido del cargador de muestras no está bloqueado.

9.5.2.5 Alinear el MPE 60 respecto al horno de tubo de grafito

La alineación del MPE respecto al tubo de grafito con ajuste final de la profundidad de inmersión de la manguera de dosificación en el tubo de grafito se realiza a través del programa.

1. Accione [ALINEAR MPE CON EL HORNO] en la ventana CARGADOR / PARÁMETROS TÉCN.
2. Seguir las indicaciones en la pantalla.

Tornillos de ajuste del MPE:



- | | | | |
|---|---------------------------------------|---|---------------------------------------|
| 1 | Tornillo de ajuste 1 | 5 | Brazo del automuestreador |
| 2 | Contratuerca del tornillo de ajuste 1 | 6 | Tornillo de ajuste 3 |
| 3 | Tornillo de ajuste 2 | 7 | Contratuerca del tornillo de ajuste 3 |
| 4 | Ayuda de ajuste con retícula | | |

MPE en el tubo de grafito

9.5.2.6 Comprobación de funcionamiento del cargador de muestras

Las funciones del cargador de muestras se pueden comprobar en la pestaña CARGADOR / PRUEBA DE FUNCIONAMIENTO.

Ventana CARGADOR / PRUEBA DE FUNCIONAMIENTO

Selección de vía/Rotación del plato

Dirigirse con el brazo del cargador de muestras a distintas posiciones:

Opción	Descripción
Nº DE RECIPIENTE	Dirigirse al recipiente de muestra seleccionado en el campo de al lado de la lista.
POSICIÓN DE LAVADO	Dirigirse al recipiente de lavado.

POSICIÓN DE MEZCLA	Dirigirse al recipiente de mezcla (con MPE 60).
POSICIÓN DEL TUBO	Dirigirse al tubo de grafito.

Pipeteador

Opción / Botón	Descripción
VELOCIDAD	Definir la velocidad de dosificación ("Ajustar la profundidad de inmersión y la velocidad de dosificación" p. 154).
VOLUMEN [μL]	Definir el volumen de pipeteo que se va a absorber.
[ABSORBER]	El volumen ajustado es absorbido con la velocidad de dosificación definida.
[DOSIFICAR]	El volumen ajustado es dosificado con la velocidad de dosificación definida.
VÁLVULA HACIA LA BOTELLA	Dirigir la válvula hacia la botella. La válvula cambia el flujo entre la botella con diluyente y la muestra. Al cambiar tiene que oírse un clic en la válvula.
[REINICIAR]	Volver a dosificar el volumen tomado.

Elevador de inmersión

Descender el brazo del cargador de muestras a la posición escogida de la selección de vía/rotación del plato.

Opción	Descripción
PROFUNDIDAD	Definir profundidad a la que tiene que descender el brazo del cargador de muestras.

Bombas

Opción	Descripción
BOMBA DE LAVADO	Iniciar la bomba para la alimentación del recipiente de lavado.
BOMBA DEL RECIPIENTE DE MEZCLA	Iniciar la bomba para el bombeo del recipiente de mezcla.

Programas de prueba

Comprobación del cargador de muestras con programas preconfigurados de prueba de secado en marcha. Para realizar la prueba los RECIPIENTES TIENEN QUE ESTAR VACIOS.

Al finalizar el programa de prueba, aparece un aviso para comunicar que la prueba se ha realizado de forma satisfactoria.

El inicio del programa de prueba seleccionado se realiza con el botón [INICIO].

Prueba	Descripción
PROGRAMA DE PRUEBA 1	Absorber volumen de la posición 1 Absorber volumen de la posición 41 Dosificar volumen en el tubo de grafito Lavar 2 veces (2x) la manguera de dosificación

PROGRAMA DE PRUEBA 2	Absorber diluyente de la botella de suministro Absorber volumen de la posición 10 Dosificar volumen en el recipiente de mezcla Absorber volumen del recipiente de mezcla Dosificar volumen en el tubo de grafito Lavar manguera de dosificación Vaciar recipiente de mezcla Lavar y vaciar recipiente de mezcla
----------------------	---

Test de errores

Comprobar que no haya errores en los sensores del cargador de muestras. Las mediciones se interrumpirán si surge alguno de los errores aquí registrados (en la pantalla aparecerá un mensaje de error).

Inicie la prueba de errores con [TEST]. El resultado de la prueba se indicará del siguiente modo: si la prueba sale bien, el círculo de control se pondrá verde, si sale mal, el círculo de control se pondrá rojo.

Si no se supera una prueba, puede que se deba a las siguientes causas de errores:

Opción	Descripción
NIVEL SOLUCIÓN DE LAVADO	El nivel de la botella de suministro es demasiado bajo (recipiente vacío)
NIVEL BOTELLA DE DESECHOS	El nivel de la botella de residuos es demasiado alto (recipiente lleno)
ACCIONAMIENTO DE VÍA/PLATO	Movimiento oscilante del brazo del cargador de muestras y giro del plato defectuosos.
IDENTIFICACIÓN DEL PLATO	No se reconoció el plato de muestras
DOSIFICADOR (ACCIONAMIENTO)	Error de la bomba de dosificación
DOSIFICADOR (VOLUMEN)	Se absorbió demasiado volumen del dosificador.

Botón [ALINEAR EL CARGADOR DE MUESTRAS]

Con [ALINEAR CARGADOR DE MUESTRAS] se ajusta el posicionamiento del brazo del cargador con respecto a los diferentes recipientes del cargador de muestras (→ "Ajuste de MPE 60 / AS-GF" p. 159).

9.5.2.7 Ajuste de MPE 60 / AS-GF

Los cargadores de muestras vienen ajustados de fábrica. Tendrá que realizar un reajuste en muy pocos casos (p. ej. tras un transporte inadecuado) cuando el brazo del cargador de muestras no se sumerja centrado en los recipientes. El reajuste se realiza controlado por ordenador en la ventana ALINEAR EL CARGADOR (haga clic en la ventana CARGADOR / PRUEBA DE FUNCIONAMIENTO en [ALINEAR EL CARGADOR]).

Alinear el cargador de muestras

Posición a ajustar

☐ Posición de mezcla

☒ Plato

☐ Posición de lavado

Posición a ajustar Plato

Profundidad [mm]:

Brazo oscilante

Plato de muestras

Pasos

Ventana ALINEAR EL CARGADOR DE MUESTRAS para MPE 60

Posición a alinear para MPE 60

Opción	Descripción
POSICIÓN DE MEZCLA	sólo MPE 60 con recipiente de mezcla Alinear el brazo del cargador de muestras respecto al recipiente de mezcla
POSICIÓN DE PLATO 1	Alinear el brazo del cargador de muestras respecto al recipiente de muestras en la posición 1 del plato de muestras
PROFUNDIDAD LAVADO	Profundidad de inmersión en el recipiente de lavado

Posición a alinear para AS-GF

Opción	Descripción
POSICIÓN DE MEZCLA	Alinear el brazo del cargador de muestras respecto al recipiente de mezcla
PLATO	Alinear el brazo del cargador de muestras respecto al recipiente de muestras en la posición 1 del plato de muestras
POSICIÓN DE LAVADO	Profundidad de inmersión en el recipiente de lavado
POSICIÓN FINAL HUB Z	

Posición a ajustar

Opción / Botón	Descripción
PROFUNDIDAD	Profundidad de inmersión en mm. Con este campo, el brazo de inmersión puede introducirse o extraerse del recipiente correspondiente. La profundidad de inmersión no es un parámetro optimizable en este caso. La posibilidad de modificar la profundidad de inmersión sirve solamente para estimar mejor el centro del recipiente.
BRAZO OSCILANTE [◀]/[▶]	Botones para modificar la posición del brazo del cargador de muestras. Si no, también se pueden utilizar los botones del cursor "Cursor a la derecha" y "Cursor a la izquierda."
PLATO DE MUESTRAS [◀]/[▶]	Botones para girar el plato de muestras. Si no, también se pueden utilizar los botones del cursor "Cursor hacia arriba" y "Cursor hacia abajo."
[GUARDAR]	Guarda los parámetros nuevos para la posición seleccionada. Se siguen utilizando hasta que se vuelvan a guardar nuevos estados de ajuste.

Ajuste de la profundidad en el recipiente de lavado para MPE 60

Opción / Botón	Descripción
PROFUNDIDAD [MM]	Definir la profundidad de inmersión en el recipiente de lavado en mm.
[GUARDAR]	Guardar la profundidad de inmersión en el recipiente de lavado.

Alinear cargador de muestras MPE 60

1. Coloque un recipiente de muestras en la POSICION 1 del plato de muestras.
2. Seleccione en la ventana ALINEAR EL CARGADOR la posición a ajustar.
3. Ajuste la profundidad de inmersión de modo que la posición respecto al recipiente se pueda calcular bien.
4. Reajuste la posición del brazo del cargador de muestras con los botones. Adicionalmente con posición del plato 1: reajuste la posición del plato de muestras con los botones.
5. Guarde los parámetros nuevos con [GUARDAR] en el firmware del cargador de muestras.
6. Repita las fases anteriores para la posición que no se ha ajustado todavía.

9.5.2.8 Vista de posiciones para MPE 60 y AS-GF

En la ventana CARGADOR / POSICIONES se mostrarán las posiciones utilizadas del plato de muestras en la secuencia actual.

Para la visualización se pueden seleccionar los modos TODAS LAS POSICIONES o SÓLO POSICIONES ESPECIALES.

9.5.3 Cargador de muestras para la analítica de sólidos

En la analítica de sólidos automática se utiliza el cargador de muestras sólidas SSA 600. El tipo de cargador se identifica al comienzo en la pantalla de conexión a través del ASpect CS. La ventana CARGADOR DE MUESTRAS SOLIDAS contiene las siguientes funciones:

- Prueba de funcionamiento del SSA 600
- Alineación del SSA 600 respecto al horno de tubo de grafito



1. Con el símbolo , abra la ventana METODOS.
2. En la tarjeta LINEAS, seleccione cualquier línea de análisis y en la tarjeta ALIMENTACION DE MUESTRAS el cargador de muestras conectado.
3. Active los ajustes con [ACEPTAR].
4. Abra la ventana CARGADOR DE MUESTRAS SOLIDAS con el comando DESARROLLO DE METODOS ► CARGADOR DE MUESTRAS o con el símbolo



Botones en la ventana
CARGADOR

Botón	Descripción
[INICIALIZAR]	Reinicializar el cargador El cargador de muestras se iniciará al principio del trabajo con el AAS en la ventana PREAJUSTES (→ "Ajustes preparatorios: selección de la tarea" p. 14). Puede ser necesaria una nueva inicialización cuando el cargador de muestras pierde la orientación, p. ej. debido a un golpe mecánico. Se creará la conexión entre el cargador de muestras, el AAS y el ordenador.
[AJUSTAR]	Iniciar una rutina para alinear el SSA 600 respecto al horno de tubo de grafito



Atención:

conecte el cargador de muestras sólo cuando el AAS esté apagado.

No conecte el cargador de muestras con el equipo AAS encendido ya que puede dar lugar a errores de comunicación o a la destrucción del puerto de conexión.

La preparación de muestras que se desvíe de la analítica de soluciones (determinar la tara de la plataforma de muestras o dosificar y pesar la muestra) se especificará en la ventana de Resultados en la pestaña de Sólido (→ "Analítica de sólidos con técnica de tubo de grafito" p. 92).

9.5.3.1 Comprobación de funcionamiento del cargador de muestras sólidas

En la ventana CARGADOR DE MUESTRAS SOLIDAS/PRUEBA DE FUNCIONAMIENTO se pueden comprobar funciones individuales.

Ventana CARGADOR DE MUESTRAS SOLIDAS / PRUEBA DE FUNCIONAMIENTO

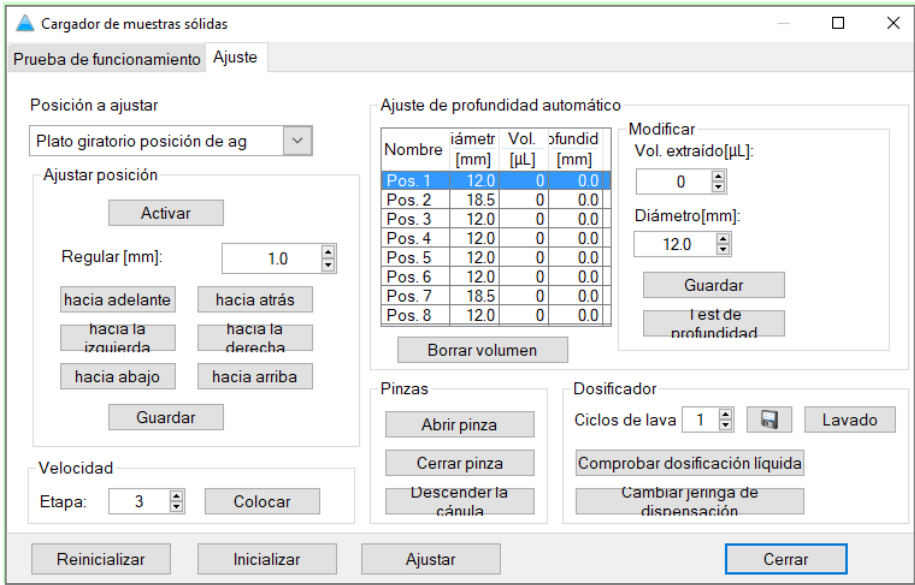
Opción	Descripción
ESTADO/PULSADOR	Mostrar estado del SSA 600 y el pulsador activado en el SSA 600 con el color correspondiente (verde, naranja o rojo) desde la última consulta. Con [ACTUALIZAR], se volverá a consultar el estado o se actualizará la indicación del pulsador.

ACTIVAR POSICIÓN	Activar la posición seleccionada en el cuadro de lista Pos.. En este caso no se tomará ni depositará ninguna plataforma.
GIRAR PLATO	Girar plato a la posición seleccionada.
TRANSPORTE	El SSA 600 transporta una plataforma de una posición a la posición de inicio u objetivo siguiente. Cuando TOMAR PLATAFORMA está activada, la pinza toma una plataforma. Cuando DEPOSITAR PLATAFORMA está activada, la pinza deposita la plataforma en la posición objetivo.
PINZAS	Abrir y cerrar pinza.
DESCENDER LA CÁNULA	Mover la cánula hacia abajo para la dosificación líquida.
BALANZA	Determinar el peso de una plataforma colocada en el plato en la posición (Pos.) seleccionada. PESAR CON FUNCION DE TARA Antes de pesar la plataforma, se tara la balanza. #1 muestra el peso de la tara. #2 muestra el peso de la plataforma (dado el caso, con muestra dosificada). CALIBRACION INTERNA Durante esta calibración se volverá a determinar la curva de calibración interna de la balanza. Además la balanza se volverá a poner en su sitio, el punto cero se determinará y después se pesará el peso interno. La curva de calibración de la balanza de calculará a partir del punto cero y el peso interno.
PRUEBA DE DURACIÓN	El cargador de muestras transporta dos plataformas (posiciones 1 y 2), de un lado a otro, entre el plato de muestras, la balanza y el horno. La cantidad del transporte se puede determinar en el campo CICLOS.

9.5.3.2 Ajuste del cargador de muestras sólidas

La ventana CARGADOR DE MUESTRAS SOLIDAS / AJUSTE contiene las siguientes funciones:

- Control y ajuste de la puesta en marcha de las distintas funciones del cargador de muestras
- Alineación del SSA 600 respecto a la posición del horno de tubo de grafito
- SSA 600 con módulo dosificador: ajuste de profundidad automático para la absorción de modificadores de matriz y muestras líquidas especiales.
- Prueba de la dosificación líquida



Ventana CARGADOR DE MUESTRAS SOLIDAS / AJUSTE

Opción / Botón	Descripción
POSICIÓN A AJUSTAR	Selección de la posición en el cargador de muestras
Botones en el grupo AJUSTAR POSICIÓN	Alineación de la pinza con la posición de ajuste determinada
[ABRIR PINZA]/[CERRAR PINZA]	Abrir y cerrar la pinza a través del software, p. ej., para cambiar las puntas de la pinza.
[DESCENDER LA CÁNULA]	En la dosificación líquida Descender la cánula.
[LAVADO]	Lavar la manguera de dosificación con el número de CICLOS DE LAVADO configurado y confirmado con  .
[COMPROBAR DOSIFICACIÓN LÍQUIDA]	Comprobar la dosificación líquida.
[CAMBIAR JERINGA DE DOSIFICACIÓN]	Mueve el pistón del órgano de dosificación hacia abajo para permitir el cambio del órgano de dosificación.

Ajustar/controlar posiciones individuales

1. Seleccione en la tabla POSICION A AJUSTAR la posición deseada.
2. En el grupo AJUSTAR POSICION, haga clic en [ACTIVAR] para mover el cargador de muestras a la posición seleccionada. Coloque una plataforma en esta posición y controle la posición de la plataforma.
3. Corrija, si fuera necesario, la posición con los botones en este grupo.
4. Guarde la configuración modificada con el botón [GUARDAR].

Alinear la pinza con el horno de tubo de grafito

Para alinear la pinza con respecto al horno de tubo de grafito se requieren las herramientas de ajuste apropiadas para el tipo de horno.

El ajuste se lleva a cabo controlado por el ordenador y se inicia con [ALINEAR] en la ventana CARGADOR DE MUESTRAS.

En las instrucciones de uso "Cargador de muestras sólidas SSA 600" se ofrece una descripción detallada.

Lavado del sistema

Sólo para SSA 600 con dosificación líquida.

Para el lavado del sistema, la solución de dilución se toma de la botella de provisión y se bombea por todo el recorrido, a través del módulo de dosificación hasta la manguera de dosificación, depositándose en el recipiente de lavado.

1. Introduzca el número de repeticiones en el campo de entrada CICLOS DE LAVADO.
2. Guarde el ajuste con el símbolo .
3. Inicie el proceso de lavado con el botón [LAVADO].

Ajuste de profundidad automático para la unidad de dosificación

El ajuste de profundidad en el SSA 600 se realiza, normalmente, de forma automática, es decir que mientras se absorbe más cantidad de los recipientes de la unidad de dosificación, la profundidad de inmersión se va ajustando. Las cantidades de salida que se desvíen de las establecidas en el método se corrigen en esta ventana. Los ajustes se realizan igual que los ajustes del MPE 60 (→ "Ajuste de profundidad automático" p. 154).

10 Gestión de datos

La ventana GESTION DE DATOS incluye las siguientes funciones:

- Impresión de los protocolos y ajustes de los análisis
- Gestión de métodos, secuencias y resultados
- Ajustes de las unidades disponibles en el método
- Definición de soluciones patrón madre y soluciones QC
- Gestión de los comentarios predefinidos por el usuario disponibles en todo el programa

La ventana Gestión de datos se muestra a través de los siguientes comandos:

- Clic en 
- Punto del menú EXTRAS ► DATOS

10.1 Impresión en ASpect CS

ASpect CS dispone de una amplio número de formatos de salida. Además de la impresión, los datos también pueden ser exportados en formato Excel, PDF, HTML, XML o texto o almacenados como imágenes en mapa de bits o gráficos escalables.

Para emitir resultados del análisis y contenidos de las ventanas (p.ej., de las ventanas método o secuencia) se utilizan plantillas de protocolos. De forma estándar se instala un conjunto de plantillas de protocolo. De ser necesario, dichas plantillas pueden editarse individualmente con el editor de protocolos "Módulo de informes e impresión List & Label".

10.1.1 Imprimir resultados del análisis

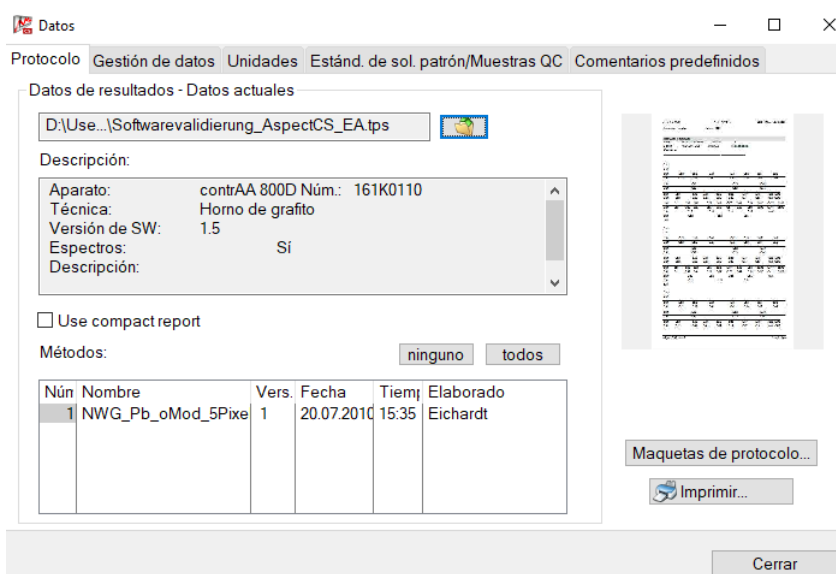
Imprimir informe general

El informe general de un análisis contiene los parámetros de método, la calibración y los resultados del análisis con los valores individuales de las muestras (series estadísticas). Los informes generales se pueden imprimir a partir tanto de los resultados en la ventana principal, como de los datos almacenados.

1. Abra la ventana DATOS / PROTOCOLO haciendo clic en 

También puede abrir la ventana con el comando EXTRAS ► DATOS o con el comando ARCHIVO ► IMPRIMIR ► PROTOCOLO.

Se muestran el nombre del archivo actual, información acerca del archivo (Lista descripción), así como todas las versiones de métodos que fueron tomadas en cuenta para la elaboración del archivo de resultados actual.



Ventana DATOS / PROTOCOLO con selección de impresión para los datos de resultados

- Si desea imprimir un archivo guardado, utilice  para abrir la ventana ABRIR y seleccione el archivo deseado.
- Marque en la tabla todas las versiones del método que deben ser imprimidas.
Realice la marcación haciendo clic con el ratón mientras mantiene presionada la tecla Ctrl. Con el botón [TODOS] se marcan todas las versiones; con [NINGUNO], se eliminan todas las selecciones marcadas.
- Para imprimir un resumen de los resultados, active la opción USAR PROTOCOLO COMPACTO.
- Con [IMPRIMIR], abra la ventana PROTOCOLO ASPECT CS.
- Allí, de ser necesario, modifique en la lista FORMATO DE SALIDA el formato de salida y con [OPCIONES] ajuste los parámetros especiales del formato de salida.
- Inicie la impresión con [INICIAR].

Impresión de las tarjetas de resultados de la ventana principal

- Active la tarjeta en la ventana principal cuyo contenido desea imprimir.
- Inicie la impresión con el comando ARCHIVO ► IMPRIMIR ► VENTANA ACTIVA....
Se abrirá la ventana Aspect CS Protocolo.
- Proceda de la misma manera descrita arriba para "Imprimir informe general".

10.1.2 Imprimir otros parámetros de análisis y ajustes

Es posible imprimir los siguientes parámetros y ajustes del análisis:

- Método
- Secuencia
- Datos de resultados y resumen de resultados
- ID de muestras
- QC (archivos de control de calidad)

- Calibración
- Posiciones del cargador de muestras

La impresión de los parámetros se lleva a cabo en la ventana correspondiente. Así, por ejemplo, la impresión de los parámetros de método se realiza desde la ventana METODO.

1. Active la ventana cuyo contenido desea imprimir en el escritorio del ASpect CS.
2. Comience la impresión de los parámetros con un clic en  en la ventana.
Alternativamente, seleccione el comando ARCHIVO ► IMPRIMIR ► VENTANA ACTIVA.
Se abrirá la ventana ASPECT CS PROTOCOLO.
3. Allí, de ser necesario, modifique en la lista FORMATO DE SALIDA el FORMATO DE SALIDA y con [OPCIONES] ajuste los parámetros especiales del formato de salida.
4. Inicie la impresión con [INICIAR].

10.1.3 Editar plantillas de protocolo

10.1.3.1 Utilizar el modo de borrador de protocolo

Las plantillas de protocolo instaladas de manera estándar se pueden adaptar individualmente. Para una mejor visión de conjunto, las vistas de protocolo pueden editarse con valores reales.

1. Active el comando ARCHIVO / MODO DE BORRADOR DE PROTOCOLO.
2. Abra la ventana cuya plantilla de protocolo dese modificar.
3. Seleccione el comando ARCHIVO / IMPRIMIR / VENTANA ACTIVA.
Se abre el editor de protocolos.
4. Realice los cambios deseados y guarde la plantilla de protocolo modificada.
5. Enlace la plantilla de protocolo con los respectivos contenidos de impresión (véase abajo "Gestionar plantillas de protocolo").

10.1.3.2 Breve introducción en el editor de protocolos

Los componentes individuales de la plantilla de protocolo se llaman objetos. Así, por ejemplo, una tabla puede estar compuesta de un objeto para la cabecera, otro para los valores de la lista y otro para un gráfico.

Dichos objetos contienen, a su vez, la información que se va a imprimir y llevan las características de diseño correspondientes, como tipos de letra, alineación, compensación, colores, etc.

El editor de protocolos ofrece diferentes tipos de objetos, como textos, gráficos, códigos de barras. Dichos objetos se pueden colocar de manera libre en el área de trabajo y se puede cambiar su tamaño. En función del tipo, un objeto puede representar diferentes informaciones o tener diferentes propiedades.

Por lo general, los objetos deseados son arrastrados con el ratón al área de trabajo y luego provistos de los contenidos y las características de diseño correspondientes. Alternativamente, usted también puede desplazar una variable de la lista de variables

con "arrastrar y soltar" al área de trabajo. Si en la posición de destino no se encuentra ningún objeto, se crea automáticamente uno y la variable es asignada a dicho objeto.

Para editar un objeto existente es necesario seleccionarlo primero. Para ello, haga clic con la tecla izquierda del ratón en el objeto. Un objeto seleccionado se reconoce por su marco resaltado. Cuando usted crea un nuevo objeto, este queda seleccionado automáticamente y su tamaño y posición pueden ser editados de inmediato. Mediante un clic doble se iniciará una ventana de diálogo con la cual se pueden modificar otros ajustes.

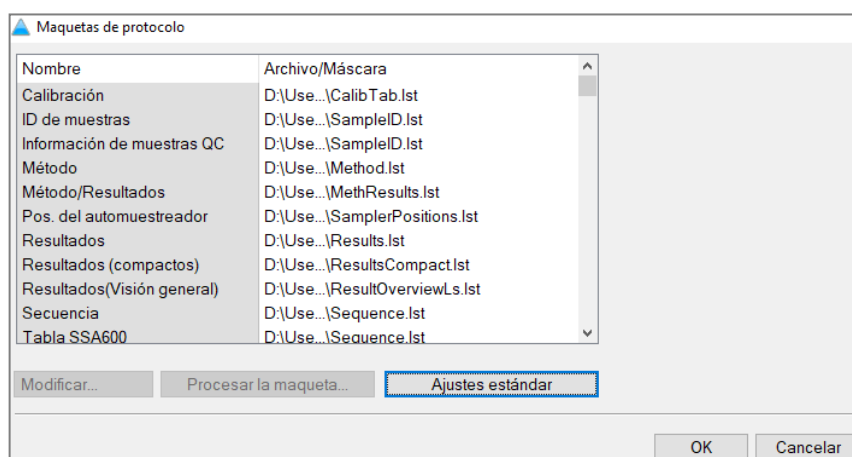
Encontrará más información acerca del manejo y las funciones del Editor de protocolos en el manual "Designer.pdf" en el CD ASpect CS.

10.1.3.3 Ventana MAQUETAS DE PROTOCOLO

En la ventana MAQUETAS DE PROTOCOLO se editan las plantillas y se asignan a las ventanas de ASpect CS. Es posible asignar varias plantillas a una ventana utilizando una máscara de archivo, desde la cual se elige la plantilla deseada al iniciar la impresión.



1. Abra la ventana DATOS / PROTOCOLO haciendo clic en
2. Abra con [MAQUETAS DE PROTOCOLO...] la ventana con el mismo nombre.



Ventana MAQUETA DE PROTOCOLO

Para las siguientes ventanas debe existir una plantilla de protocolo:

Nombre	Descripción
RESULTADOS	Contenido de la tarjeta RESULTADOS en la ventana principal
RESULTADOS (COMPACTOS)	
RESULTADOS (RESUMEN)	Contenido de la pestaña VISION GENERAL en la ventana principal
CALIBRACIÓN	Calibración de los análisis – Ventana CALIBRACION
MÉTODO	Parámetros de método – Ventana METODO
MÉTODO/RESULTADOS	Informe general (→ "Imprimir resultados del análisis" p. 166)
ID DE MUESTRAS	Datos de información de muestras – Ventana ID DE MUESTRAS / INFORMACION DE MUESTRAS
POSICIÓN DEL CARGADOR	Ocupación del cargador de muestras – Ventana CARGADOR DE MUESTRAS/POSICIONES

PESTAÑA QC	Datos de las tarjetas QC – Ventana QC
INFORMACIÓN DE MUESTRAS QC	Datos de información de las muestras QC - Ventana ID DE MUESTRAS / INFORMACION DE MUESTRAS QC
TABLA SSA600	Contenido de la pestaña SOLIDO en la ventana principal
SECUENCIA	Sucesión de secuencia – Ventana SECUENCIA

Modificar la asignación

1. Marque en la lista la ventana cuya plantilla de protocolo se modificará.
2. Con [MODIFICAR], abra la ventana para asignar los archivos.
3. Si solo se va a asignar una plantilla de protocolo, active la opción UTILIZAR ARCHIVO DE MAQUETA (*.IST) y luego, tras un clic en , seleccione el archivo deseado.
Si desea que se ofrezcan varias plantillas al mismo tiempo cuando se inicie la impresión, active la opción PERMITIR SELECCION DE ARCHIVO. Introduzca el nombre de la máscara utilizando búsquedas comodín en el campo de entrada.
4. Confirme los ajustes con [OK].

Editar plantilla de protocolo

1. Marque en la lista la ventana cuya plantilla de protocolo se editará.
2. Con [EDITAR], abra la ventana del EDITOR DE PROTOCOLOS.

Volver a establecer las configuraciones por defecto

- Para restaurar el estado en que se encontraba el programa ASpect CS después de su instalación, haga clic en [AJUSTES ESTANDAR].

10.2 Gestión de datos para métodos, secuencias y datos de resultados

ASpect CS gestiona de distintos modos los datos producidos.

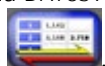
Los métodos y las secuencias para cada técnica de atomización se guardan por separado en una base de datos. La base de datos de los métodos lleva el nombre de "method.tps". La base de datos con las secuencias lleva el nombre "sequ.TPS".

Para los datos de resultado de una medición se crearán sus propias bases de datos. Se pueden añadir otros resultados a la base de datos a través de la medición. No es posible borrar muestras individuales de la base de datos. Las bases de los datos de resultados tienen la extensión ".tps".

Los datos de información de las muestras se guardarán en un formato que se pueda abrir con un programa de hoja de cálculo, p. ej. Excel, con la extensión ".csv".

Los métodos, secuencias y datos de resultado se pueden organizar en la ventana DATOS. También se utilizarán las mismas funciones de diálogo para la gestión de los métodos y secuencias al abrir y guardar estos datos.

- Abra la ventana DATOS / GESTION DE DATOS con el comando EXTRAS / GESTION DE DATOS o

con el símbolo .

The 'Datos' window has tabs: Protocolo, Gestión de datos (selected), Unidades, Estánd. de sol. patrón/Muestras QC, and Comentarios predefinidos.

Archivos/Entradas en banco de datos

Tipo: Método (dropdown)

Buttons: Importar..., Exportar..., Borrar...

Visión general de archivos (todas las técnicas)

	Número	Tamaño (MB)
BD de métodos:	5	0.483
BD de secuencias:	0	0.000
Datos de resultados:	11	0.822
(Datos de espectros)	9	20.501
Total:		21.806

Buttons: Actualizar, Buscar por muestras..., Cerrar

Pie Chart Legend:

- Memoria libre (HD) (197.518 GB) - Pink
- Datos (datos ASpect) (0.022 GB) - Green
- Ocupado (otros) (195.192 GB) - Blue

Ventana DATOS / GESTION DE DATOS

En esta ventana puede gestionar los métodos, secuencias y datos de resultados. Seleccione en el campo TIPO el tipo de dato deseado.

10.2.1 La ventana de base de datos

Los métodos y las secuencias se guardarán en la base de datos. Al guardar, abrir, borrar e importar o exportar métodos o secuencias, se abrirán ventanas de base de datos con los mismos elementos.

Export. Método

Nombre: Ni Co Cd Cat:

Nombre	Vers.	Fecha	Tiempo	Cat.	Usuario
Ni Co Cd	1	23.04.2018	17:40		ajservice

Clasificar según: Nombre/Vers. (dropdown) ☒ Ascendente ☐ Descendente

Descripción:

Buttons: Exportar, Cerrar

Ventana base de datos

Opción	Descripción
NOMBRE	Introducir nombres para el método/secuencia o mostrar el método/la secuencia seleccionados.

CAT.:	Distintivo adicional para buscar el método/la secuencia en la base de datos. Sólo se pueden introducir 3 caracteres como máximo para el nombre de la categoría. Puede limitar las entradas de la lista al indicar el nombre de la categoría en el campo CAT. Si desea visualizar los métodos/secuencias de todas las categorías, borre la entrada en el campo CAT.
LISTA DE MÉTODOS	Mostrar los métodos/secuencias guardados con nombre, versión, fecha, hora, categoría y usuario.
CLASIFICAR SEGÚN	Clasificar la lista de los métodos/secuencia de acuerdo con distintas características como nombre/versión o fecha/hora. La clasificación se realizará dependiendo de la selección de la opción ASCENDENTE o DESCENDENTE.
DESCRIPCIÓN	Introducir o mostrar anotaciones adicionales, p. ej. para utilizar el método/secuencia. Mediante el botón [...] pueden seleccionarse descripciones definidas por el usuario (→ "Crear comentarios predefinidos" p. 176).
SÓLO MOSTRAR VERSIONES ACTUALES	Si existen varias versiones de un método/secuencia con el mismo nombre, se mostrará, entonces, sólo el método/secuencia con el número de versión más alto. Los métodos/secuencias con el mismo nombre no se sobrescriben en el software ASpect CS, si no que se creará otra versión y el número de la versión se aumentará en 1.

10.2.2 Gestionar métodos y secuencias

Puede importar, exportar o borrar los conjuntos de datos de distintos métodos/secuencias de las bases de datos para métodos/secuencias. Los métodos y secuencias se señalarán en el resto del texto de este fragmento con conjuntos de datos.

Nota

La selección de varios conjuntos de datos de la ventana de base de datos se realiza con la tecla Ctrl o la de mayúsculas apretada.

- Abra la ventana DATOS / GESTION DE DATOS con el comando EXTRAS / GESTION DE DATOS o con el símbolo



- Seleccione en la ventana TIPO el tipo de conjunto de datos que se va a utilizar: METODO o SECUENCIA.

Exportar conjuntos de datos

Al exportar, pone a disposición los conjuntos de datos de otros equipos AAS del mismo tipo. Se pueden exportar varios conjuntos de datos a la vez en un archivo conjunto. Los archivos de exportación contienen las siguientes extensiones: conjuntos de datos de métodos: ".MET" y conjuntos de datos de secuencias: ".seq".

1. Abra la ventana de la base de datos con [EXPORTAR].

2. Seleccione los conjuntos de datos y haga clic en [EXPORTAR].
Se abrirá la ventana estándar GUARDAR COMO.
3. Introduzca un nombre de archivo y confírmelo con [OK].
Se muestra la ventana de la base de datos con los archivos exportados.
4. Cierre la ventana de la base de datos con [CERRAR] y vuelva a la ventana DATOS.

Importar conjuntos de datos

Al importar, puede cargar los conjuntos de datos de otros equipos AAS del mismo tipo en su base de datos. Un archivo de importación puede contener varios conjuntos de datos de los que puede seleccionar aquellos que desea cargar.

1. Abra con [IMPORTAR] la ventana SELECCIONAR EL ARCHIVO DE METODO A IMPORTAR con las funciones estándar para abrir archivos.
2. Seleccione el archivo que desea importar.
3. Confirme la selección con [ABRIR].
Se abrirá la ventana de la base de datos con la edición de nombres, fecha de creación y categoría de los conjuntos de datos contenidos en el archivo. En el renglón del título de la ventana se mostrará el nombre del archivo importado.
4. Seleccione en la ventana de la base de datos los conjuntos de datos que desea importar y haga clic en [IMPORTAR].
Los conjuntos de datos se importarán a la base de datos. Si existiera un método/secuencia con el mismo nombre, se creará una nueva versión del método. En la ventana de la base de datos aparecen las versiones actuales de los conjuntos de datos existentes.
5. Cierre la ventana de la base de datos con [CERRAR] y vuelva a la ventana DATOS.

Borrar conjuntos de datos

Con la función de borrar, borrará de forma permanente conjuntos de datos completos de la base de datos.

1. Abra con [BORRAR] la ventana de la base de datos.
2. Seleccione los conjuntos de datos que desea borrar.
3. Haga clic en [BORRAR].
La ventana de la base de datos se actualizará y mostrará tan sólo los conjuntos de datos restantes.
En los conjuntos de datos del mismo nombre se conserva el número de la versión y no se realiza una nueva numeración.

Borrar conjuntos de datos a través del archivo de menú

- Alternativamente, usted puede abrir la ventana de base de datos BORRAR METODO o BORRAR SECUENCIA con el comando ARCHIVO ► BORRAR ► METODO o ARCHIVO ► BORRAR ► SECUENCIA.
- Proceda como se ha descrito anteriormente.

10.2.3 Gestionar archivos de resultados

Los datos de resultado se guardarán siempre durante la medición como base de datos. Una base de datos con datos de resultado se puede copiar o borrar.

1. Abra la ventana DATOS / GESTION DE DATOS con el comando EXTRAS ► GESTION DE DATOS o con el símbolo



2. Seleccione en la ventana TIPO la opción RESULTADOS.

Copiar datos de resultados

Copie con este comando una o más bases de datos, al igual que los archivos de espectros existentes en otra carpeta.

1. Abra con [COPIAR] la ventana COPIAR ARCHIVOS DE RESULTADOS con la vista sobre bases de datos de resultados existentes.
Se registrarán los nombres, tamaño y hora de la última modificación de los archivos de resultados.
2. Seleccione con el ratón las bases de datos de resultados que desea copiar. Seleccione varias bases de datos con la tecla Ctrl o la de mayúsculas apretada.
3. Abra con el comando [COPIAR] la ventana SELECCIONAR CARPETA.
4. Seleccione la carpeta y confirme con [OK].

Los datos de resultado se copiarán en esta carpeta.

Borrar datos de resultado

Borre permanentemente los datos de resultado y/o los espectros.

1. Abra con [BORRAR] la ventana BORRAR ARCHIVOS DE RESULTADOS con la vista sobre los archivos de resultados existentes.
Se registrarán los nombres, tamaño y hora de la última modificación de las bases de datos de resultados.
2. Seleccione con el ratón la base de datos de resultados que desea borrar. Seleccione varios archivos con la tecla Ctrl o la de mayúsculas apretada.
3. Haga clic en [BORRAR] cuando desee borrar la base de datos de resultados y quizá los espectros guardados
o
haga clic en [SOLO BORRAR DATOS ESPECT.] cuando desee borrar solamente los archivos de espectros.
4. Confirme la consulta para borrar archivos con [OK].
Los archivos se borrarán de forma permanente.

10.2.4 Copiar archivo de líneas/longitudes de onda

El archivo de líneas/longitudes de onda con los parámetros de líneas y, si se incluyen, también las correcciones de desviación se pueden copiar en una carpeta seleccionada y ver con un editor de texto.

1. Abra la ventana DATOS / GESTION DE DATOS con el comando EXTRAS ► GESTION DE DATOS o con el símbolo



2. Seleccionar en la lista TIPO la opción CLD ARCHIVO DE LINEAS/LONGITUDES DE ONDA.
3. Abra con el comando [COPIAR] la ventana SELECCIONAR CARPETA.
4. Seleccione la carpeta y confirme con [OK].

El archivo de líneas/longitudes de onda se copiará en esta carpeta.

10.3 Especificación de unidades

En la ventana DATOS / UNIDADES se gestionan las unidades disponibles en todo el programa.

- La ventana DATOS se abre con el comando EXTRAS ► GESTION DE DATOS o con el símbolo



Están disponibles 5 opciones preferenciales (para soluciones: mg/L, µg/L, ng/L, µg/mL y ng/mL; para muestras sólidas: mg/kg, µg/kg, ng/kg, µg/g y ng/g). El usuario no puede cambiar las unidades. Otras unidades diferentes pueden ser definidas por el usuario. Para definir libremente las unidades, tiene que introducir el factor de conversión en FACTOR:

Opción	Descripción
UNIDAD	Denominación de la unidad (máx. 10 caracteres)
COMENTARIO	Comentarios (máx. 20 caracteres)
FACTOR	El factor 1 corresponde a 1 µg/L o µg/kg, el factor 1.000 corresponde a 1 ng/L o ng/kg
TIPO	sólido = unidad de muestra sólida, líquido = unidad de muestra líquida (solución)

Con los botones [ADJUNTAR] e [INSERTAR] se introducen unidades nuevas al final de la lista o por encima de la marca actual de los renglones. El botón [BORRAR] elimina sólo unidades definidas por el usuario, las unidades predefinidas no se pueden borrar. Los cambios se guardarán permanentemente a través de GUARDAR.

10.4 Especificación de soluciones patrón madre y muestras QC

La combinación de soluciones patrón madre y muestras QC utilizada con frecuencia, se gestiona a través de DATOS / SOL. PATRÓN MADRE/MUESTRAS QC.

- La ventana DATOS se abre con el comando EXTRAS ► GESTION DE DATOS o con el símbolo



La combinación de estándares multielemento, utilizados con frecuencia, está disponible en todo el programa.

Opción / Botón	Descripción
SELECCIÓN	Cambiar la lista entre SOL. PATRON MADRE y MUESTRAS QC.
NOMBRE	Introducir nombre del estándar (máx. 20 caracteres).

ELEMENTOS Y CONCENTRACIONES	La definición de la concentración de elementos se lleva a cabo en el <i>Símbolo de elemento, concentración</i> en la unidad seleccionada, p. ej., Fe 0,5; Cu 10; Co 0,005. Si no, también puede abrir con [CONCENTRACIONES] el campo del mismo nombre en el que puede ordenar la concentración de los elementos.
UNIDAD	Introducir nombre de la unidad del estándar (máx. 10 caracteres).
[ADJUNTAR]	Introducir un nuevo renglón al final de la lista.
[INSERTAR]	Introducir renglones por encima de un renglón marcado de la lista.
[BORRAR]	Borrar los renglones seleccionados.
[CONCENTRACIÓN]	Abrir campo para definir elemento y concentración del estándar marcado.

- Concentraciones estándar
1. Añada con [NUEVO] un nuevo renglón a la lista estándar o seleccione un renglón existente de dicha lista.
 2. Abra con [CONCENTRACION] la ventana de concentraciones con la lista de elementos.
 3. En la lista de elementos, defina las concentraciones correspondientes para todos los elementos incluidos en el estándar y confírmelas con [OK].

10.5 Crear comentarios predefinidos

Para los siguientes procesos se pueden configurar comentarios predeterminados por el usuario:

- Guardar métodos
- Guardar secuencia
- Iniciar nuevo cálculo
- Iniciar medición

Los comentarios predeterminados pueden insertarse mediante los botones [...] junto al campo COMENTARIOS en las ventanas respectivas.

Crear comentarios

1. Abra la ventana DATOS / COMENTARIOS PREDETERMINADOS con el comando EXTRAS ► GESTION DE DATOS o con el símbolo .
2. Seleccione el proceso en la lista SELECCIONAR CATEGORÍA.
3. Abra la lista de los comentarios con un clic en [EDITAR PLANTILLA].
4. Cree un nuevo comentario con un clic en [NUEVO]. Introduzca una DENOMINACION, mediante la cual será posible seleccionar el comentario. En el campo TEXTO introduzca el comentario en sí.
5. Un comentario se puede editar con [MODIFICAR] o eliminar de la lista de selección con [BORRAR].

10.6 Guardar resultados en formato CSV/ASCII

Los resultados de medición se pueden guardar tanto de forma automática como manual en el formato ASCII/CSV. Para ambas formas de exportación, se ajustarán en la ventana OPCIONES / EXPORTACION CSV/ASCII los parámetros para la separación de los decimales y las columnas de resultados a exportar (→ "Opciones de exportación" p. 181).

Exportación de datos
continua y automática

Con la exportación de datos continua y automática, se agregarán todas las entradas a la tabla de resultados, al archivo ASCII establecido. Defina el nombre de este archivo ASCII en la ventana OPCIONES / EXPORTACION ASCII CONTINUA (→ "Opciones de la exportación ASCII continua" p. 182).

Exportación de datos
manual

Con la exportación manual de datos, puede seleccionar los renglones de las muestras a exportar de la tabla de resultados.

1. Señale las muestras en la lista de resultados.
Mantenga presionada la tecla Ctrl o la de mayúsculas y seleccione las muestras haciendo clic con el ratón en el renglón de la muestra.
Para marcar todos los renglones de muestras, utilice el comando PROCESAR ► MARCAR TODO.
2. Abra con el comando PROCESAR ► GUARDAR SELECCIÓN... la ventana estándar GUARDAR COMO.
3. Introduzca un nombre de archivo y confirme con [OK].
Los datos de las muestras se guardarán en un formato que se puede abrir con un programa de hoja de cálculo con la extensión ".csv".

10.7 Utilizar el portapapeles de Windows

10.7.1 Copiar datos de resultado en el portapapeles

Los resultados de muestras seleccionadas se pueden copiar directamente en el portapapeles de Windows y así facilitar el acceso a otras aplicaciones de Windows.

Los comandos para ello los encontrará en el menú PROCESAR.

Procesar ►	
SÓLO COPIAR COLUMNAS VISIBLES (Ctrl+C)	Copiar los resultados visibles de las muestras en la tabla actual.
COPIAR TODAS LAS COLUMNAS	Copiar los resultados de las muestras de todas las tablas.
TÍTULO DE COLUMNA	Cuando está activado (con una marca), se copiará el título del renglón con el nombre de la columna.

- Señale las muestras en la tabla deseada de la lista de resultados.
Mantenga presionada la tecla Ctrl o la de mayúsculas y seleccione las muestras haciendo clic con el ratón en el renglón de la muestra.
Para marcar todos los renglones de muestras, utilice el comando PROCESAR ► MARCAR TODO.

- Active, si fuera necesario, el comando PROCESAR ► TÍTULO DE COLUMNA para copiar también el título del renglón.
- Seleccione el comando correspondiente para copiar los resultados en el portapapeles.

10.7.2 Copiar gráficos como capturas de pantalla

Las ventanas con gráficos, los gráficos de curvas de calibración, las señales de absorbancia o espectros se pueden copiar en el portapapeles como capturas de pantalla.

1. Haga clic con el botón derecho del ratón sobre el gráfico.
Se abre un submenú con dos comandos de copiado.
2. Seleccione el comando de copiar para copiar el objeto deseado: copiar sólo el gráfico o toda la ventana que se muestra.
El objeto seleccionado se copia en el portapapeles y estará disponible para otras aplicaciones de Windows.

11 Configuración de ASpect CS

11.1 Configuración universal

En la ventana OPCIONES se efectuarán los siguientes ajustes, válidos para el manejo de ASpect CS:

- Opciones de vista
- Almacenamiento de archivos
- Parámetros para la exportación de datos
- Ajustes de medición universales

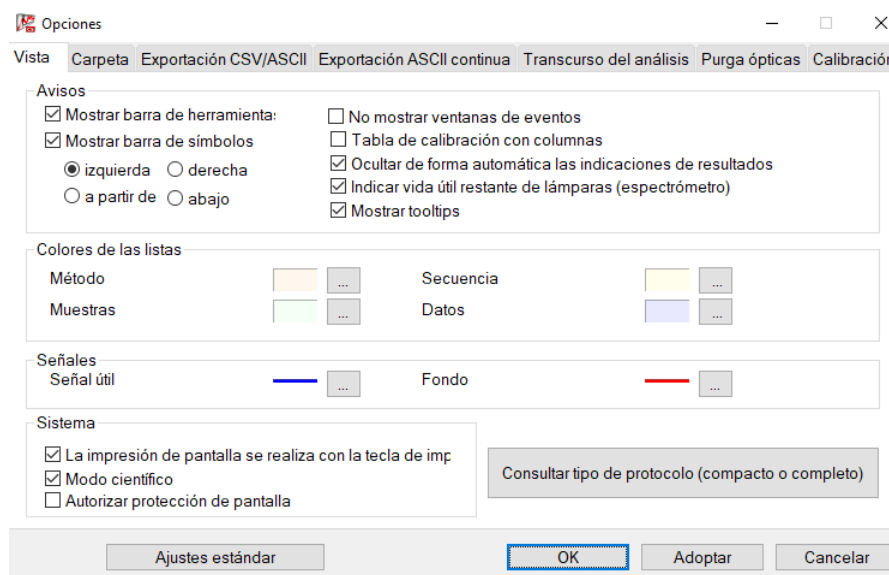
Los ajustes realizados se mantienen al salir y reiniciar ASpect CS.

- Abra la ventana OPCIONES con el comando EXTRAS ► OPCIONES o con el botón



11.1.1 Opciones de vista

En la ventana OPCIONES / VISTA establezca las funciones que deben estar visibles en el escritorio.



Ventana OPCIONES / VISTA

Avisos

Opción / Botón	Descripción
MOSTRAR BARRA DE HERRAMIENTAS	Mostrar barra de herramientas
MOSTRAR BARRA DE SÍMBOLOS	Mostrar barra de símbolos y seleccionar la posición de ésta. (La posición de la barra de símbolos se puede modificar si se arrastra con el ratón, este ajuste no quedará guardado).

NO MOSTRAR VENTANAS DE EVENTOS	No mostrar las ventanas de eventos amarillas (p. ej. tiempo de retardo). Los avisos de mostrarán entonces en la barra de estado de la ventana principal.
LAS VENTANAS DE TAREAS SE PUEDEN MAXIMIZAR	Activar el botón de maximización (esquina derecha) de las ventanas de tareas (ventanas MDI). De este modo se pueden maximizar las ventanas al tamaño de la lista de resultados.
TABLA DE CALIBRACION CON COLUMNAS	Mostrar girada la tabla de calibración para definir el estándar. Los distintos estándares de calibración se ordenan por columnas y las líneas de análisis seleccionadas por renglones.
OCULTAR AUTOMATICAMENTE INDICADORES DE RESULTADOS	Los indicadores de resultados se ocultan cuando la ventana inferior está abierta para evitar solapamientos,
INDICAR VIDA UTIL DE LAMPARAS (ESPECTROMETRO)	En la ventana ESPECTROMETRO se muestra el tiempo de servicio de la lámpara XBO (solo para fuentes de alimentación de lámpara desde versión 4). Al iniciar el programa se muestra un mensaje cuando se han sobrepasado las 1000 horas de servicio garantizadas de la lámpara.
MOSTRAR TOOLTIPS	Mostrar breve información (tooltips) sobre todos los botones y títulos de columna de las ventanas METODO, SECUENCIA e ID DE MUESTRAS.

Colores de las listas

El botón [...] abre el cuadro de diálogo para la selección de color. Se pueden definir colores predefinidos o colores nuevos para el fondo de las listas.

Señales

El botón [...] abre el cuadro de diálogo para la selección de color. Se pueden seleccionar colores predefinidos o que han sido definidos después para la indicación de la señal útil y la señal de fondo (solo técnica de horno).

Sistema

Opción	Descripción
LA IMPRESION DE PANTALLA SE REALIZA CON LA TECLA DE IMPRESION (O F5)	La impresión de pantalla se realiza de serie con [F5]. La tecla [IMPRESION DE PANTALLA] se utilizará para la función del portapapeles de Windows. Si este punto está activado, la tecla [IMPRESION DE PANTALLA] realiza la impresión de pantalla. La opción se activará al reiniciar ASpect CS.
MODO CIENTÍFICO	Activar la representación de espectros. Si este punto está desactivado, las funciones de representación y elaboración de los datos de espectros no están disponibles.

El botón [AJUSTES ESTANDAR] vuelve a ajustar todas las opciones y posiciones de las ventanas guardadas con los valores predefinidos.

11.1.2 Ruta de archivo

La ruta de archivo seleccionada durante la instalación y la selección de rutas para guardar archivos se definen en la ventana OPCIONES / CARPETA.

Archivo	Descripción
PROGRAMA	Ruta de instalación de los archivos ejecutables.
DIRECTORIO DE TRABAJO	Directorio para los datos del usuario. El directorio de trabajo contiene las otras subcarpetas. El directorio de trabajo se establece durante la instalación o a través de la gestión de usuario opcional.
ARCHIVOS TEMPORALES	Directorio para los archivos instalados temporalmente por el programa.
INFORMACIÓN DE MUESTRAS	Ruta predeterminada para abrir y guardar archivos con información de la muestra. La ruta se puede modificar. Al abrir y guardar los archivos con información de la muestra, se puede seleccionar otra ruta diferente.
EXPORT./IMPORT.	Ruta predefinida para la exportación e importación de datos de métodos y de secuencia. La ruta se puede modificar. Al exportar e importar se puede seleccionar otra ruta diferente.
RESULTADOS	Directorio para los datos de resultado. Este directorio estándar puede contener otras subcarpetas para guardar resultados. Estas carpetas están disponibles al inicio de la medición para archivar.
DATOS DE APLICACIÓN	Directorio para datos usados internamente por el programa ASpect CS.

El botón [AÑADIR] crea nuevas subcarpetas para guardar resultados dentro de la carpeta RESULTADOS. Las carpetas vacías se pueden borrar o renombrar.

11.1.3 Opciones de exportación

En la ventana OPCIONES / EXPORTACION CSV/ASCII se establecen los parámetros para la exportación ASCII de datos de resultados. Los parámetros sirven para ambas formas de la exportación de datos: la que se ejecuta de forma automática y la manual (→ "Guardar resultados en formato CSV/ASCII" p. 177).

Ajustes

Opción	Descripción
CARÁCTER DE SEPARACIÓN DECIMAL	Indica la separación de los decimales.
CARACTER DE SEPARACION DE LISTAS	Indica con qué carácter se separan los elementos de una lista.

En el campo CAMPOS DE RESULTADO PARA EXPORTAR se determina qué columnas de la tabla de resultados se exportan al archivo ASCII. Todos exporta todas las columnas de los ficheros seleccionados y no seleccionados de la lista de resultados, Sólo campos seleccionados abre una lista en la que se pueden seleccionar las columnas a exportar. El botón [AJUSTES ESTANDAR] vuelve a ajustar las opciones y posiciones de las ventanas guardadas con los valores predefinidos.

Notificación por correo electrónico

El botón [NOTIFICACION POR CORREO ELECTRONICO...] abre la ventana de configuración de la interfaz de correo electrónico. Dicha interfaz envía correos electrónicos automáticamente cuando finaliza el proceso de análisis o cuando se interrumpe debido a errores.

En correo saliente se indican los datos del servidor de correo saliente (servidor SMTP).

Opción	Descripción
SERVIDOR (SMTP)	Nombre o dirección del servidor SMTP
PUERTO	El número de puerto que se utilizará para el SMTP (normalmente el puerto 25).
DIRECCIÓN DE CORREO ELECTRÓNICO	Su correo electrónico completo.
NOMBRE DE USUARIO	Nombre de usuario para iniciar sesión en el servidor SMTP
CONTRASEÑA	Contraseña para iniciar sesión en el servidor SMTP La contraseña se guarda de manera cifrada.
DESTINATARIO DEL CORREO ELECTRÓNICO	Se pueden indicar hasta tres destinatarios
ACTIVAR NOTIFICACIÓN POR CORREO ELECTRÓNICO	Si está activada, se enviarán de manera automática correos electrónicos a los destinatarios indicados siempre cuando finalice el proceso de análisis o solo cuando se presenten errores. En caso de interrupción anticipada debido a un error se comunicará el fallo que la causó.
ENVIAR MENSAJE DE PRUEBA	Se enviará un correo electrónico de prueba a los destinatarios indicados.

11.1.4 Opciones de la exportación ASCII continua

En la ventana OPCIONES / EXPORTACION ASCII CONTINUA se activa la exportación de datos de resultado durante el desarrollo del análisis. El archivo de exportación se actualiza respectivamente después de la edición de un nuevo renglón en la ventana de transcurso y resultado. Los datos se agregan a los archivos existentes.

En la ventana OPCIONES - EXPORTACION CSV/ASCII se establecen otras opciones de exportación.

La casilla de control EXPORTACION ASCII CONTINUA DE DATOS DE RESULTADO activa la función de exportación.

Opción	Descripción
"DENOMINACIÓN DE MÉTODO".CSV	El nombre del archivo corresponde al nombre del método. La extensión del archivo es ".csv". El archivo se guarda en la ruta EXPORT./IMPORT. (ventana OPCIONES / CARPETA).
"DENOMINACIÓN DEL ARCHIVO DE RESULTADOS".CSV	El nombre del archivo corresponde al nombre del archivo de resultados. La extensión del archivo es ".csv". El archivo se guarda en la ruta EXPORT./IMPORT. (ventana OPCIONES / CARPETA).

OTRO	El nombre del archivo y la ruta se pueden adjudicar libremente. El botón [...] abre el cuadro de diálogo para seleccionar un archivo existente.
EXPORTACION DE ESPECTROS CONTINUA (CSV)	Los espectros se exportan además, cuando el archivo de espectros está activado, como archivos CSV en la ruta de exportación específica. El nombre de archivo se crea de acuerdo con el esquema: "renglón de la lista-nombre de la muestra-nombre de la línea-medición de repetición", p. ej.0007-Muestra-AI309-02.csv.
CREAR UN ARCHIVO PARA CADA MUESTRA	Para cada muestra se crea un archivo. El nombre de archivo se completa con el número de renglón de la lista de resultados y el nombre de la muestra. Los caracteres no permitidos se reemplazan con guiones bajos (p. ej., Testmethode-001 QC 1 mg_L.csv).
RUTA DE EXPORTACIÓN	Indicar una ruta de exportación para la exportación de espectros CSV continua.

11.1.5 Opciones para el transcurso del análisis

En la ventana OPCIONES / TRANSCURSO DEL ANALISIS establezca la configuración universal para el transcurso del análisis.

Detener después de los sucesivos errores

Opción	Descripción
FICHERO DEL SISTEMA ÓPTICO	El desarrollo del análisis se detiene cuando el sistema óptico está desajustado. Compruebe que el espectrómetro funciona correctamente (→ "Prueba de función del equipo en contrAA" p. 110).
FUNCIÓN DE CALIBRACIÓN NO VÁLIDA	El desarrollo del análisis se detiene cuando la función de calibración no se pudo calcular.

Comprobaciones de errores adicionales

Opción	Descripción
MONOTONÍA DEL PUNTO DE CALIBRACIÓN	No se realiza una prueba de monotonía del punto de calibración. La prueba de monotonía comprueba si concentraciones estándar superiores dan lugar también a valores de medición superiores.
SENSORES DE INDICACIÓN DE NIVEL DEL CARGADOR AUTOMATICO	Se consultan los sensores de indicación de nivel del cargador de muestras y también el sensor de las botellas de desechos.

Ventana de indicación

Opción	Descripción
CURSO DE LAS SEÑALES	Durante el desarrollo del análisis, se mostrará una ventana con una representación del desarrollo temporal de la señal de medición (p. ej. desarrollo de la absorbancia).
REPRESENTACIÓN DE ESPECTROS	Durante el desarrollo del análisis, se mostrará una ventana con una representación del rango espectral registrado.
GRÁFICO DE BARRAS	Muestra valores de medición con resultados de absorbancia o emisión como diagrama de barras.

ESCALA DEL VALOR DE ABSORBANCIA MAX.	Establece el máximo del eje de medición para las representaciones del curso de las señales y del espectro. AUTOM.: Escala automática de los ejes. (También se puede efectuar este ajuste con la función del menú Vista ► escala (Abs.))
VENTANA DE INFORMACIÓN	Durante el desarrollo del análisis, se mostrará una ventana con información sobre el estado del atomizador utilizado (de llama, sistema de hidruro).
CONC. MUESTRAS EN LA CURVA REFERENCIA	Muestra la ventana CONC. MUESTRAS EN LA CURVA REFERENCIA con la curva de calibración actual y con la curva de recalibración que se haya medido hasta el momento. Después de la medición de la muestra se traza, con líneas rojas, el cálculo de la concentración no corregida de la absorbancia o emisión. En el caso de la calibración por adición, se muestra la curva de calibración calculada.
CÁMARA DEL HORNO	Sólo en la técnica de tubo de grafito Intercala continuamente la imagen de la cámara del horno con la del tubo de grafito hasta que se alcanza la TEMPERATURA PARA LA APERTURA DEL SHUTTER ajustada en el control del horno (→"Otras funciones del horno" p. 134). Gracias a la cámara, el goteo de la muestra y el secado se pueden observar directamente.

Otros

Opción	Descripción
GUARDAR SIEMPRE LOS ESPECTROS	Independientemente de los parámetros de los métodos (ventana METODO / SALIDA), los datos de los espectros siempre se guardan en la medición.
ADJUNTAR FECHA/HORA A LOS NOMBRES DE LOS ARCHIVOS DE RESULTADOS	La fecha y hora actual del ordenador, al comienzo de la medición, se añaden automáticamente al nombre del archivo de resultados.
EXPORTACION CONTINUA TAMBIEN EN CASO DE RECALCULO	Después del recálculo, los resultados se exportan de forma automática (véase también "Opciones de la exportación ASCII continua" p. 182).
NO ACTUALIZAR EL SELLO DE TIEMPO AL HACER UN NUEVO CÁLCULO	Al hacer un nuevo cálculo se conservan los tiempos originales de la medición.
ACTUALIZAR LOS VALORES DE LUZ DISPERSA, SI LA LINEA ESTA POR DEBAJO DE:	Cuando se inicia la secuencia, se actualiza el nivel de luz dispersa para líneas por debajo de la longitud de onda seleccionada (nm) una vez al día. Adicionalmente, los valores pueden ser actualizados también al iniciarse la siguiente medición. Para ello, haga clic en el botón [VOLVER A REGISTRAR].
LIMPIEZA DE LA CAMARA DE MEZCLA AL APAGARSE LA LLAMA	Cuando se apaga la llama se lava la cámara de mezcla.

Sólo para la técnica de tubo de grafito

Opción	Descripción
TOMA DE COMPONENTES EN LA FASE DE ENFRIAMIENTO	Durante el enfriamiento del tubo de grafito, se absorbe la siguiente muestra con la MPE. Esta opción sirve para acelerar el proceso de medición.

PITIDO TRAS FINALIZAR LA FASE DE ENFRIAMIENTO	Al finalizar la fase de enfriamiento del tubo de grafito suena un pitido.
PARADA TRAS RECALENTAMIENTO DEL TRANSFORMADOR	Cuando se activa, el programa de medición se detiene si el transformador para la técnica de tubo de grafito se recalienta. No se vuelve a poner en marcha. Cuando se desactiva, el programa se detiene si el transformador se recalienta. Cuando el transformador se vuelve a enfriar, el programa continúa.
ACTIVAR LA LONGITUD DE ONDA ANTES DE CADA MEDICION	Si se activa, la longitud de onda se ajusta de nuevo antes de cada medición individual. Con esto se mejora la precisión de repetición (preajuste: activada)
OBLIGATORIEDAD PARA LA FORMACION DESPUES DE LA APERTURA DEL HORNO.	Si se activa, al iniciar una secuencia de medición se mostrará un mensaje que alerta acerca de la omisión de la formación, si esta no se produjo después de la apertura del horno o del encendido del equipo.
ACTIVAR RECONOCIMIENTO DEL TUBO Y DEL SECADO	Se activa el reconocimiento automático del tipo de tubo y de la conclusión de la fase de secado a través de la cámara del horno. La activación de dicha opción requiere el reinicio del programa ASpect CS.

11.1.6 Opciones de lavado del sistema óptico

Sólo para contrAA 800

En la ventana OPCIONES / LAVADO DEL SISTEMA OPTICO establezca los parámetros para el lavado del espectrómetro del contrAA 800. Mediante el lavado del sistema óptico se protege el espectrómetro frente a las impurezas. El lavado con **Argón** mejora además los **Límites de detección en el rango UV de onda corta**.

Opción	Descripción
LAVADO DEL SISTEMA ÓPTICO	Seleccionar gas de lavado aire o argón.
TIEMPO DE ESTABILIZACION DEL ARGON [MN]	Tiempo que se necesita antes de poder iniciar una medición mediante el lavado con argón.
TIEMPO DE AGOTAMIENTO DE ARGON [NM]	Tiempo que se necesita antes de poder iniciar una medición después de la activación del lavado con argón.

11.1.7 Opciones de calibración

En la ventana OPCIONES / CALIBRACION establezca la configuración universal para el cálculo de la calibración.

Opción	Descripción
MOSTRAR R EN LUGAR DE R^2 (ADJ.)	Indicación del coeficiente de correlación (según Pearson) en lugar del grado de determinación corregido
MOSTRAR BANDA DE PRONOSTICO EN LUGAR DE BANDA DE CONFIANZA	Indicación del intervalo de pronóstico (de los valores individuales) en lugar del intervalo de confianza (del valor promedio).

"AUTO" COMPARA CON FUNCION CUADRATICA EN LUGAR DE CON FUNCION RACIONAL	Si se marca, la función de calibración lineal se compara con la función cuadrática en lugar de con la función racional fraccionada.
CALCULAR RAMPA PARA LA CONCENTRACION MEDIA EN LUGAR DE 0	La rampa de la curva de calibración se calcula para la concentración media en lugar de para la intersección con el eje y (0).

11.2 Libro de recetas

El libro de recetas ofrece para la espectrometría de absorción atómica una vista general completa acerca de los elementos determinables y las configuraciones de equipo e indicaciones de análisis recomendadas para ellos por Analytik Jena GmbH. Al crearse un método pueden cargarse dichos datos específicamente para el elemento y la técnica como ajuste predeterminado. Sin embargo, también se puede acceder a la base de datos del libro de recetas por separado.

- Abra el libro de recetas con el símbolo  en la barra de herramientas o utilice el comando DESARROLLO DE METODOS ► LIBRO DE RECETAS.

12 Gestión de usuario

La gestión de usuario del ASpect CS está disponible opcionalmente. Contiene funciones ampliadas para el uso del ASpect CS de acuerdo con los requisitos FDA para firmas y registros electrónicos (21 CFR Part 11).

La gestión de usuario está provista de un nivel de administración y cuatro niveles de usuario. Un usuario con derechos de administración en el ASpect CS puede a través de la gestión de usuario:

- configurar el sistema de manera flexible (normas de contraseña y de registro, auditoría, firmas y directorios de datos)
- configurar un nivel de usuario con derechos graduados para cada usuario
- definir contraseñas para el acceso al software ASpect CS
- asignar a los usuarios un directorio de trabajo propio para métodos, secuencias y resultados
- examinar y exportar la auditoría (evento-protocolo) creada.

Con la gestión de usuario instalada y configurada, el punto del menú **Sistema** se activará en el ASpect CS. Con éste se puede acceder a las funciones de gestión de usuario.

Todas las modificaciones en los datos de usuario se guardarán permanentemente al cerrar la ventana correspondiente en una base de datos codificada.



Nota

Para poder acceder a los requisitos de seguridad, se tiene que utilizar el sistema operativo de Microsoft Windows XP / Windows 7 con las opciones de configuración correspondientes. Esto se refiere a los derechos de acceso a archivos y otros ajustes, que debe realizarlos un administrador de sistema autorizado.

12.1 Jerarquía y acceso a funciones

La gestión de usuario está provista de un nivel de administración y cuatro niveles de usuario.

Los niveles de usuario están sujetos a la siguiente jerarquía:

Administrador > Nivel 1 > Nivel 2 > Nivel 3 > Nivel 4.

Acceso a las funciones del
Aspect CS

Nivel de administrador

El usuario tiene todos los derechos en el ASpect CS y tiene acceso a todas las funciones de la gestión de usuario.

Nivel 1

Los usuarios del nivel 1 tienen acceso ilimitado a todas las funciones del Aspect CS, sin embargo no tienen acceso a la gestión de usuario.

Nivel 2

Como el nivel 1 excepto:

- Borrar métodos (identificación M1)

- Borrar secuencias (identificación P1)
- Borrar secuencias de tarjetas de registro QC (identificación Q1)
- Borrar archivos de resultado (identificación R1)

Nivel 3

Como el nivel 2 excepto:

- Guardar métodos (crear en la base de datos de métodos) (identificación M2)
- Guardar secuencias (crear en la base de datos de secuencias) (identificación P2)
- Modificar desviaciones de longitudes de onda (identificación W1)

Nivel 4

Como el nivel 3 excepto:

- Modificar parámetros de método (identificación E1)

(Este tipo de usuario sólo puede cargar métodos y secuencias creados y ejecutar mediciones).

Función	Identificación*	Admin.	Nivel 1	Nivel 2	Nivel 3	Nivel 4
Utilizar gestión de usuario		+	-	-	-	-
Borrar métodos	M1	+	+	-	-	-
Borrar secuencias	P1	+	+	-	-	-
Borrar tarjetas de registro QC	Q1	+	+	-	-	-
Borrar archivos de resultados	R1	+	+	-	-	-
Guardar métodos	M2	+	+	+	-	-
Guardar secuencias	P2	+	+	+	-	-
Modificar desviaciones de longitudes de onda	W1	+	+	+	-	-
Modificar plantillas de protocolo	L1	+	+	-	-	-
Modificar métodos	E1	+	+	+	+	-
Cargar métodos y secuencias		+	+	+	+	+
Ejecutar mediciones		+	+	+	+	+

*La identificación se utilizará en instrucciones.

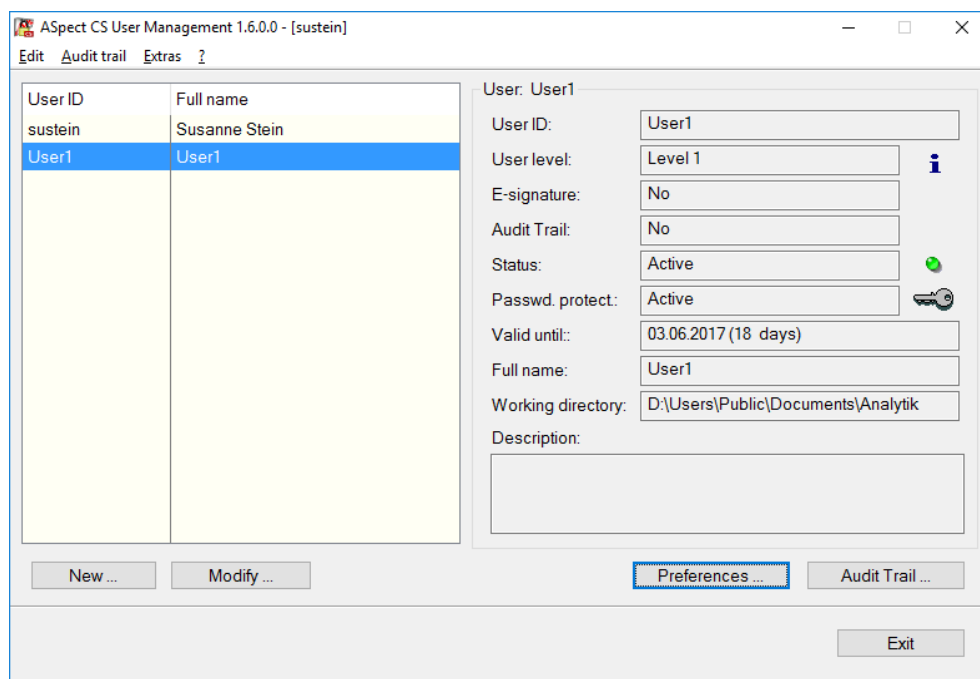
12.2 Configurar la gestión de usuario

La gestión de usuario se puede configurar al iniciar por primera vez la gestión de usuario, después de la instalación, o más adelante con usuarios que tengan derechos de administrador en el ASpect CS.

Se creará una cuenta para cada usuario en la que se guardará el perfil de usuario. Si no se va a necesitar más alguna de las cuentas de usuario, se pueden desactivar o bloquear. Las cuentas de usuario no se pueden borrar.

- Abra el comando SISTEMA ► USER MANAGEMENT o inicie la gestión de usuario a través de la entrada en el menú de inicio.

Después del registro se abre la ventana USER MANAGEMENT.



Ventana USER MANAGEMENT

Contiene una lista con los nombres de usuarios introducidos y las contraseñas correspondientes. En la parte derecha del cuadro de diálogo se mostrarán los detalles del perfil del usuario seleccionado.

Elementos de indicación y de manejo

Opción	Descripción	
USERID	Nombre de registro del usuario	
USER LEVEL	Administrador, del nivel 1 al nivel 4	
E-SIGNATURE	YES	el usuario puede firmar datos de resultado de forma electrónica.
	No	el usuario no puede firmar de forma electrónica.
ESTADO	Active	se puede utilizar el nombre de usuario (círculo verde).
	Disabled	el nombre de usuario está desactivado y no se puede utilizar (círculo rojo).
PASSWORD PROTECTION	Active	el registro de usuario requiere una contraseña (llave).
	Inactive	se puede realizar el registro de usuario sin contraseña (llave tachada).

VALID UNTIL	UNLIMITED DATE/DAYS	la contraseña nunca caduca. el usuario tiene que cambiar la contraseña cuando venza el plazo especificado.
FULL NAME	Nombre completo del usuario	
DESCRIPTION	Descripción opcional del usuario.	

Botones

Botón	Descripción
[NEW ...]	Crear nuevo usuario. Se abre la ventana INTRODUCIR DATOS DE USUARIO.
[MODIFY ...]	Modificar los datos de usuario para los renglones de la tabla marcados. Se abre la ventana Modificar datos de usuario para los renglones de la tabla marcados. El cuadro de diálogo también se puede abrir haciendo doble clic en el renglón correspondiente de la tabla.
[PREFERENCES...]	Modificar la configuración de la gestión de usuario.
[AUDIT TRAIL...]	Abrir Audittrail (protocolo de eventos) de la gestión de usuario.
[EXIT]	Activar la ayuda online
[NEW ...]	Finalizar la aplicación.

12.2.1 Configurar la gestión de usuario

En la ventana PREFERENCES se ajustarán las siguientes opciones:

- Normas para la contraseña
- Registro y auditoría
- Significados de las firmas
- Directorios de datos utilizados

1. Haga clic en la ventana ASPECT CS USER MANAGEMENT en [PREFERENCES...].

Se abrirá la ventana PREFERENCES.

2. Seleccione en la columna izquierda el grupo de opciones que desea modificar.

Los ajustes sirven para cuentas de usuario nuevas y se pueden ejecutar de forma adecuada después de la instalación.

- ✓ Al cerrar la ventana con [OK], se guardarán todos los ajustes, si la cierra con [CANCEL], se desecharán todos los ajustes modificados.

Botón	Descripción
[DEFAULT SETTINGS]	Establece los valores estándar (configuración de fábrica) para la selección correspondiente. Los ajustes de otras áreas no varían.

Registro/Contraseña

The screenshot shows a 'Preferences' dialog box with a sidebar on the left containing icons for 'Login', 'Folders', 'Audit Trail', and 'Signatures'. The 'Login' icon is selected. The main area is divided into two sections:

- Login policies (for new user names):**
 - Number of login attempts: 5 (spin box)
 - ☐ Disable account after failed login attempts
 - Minium user name length: 4 (spin box)
- Password policies (for new passwords):**
 - ☒ Enforce login with password
 - ☐ Password with letters and numbers:
 - ☐ Password and user ID must be different
 - ☒ "User must change password at next login" is active
 - Password expires in: 60 (spin box) day(s)
 - Minium password length: 4 (spin box)

At the bottom right are buttons for 'Default settings', 'OK', and 'Cancel'.

Ajustes para las normas de registro y contraseña

Normas de registro (para nombres de usuario nuevos)

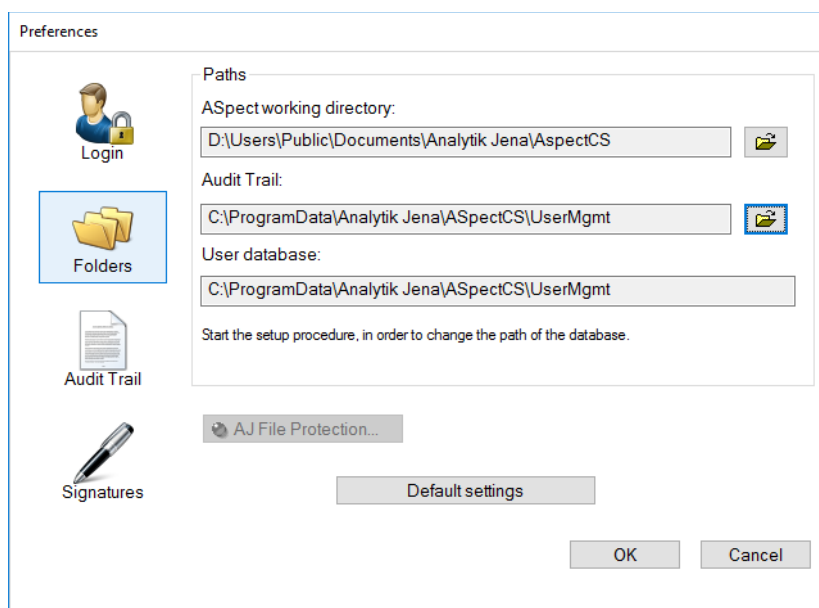
Opción	Descripción
NUMBER OF LOGIN ATTEMPTS	Número de intentos de registro inválidos (máx. 10) Si se supera la cifra, ASpect CS se cerrará después de un tiempo de espera y se tendrá que volver a encender para volver a registrarse. Aparecerá un aviso en el archivo de Audit Trail.
DISABLE ACCOUNT AFTER FAILED LOGIN ATTEMPTS	Cuando se sobrepase la cantidad máxima de intentos de registro inválidos el usuario será bloqueado. Se recomienda crear un administrador adicional para poden activar una cuenta de administrador bloqueada. En el archivo ASpectCS.ini (sección UseMgmt) se puede dejar una indicación para el desbloqueo, p. ej., una dirección de correo electrónico.
MINIMUM USER NAME LENGTH	Número mínimo de caracteres para un nombre de usuario nuevo. Número máximo de caracteres: 10

Normas de contraseña (para nombres de usuario nuevos)

Opción / Botón	Descripción
ENFORCE LOGIN WITH PASSWORD	Para nombres de usuario nuevos hay que introducir una contraseña.
PASSWORD WITH LETTERS AND NUMBERS	Número mínimo de caracteres para un nombre de usuario nuevo. Número máximo de caracteres: 10. Sólo se pueden introducir contraseñas que contengan tanto letras como cifras. Está norma también se aplicará al cambio de contraseña.
PASSWORD AND USER ID MUST BE DIFFERENT	Sólo se pueden introducir contraseñas distintas del nombre de usuario. Está norma también se aplicará al cambio de contraseña.

"USER MUST CHANGE PASSWORD AT NEXT LOGON!" IS ACTIVE	Para usuarios nuevos se activará de serie la casilla de control. La próxima vez que el usuario se registre en el ASpect CS, se le pedirá que cambie la contraseña.
PASSWORD EXPIRES IN ...DAY(S)	Una vez que venza el plazo, se le pedirá al usuario, cuando se registre en el ASpect CS, que cambie la contraseña. La contraseña se prolongará con el plazo establecido en las normas. El valor se añadirá como norma y se puede especificar, cambiándolo, para cada usuario (máx. 999 días).
MINIMUM LENGTH OF PASSWORD	Número mínimo de caracteres para contraseñas nuevas. Número de caracteres: de 3 a 10.

Carpeta

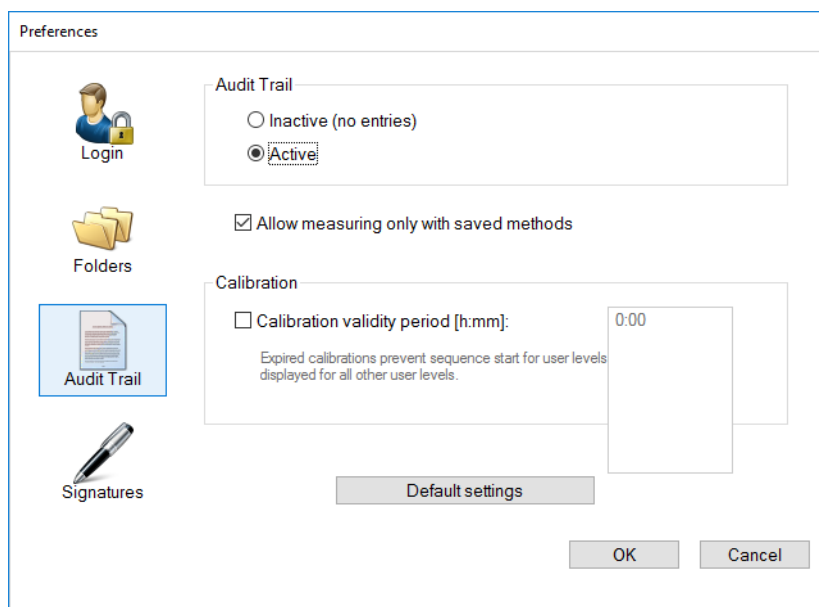


Ajustes para directorios

El directorio de trabajo del ASpect-CS y el directorio para el archivo de auditoría se pueden especificar.

Ruta	Descripción
ASPECT-WORKING-DIRECTORY	Directorio de trabajo del ASpect CS El directorio de trabajo contiene las bases de datos de métodos y secuencias y los archivos de resultados. El directorio de trabajo se estableció durante la instalación del ASpect CS y se puede cambiar aquí.
AUDIT TRAIL	Ruta del archivo de auditoría La ruta se puede modificar.
USER DATABASE	Ruta para la base de datos del usuario. La ruta sólo se puede modificar con el programa de instalación.
[AJ FILE PROTECTION]	Comprobar el estado de la protección de archivos. La protección de archivos opcional AJ FILE PROTECTION protege los archivos contra la manipulación voluntaria e involuntaria, p. ej., mediante la eliminación y modificación de los archivos. El botón solo está activo cuando la protección de archivos está instalada.

Audit Trail



Preferences

Audit Trail

☐ Inactive (no entries)

☒ Active

☒ Allow measuring only with saved methods

Calibration

☐ Calibration validity period [h:mm]: 0:00

Expired calibrations prevent sequence start for user levels displayed for all other user levels.

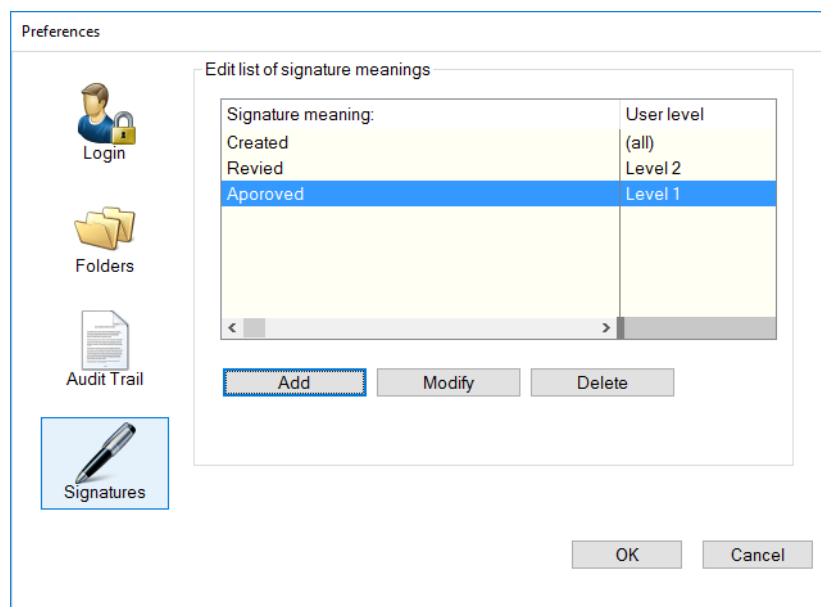
Default settings

OK Cancel

Ajustes para los datos de auditorías

Opción	Descripción
INACTIVE (NO ENTRIES)	No se pueden realizar entradas en el archivo de auditoría (evento-protocolo).
ACTIVE	Se pueden realizar entradas en el archivo de auditoría (evento-protocolo).
ALLOW MEASURING ONLY WITH SAVED METHODS	Si está activada, sólo se puede iniciar una medición en el ASpect CS cuando se haya cargado un método y éste no se haya modificado desde la última vez que se guardó.
CALIBRATION VALIDITY PERIOD	Si está activada se vigilará el tiempo de validez de la calibración. Si se ha vencido la validez de la calibración no se puede permitir la secuencia para niveles de usuario 3 y 4. Para los otros niveles se muestra un mensaje.

Editar firma



EDITAR LOS SIGNIFICADOS DE LAS FIRMAS

Editar los significados de las firmas

La lista muestra los significados de las firmas que se pueden seleccionar al firmar. Los significados de las firmas pueden definirse para el uso por determinados niveles de usuario.

Botón	Descripción
ADD	Introducir el significado de una firma, p. ej. creada, comprobada, autorizada (máx. 30 caracteres).
MODIFY	Modificar el significado de firma marcado en la lista.
DELETE	Borrar el significado de firma marcado en la lista.

12.2.2 Crear una nueva cuenta de usuario

Sólo los usuarios con derechos de acceso de administrador pueden configurar una cuenta usuario.

1. En la ventana USER MANAGEMENT, haga clic en el botón [NEW] para crear una nueva cuenta de usuario.
Se abrirá la ventana ADD USER DATA.
2. Efectúe los ajustes en los campos de entrada.
3. Confirme con [OK] las características de la nueva cuenta de usuario.

Add user data

User ID:

Full name:

Description:

User level: ⓘ

☐ Password never expires ⓘ

☐ User-specific data path
(D:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\AspectCS\sustein)

☐ Use e-signature

☐ View audit trail

☐ Disable user ID

☒ User must change password at next login

Agregar datos de usuario

Opción / Campo	Descripción
USER ID	Nombre con el que se registra el usuario. No se comprueban las mayúsculas ni las minúsculas. La longitud mínima depende de la configuración en REGISTRO/CONTRASEÑA (→ "Configurar la gestión de usuario" p. 190 y sig.). Máx. 32 caracteres.
FULL NAME	Nombre completo del usuario. Este nombre se utilizará como parte de la firma electrónica. Máx. 30 caracteres.
DESCRIPTION	Campo para anotaciones. Esta indicación es opcional.
USER LEVEL	Nivel de usuario.
PASSWORD...	Se abrirá el cuadro de diálogo para introducir la contraseña. Longitud máx. de la contraseña: 20 caracteres. La longitud mínima y otras normas de la contraseña se pueden configurar (→ "Configurar la gestión de usuario" p. 190 y sig.). En las contraseñas se diferenciarán las mayúsculas de las minúsculas. Al confirmar el cuadro de diálogo de la contraseña sin introducir una contraseña, se anulará la protección con contraseña. Símbolo LLAVE: La protección con contraseña está activada. Símbolo LLAVE TACHADA: El nombre de usuario no requiere una contraseña.
PASSWORD NEVER EXPIRES	Cuando está activada, la contraseña sirve indefinidamente. Cuando está desactivada, la contraseña caduca en un plazo determinado. El valor indicado, se tomará de las normas de contraseña. El usuario también puede prolongar la contraseña antes.

USER-SPECIFIC DATA PATH	Cuando está activada, se creará un directorio de trabajo propio para el usuario de acuerdo con el siguiente esquema: \ASpect-Directorio de trabajo\Nombre de usuario. Al registrarse por primera vez en el ASpect CS se creará la estructura de directorio correspondiente.
USE E-SIGNATURE	Cuando está activada, el usuario puede firmar resultados de medición de forma electrónica.
VIEW AUDIT TRAIL	Si se activa, el usuario puede visualizar el archivo Audit Trail en la aplicación (punto SISTEMA ► AUDITTRAIL).
DISABLE USER ID	Cuando está activada, no se puede utilizar el nombre de usuario. El nombre de usuario se puede desactivar temporalmente. Al desactivar (al contrario que eliminar) un nombre de usuario, se evita que este nombre se vuelva a utilizar para usuarios nuevos.
USER MUST CHANGE PASSWORD AT NEXT LOGON	La próxima vez que el usuario inicie el ASpect CS, se le pedirá que cambie la contraseña.

12.2.3 Modificar una cuenta de usuario existente

- Seleccione la cuenta de usuario que desea modificar haciendo clic en la tabla de la ventana de diálogo USER MANAGEMENT y active el botón [MODIFY].

Se abrirá la ventana de diálogo EDIT USER DATA con la nueva cuenta seleccionada (→"Crear una nueva cuenta de usuario" p. 194).

12.3 Examinar y exportar Audit Trail

En el archivo de auditoría se registran los eventos determinados del sistema y además todos los mensajes de aviso y error del ASpect CS.

- Haga clic en la ventana USER MANAGEMENT en el botón [AUDIT TRAIL...].
o:
- Seleccione en ASpect CS el comando SYSTEM ► AUDIT TRAIL

Respecto a la auditoría, puede:

- verla
- actualizarla
- filtrarla y organizarla
- imprimirla
- copiarla por motivos de seguridad y luego borrarla (sólo cuando la auditoría se abrió desde la ventana USER MANAGEMENT)
- exportarla como archivo "*.csv" (sólo cuando la auditoría se abrió desde la ventana USER MANAGEMENT)



Nota

El tamaño del archivo de auditoría no influye en la velocidad del sistema. Cuando el tamaño del archivo es de más de 20 MB, aparece un mensaje de aviso para guardar el archivo y borrar las entradas.

Typ	Datum [+]	Zeit [+]	Zeitzone	Bezeichnung	Kategorie	Benutzer
Info	16.05.2017	15:05	GMT+1.0(DST)	CHGUSER	USRMGMNT	SUSTEIN
Info	16.05.2017	15:05	GMT+1.0(DST)	UPDATE	USRMGMNT	SUSTEIN
Logout	16.05.2017	15:06	GMT+1.0(DST)	LOGOFF	USRMGMNT	SUSTEIN
Login	16.05.2017	15:25	GMT+1.0(DST)	LOGIN	USRMGMNT	SUSTEIN
Info	16.05.2017	15:31	GMT+1.0(DST)	EXPORT	USRMGMNT	SUSTEIN
Info	16.05.2017	15:32	GMT+1.0(DST)	PRINTOUT	USRMGMNT	SUSTEIN
Info	16.05.2017	15:32	GMT+1.0(DST)	PRINTOUT	USRMGMNT	SUSTEIN
Logout	16.05.2017	15:33	GMT+1.0(DST)	LOGOFF	USRMGMNT	SUSTEIN
Login	17.05.2017	14:04	GMT+1.0(DST)	LOGIN	USRMGMNT	SUSTEIN
Logout	17.05.2017	14:51	GMT+1.0(DST)	LOGOFF	USRMGMNT	SUSTEIN
Login	17.05.2017	16:23	GMT+1.0(SZ)	LOGIN	USRMGMNT	SUSTEIN

Beschreibung:
Success

Ansicht: 37 Einträge (alle)

Ventana AUDIT TRAIL abierta desde la ventana de gestión de usuario

Se mostrarán los siguientes parámetros en Audit Trail:

Columna	Descripción
TYPE	Indicación del tipo de evento Los siguientes tipos de evento se anotarán y marcarán con símbolos en la auditoría: INFO, ADVERTENCIA, ERROR, LOGIN y LOGOUT
DATE/TIME	Fecha y hora de la entrada (reloj del ordenador)
TIME ZONE	La zona horaria válida en el momento de la entrada (control del sistema Windows)
NOMBRE	Nombre del evento. Para más detalles consulte el campo DESCRIPTION: LOGIN Inicio de sesión LOGOUT/EXIT Cierre de la aplicación ADD/CHANGE/DELETE Edición de métodos, secuencias y datos de usuario PWDCHG Modificación de la contraseña RUN Inicia una secuencia de análisis PRINT Impresión de protocolo SIGN Firma de sucesos #nnnn Número de error
CAT.	Categoría del evento La categoría "USRMGMNT" marca todas las entradas provenientes de la gestión de usuario. El resto de las categorías las introducirá el ASpect CS.
OPERADOR	El usuario registrado en el momento de la entrada
DESCRIPTION	Indicaciones más exactas sobre el motivo de la entrada

Actualizar Audit Trail

Con [REFRESH] actualiza la lista de entradas del Audit Trail.

Puede ser necesario cuando con una ventana de Audit Trail abierta, se añaden entradas nuevas.

Filtrar, organizar e imprimir Audit Trail

Botón	Descripción
[FILTRO ...]	Abre la ventana para elegir las condiciones de filtrado Por defecto se buscan cadenas parciales. Para una búsqueda exacta por palabras, active la selección solo de palabras completas El filtro activo será también tomado en cuenta por la función de impresión y exportación.
[RESET FILTER]	Muestra de nuevo todos los conjuntos de datos
[PRINT]	Inicia la impresión o la exportación como PDF.

Exportar Audit Trail

Esta función solo está disponible si el Audit Trail ha sido abierto en la gestión de usuario. Las entradas de auditoría se pueden exportar en un archivo CSV (valores separados con comas). Este formato es compatible, p. ej., con MS Excel.

1. Haga clic en [EXPORT] en la ventana AUDIT TRAIL.
2. Seleccione la opción que desea exportar:

Botón	Descripción
[ALL RECORDS]	El archivo completo de auditoría se exportará en un archivo CSV.
[ONLY RECORDS FROM TO]	Sólo se exportarán entradas de un espacio de tiempo (desde/hasta) en un archivo CSV.

3. Con [OK] se abre la ventana estándar SAVE AS.
 4. Introduzca un nombre y guarde el archivo de exportación con [OK].
- El archivo de auditoría no se modificará en la exportación.

12.4 Modificar contraseña

Dependiendo de lo establecido en la cuenta de usuario, el usuario puede o tiene que cambiar la contraseña asignada cada cierto tiempo.

- Abra en ASpect CS el comando SISTEMA ► CHANGE PASSWORD.

Se abre la ventana de diálogo CHANGE PASSWORD.

- Introduzca la antigua contraseña en el campo de entrada y la nueva, dos veces, y haga clic en [OK].

Si se hizo el cambio correctamente, aparecerá el mensaje "Se ha cambiado la contraseña".

12.5 Firmas electrónicas

En ASpect CS se pueden firmar de forma electrónica los datos de resultado. Para ello es necesaria la autorización de usuario USE E-SIGNATURE (→"Crear una nueva cuenta de usuario" p. 194). La firma cierra el trabajo en un archivo. Las modificaciones posteriores en el archivo invalidan el estado de la firma.

A través del proceso de firma se codifican los archivos con un estado de firma y los datos del usuario que firma. Además se creará un archivo de firma codificado con el mismo nombre que el archivo de resultados pero con la extensión *.sig. El archivo incluye las sumas de comprobación del archivo de resultados junto con el archivo de espectros (si existiera).

Un archivo puede ser firmado por varios usuarios.

12.5.1 Firmar resultados de medición

Los archivos de resultados de medición se pueden firmar, por usuarios autorizados, con una firma electrónica al final de la medición o al volver a cargar el archivo.

- Abra en ASpect CS el comando SISTEMA ► SIGN OFF RESULTS..

Se abrirá la ventana SIGN OFF.

Opción / Botón	Descripción
USER ID	Nombre de registro del usuario actual. El nombre de usuario se puede cambiar. Esto permite que otros usuarios puedan firmar (máx. 32 caracteres).
PASSWORD	Contraseña del usuario (máx. 20 caracteres).
MEANING	Significado de la firma, p. ej. creada, comprobada, autorizada. La lista de los significados de las firmas la establece el administrador de la gestión de usuario (→ "Configurar la gestión de usuario" p. 190).
COMMENT	Comentarios opcionales (máx. 256 caracteres)
[SIGN OFF]	Firmar el documento con los ajustes arriba realizados. Al activar el botón [FIRMAR], aparecerá una pregunta sobre si se debe conceder la firma o interrumpir el proceso. Se confirmará la concesión adecuada de la firma.

Sign off: Ergebnisse-07-11-14 1057

Signature data

User ID:

Password:

Meaning:

☒ Comment:

Place for a comment.

Ventana firmar datos de medición

12.5.2 Mostrar firma

Con la vista o la impresión de datos de resultados firmados, se añadirá al final del protocolo una sección con **Firmas**. Esta sección contiene todas las firmas electrónicas del archivo correspondiente.

Druckvorschau

Drucken ☐ Alles ☒ Seiten: -

Fez46	Ext.	0.00095	0.00020	21.0
Pb283	Ext.	-0.00012	0.00019	158.6
Cu324	Ext.	0.00036	0.00052	144.4

Signaturen

Signatur 1/2

Erteilt von: Peter Maier (PMAIER)

Signiert am: 11/22/07 8:36

Status: Gültig

Bedeutung: Erstellt

Kommentar: Keine Auffälligkeiten.

Signatur 2/2

Erteilt von: Annette Schmidt (ASCHMIDT)

Signiert am: 11/22/07 8:42

Status: Gültig

Bedeutung: Geprüft

Kommentar: Alle Werte ok.

Beendet am: 11/22/07 8:43

Vista previa de impresión con sección de firma

Opción	Descripción
ISSUED BY	Nombre completo y de registro del usuario que ha firmado el archivo.
SIGNED ON:	Fecha y hora de la concesión de la firma.

ESTADO	El estado de la firma puede tener uno de los siguientes significados:	
	VALID	La firma y los datos de resultados están completos y son correctos. Las sumas de comprobación calculadas de los archivos no muestran diferencias respecto a las sumas de comprobación guardadas en el archivo de firmas, en el momento de la firma.
	INVALID (SIGNATURE FILE MISSING OR INVALID)	No se ha encontrado el archivo de firma perteneciente al conjunto de datos o tiene errores.
	INVALID (TPS DATA)	El archivo de resultados se modificó después de la firma. La comparación, entre las sumas de comprobación guardadas y las calculadas nuevamente, presenta diferencias.
	INVALID (SPK DATA)	El archivo con los datos de espectros se modificó después de la firma. La comparación, entre las sumas de comprobación guardadas y las calculadas nuevamente, presenta diferencias.
MEANING	Significado de las firmas.	
REMARKS	Comentarios (opcional)	

13 Anexo

13.1 Esquema sobre las marcas de la indicación de valores

Comentario	Significado	Valores	Edición
> Cal	El promedio de la muestra es mayor que el rango de trabajo de la curva de calibración	Promedios	Ventanas de transcurso y resultado
< Cal	El promedio de la muestra es menor que el rango de trabajo de la curva de calibración	Promedios	Ventanas de transcurso y resultado
< Lím. detecc.	El valor de la muestra es menor que el límite de detección	Promedios	Ventanas de transcurso y resultado
< Lím. deter.	El valor de la muestra es menor que el límite de determinación y mayor que el de detección	Promedios	Ventanas de transcurso y resultado
RSD!	El promedio de la muestra o del estándar está fuera del rango de la desviación relativa determinada del estándar	Promedios	Ventanas de transcurso y resultado
RR!	El promedio de la muestra o del estándar está fuera del rango relativo determinado	Promedios	Ventanas de transcurso y resultado
Factor!	Exceso de los límites del factor de recalibración para la curva de calibración	Curva de calibración	Ventanas de transcurso y resultado
R ² (adj.) o R	El grado de determinación de la regresión R ² (adj.) o R (en función de la selección en la ventana OPCION / CALIBRACION) de la curva de calibración no alcanza el valor determinado.	Curva de calibración	Ventanas de transcurso y resultado Ventana Curva de calibración
#MAN.	El valor individual de la muestra o del estándar se descartó manualmente del cálculo de los promedios de la muestra	Valores individuales de muestras	Ventana Valores individuales de muestras
#CORR.	El valor individual de la muestra o del estándar se descartó de forma automática, con la prueba de valores erráticos Grubbs, del cálculo de los promedios de la muestra	Valores individuales de muestras	Ventana Valores individuales de muestras

13.2 Descripción de los algoritmos utilizados para la corrección de fondo espectral

13.2.1 Generalidades

La corrección de fondo espectral se llevará a cabo por separado para cada espectro. Se obtiene una señal de absorbancia con una resolución temporal y con un número de valores de absorbancia, que depende del tiempo de medición.

Se calculará un valor de absorbancia único para cada píxel de evaluación (ventana METODO, pestaña EVALUACION, columna EVAL. PÍXELES) y se sumará al número de los píxeles de evaluación.

A partir de la señal de absorbancia se calculará, dependiendo de la técnica del AAS utilizada, un promedio, un valor de altura o un valor de superficie.

13.2.2 Corrección de fondo "sin referencia"

Calcular el valor de referencia	El valor de referencia se formará a través de la formación del promedio de los píxeles, del rango de medición, colocados estáticamente. Si no se coloca ningún píxel estático, entonces se realiza la formación del promedio a través de todos los píxeles del rango, no teniendo en cuenta un rango de +/- 10 píxeles en el píxel de medición. No se necesitará un espectro de referencia registrado por separado.
---------------------------------	---

Calcular los espectros de absorbancia

$$\text{Ext}_{\text{korrr}} = \lg(I_0/I_{\text{peak}})$$

I_0 – Promedio del píxel dentro de la rendija, excepto píxel de medición de +/- 10 píxeles.

I_{peak} – Píxel de medición

Límites

Las estructuras de llamas y otras estructuras moleculares que se recogieron en un espectro de referencia separado, no se compensarán. Debido a una iluminación de CCD irregular, el espectro de absorbancia puede mostrar una línea básica descendiente o ascendente.

Esta corrección corresponde a la corrección D2 de ancho de banda del AAS de líneas.

13.2.3 Corrección de fondo "con referencia"

Calcular el valor de referencia

Los distintos espectros de absorbancia se calcularán a partir de los espectros individuales de la muestra y el espectro central de referencia estándar. El espectro medio de referencia estándar se obtiene dividiendo las superficies (sumas) de los distintos espectros de referencia por la superficie del espectro de referencia promedio. Al final se volverán a promediar los distintos espectros estándar.

Calcular los espectros de absorbancia

Debido a la fluctuación de la fuente de luz y del atomizador, los espectros de absorbancia obtenidos presentan líneas básicas más o menos inclinadas y curvadas con distintos valores offset. En una fase posterior, se ajustará una línea básica para cada espectro individual. Para ello se fijarán puntos de referencia (puntos UGK) a través de

los cuales se establecerá un polinomio. El polinomio de adaptación es como máximo un polinomio de segundo grado. El grado se determinará a partir del número y la distribución de los puntos de referencia, juntándose los puntos de referencia, que separen menos de 10 píxeles, en un grupo.

La línea básica adaptada se sustraerá de los espectros de absorbancia. Al final, se podrá determinar el valor de absorbancia directamente.

Los puntos UGK se podrán establecer de forma estática o dinámica (automáticamente):

Estática:

Los puntos UGK se establecerán de forma manual o de una lista en el rango de píxel central $\pm 0,5 \times$ rango de medición

Dinámica:

Los puntos UGK se buscarán a través de un algoritmo.

- **Objetivo:** identificación de los píxeles que no se diferencian significativamente de las interferencias de las líneas base. Para ello se calcularán los gradientes del píxel examinado respecto a los ± 3 píxeles colindantes y se comprobarán en el cambio de gradiente.
Los puntos UGK de los distintos espectros se agruparán. Cuando se encuentra un píxel UGK determinado con una frecuencia definida, se utilizará entonces este píxel como punto UGK para el espectro promedio.
- **Restricciones:** cuando todos los puntos UGK están a un lado del píxel de medición, se producirá un error. Con un enlace unilateral, la extrapolación del polinomio puede dar lugar a grandes errores. El algoritmo de búsqueda de puntos de referencia reconoce un gradiente cuando la diferencia de absorbancia entre cuatro píxeles colindantes supera una cantidad determinada ($> 2E-4/\text{píxel}$).
- El rango del píxel de medición de ± 10 píxeles se excluirá de la búsqueda.

Límites

Con estructuras solapadas sobre todo el rango de la rendija espectral, el algoritmo tiene problemas básicos ya que ningún rango será dominado por interferencias de las líneas base. Aquí se realiza un ajuste dinámico de la frecuencia, es decir que el criterio de decisión se reducirá gradualmente. Si esto no da lugar a una cantidad suficiente de puntos UGK, entonces se establecerán píxeles estáticos que están guardados como preajuste en la tabla de líneas.

13.2.4 Corrección de fondo "IBC"

La corrección de fondo IBC (corrección iterativa de las líneas base) tiene su base en un filtrado iterativo de los espectros de intensidad. Las estructuras de fondo con una amplitud mayor que el pico del analito, se eliminan. El algoritmo es indicado para fondos espectrales complejos.

IBC-m es un algoritmo de filtrado iterativo especial para la determinación de estructuras moleculares de banda ancha.

13.2.5 Sustracción de espectros (corrección de estructuras permanentes)

Aplicación	Corrección multivariante de estructuras de llama y otras interferencias, disponibles en el espectro de muestra y referencia con distintas intensidades.
Supuestos	■ El espectro de suma es la suma ponderada de los espectros de las sustancias puras y de las interferencias. ■ Otros rangos de longitud de onda (p. ej. las bandas de analito adicionales que no están disponibles en el espectro de corrección) no están disponibles o se ocultan. ■ Desviación de longitud de onda nula o muy escasa entre el espectro de corrección y de muestra porque originan artefactos. El espectro de estructura de llama se calculará partiendo del espectro de referencia según $Ext_{corr} = \lg(I_0/I_{0-Offset})$. Para otras correcciones moleculares se necesitan espectros de sustancias puras. La base para el cálculo es la calibración multivariante tradicional: $y = X \cdot b + e$ m – número de longitud de onda/píxeles n – número de espectros de sustancias puras y – espectro de suma ($m \times 1$) X – matriz de los espectros de sustancias puras ($m \times n$) b – vector de coeficientes $b(\text{calculado}) = X^+ \cdot y$ con $X^+ = (X' \cdot X)^{-1} X'$ (seudoinversa) X' – transpuesta de X El producto del espectro de la sustancia pura y el coeficiente se pueden sustraer del espectro de la muestra: $y_N = x_N - \sum (b_i x_i)$, con $i = 1 \dots$ excepto N (índice del espectro)

13.3 Utilización de espectros de corrección en ASpect CS

En el HR-CS AAS no se necesita ningún sistema adicional para la corrección de fondo. El equipo está provisto de una línea CCD con 200 píxeles y en principio, gracias a este, con 200 detectores activos, simultáneos e independientes. El software selecciona algunos de estos detectores de ambos lados de la línea de análisis y los utiliza para correcciones. Los cambios en la intensidad de radiación que surgen en todos los píxeles de corrección de igual manera, se corrigen de forma automática. Se trata p. ej. de oscilaciones en la emisión de la lámpara pero también toda absorción de fondo continua.

La absorción de fondo discontinua, p. ej. la superposición de líneas directa con un elemento de matriz o absorción molecular dotada de una estructura fina, puede eliminarse matemáticamente a través de espectros de referencia (espectros de corrección). Estas indicaciones describen el registro de espectros de corrección y la creación de modelos de corrección en el software ASpectCS.

13.3.1 Posición inicial

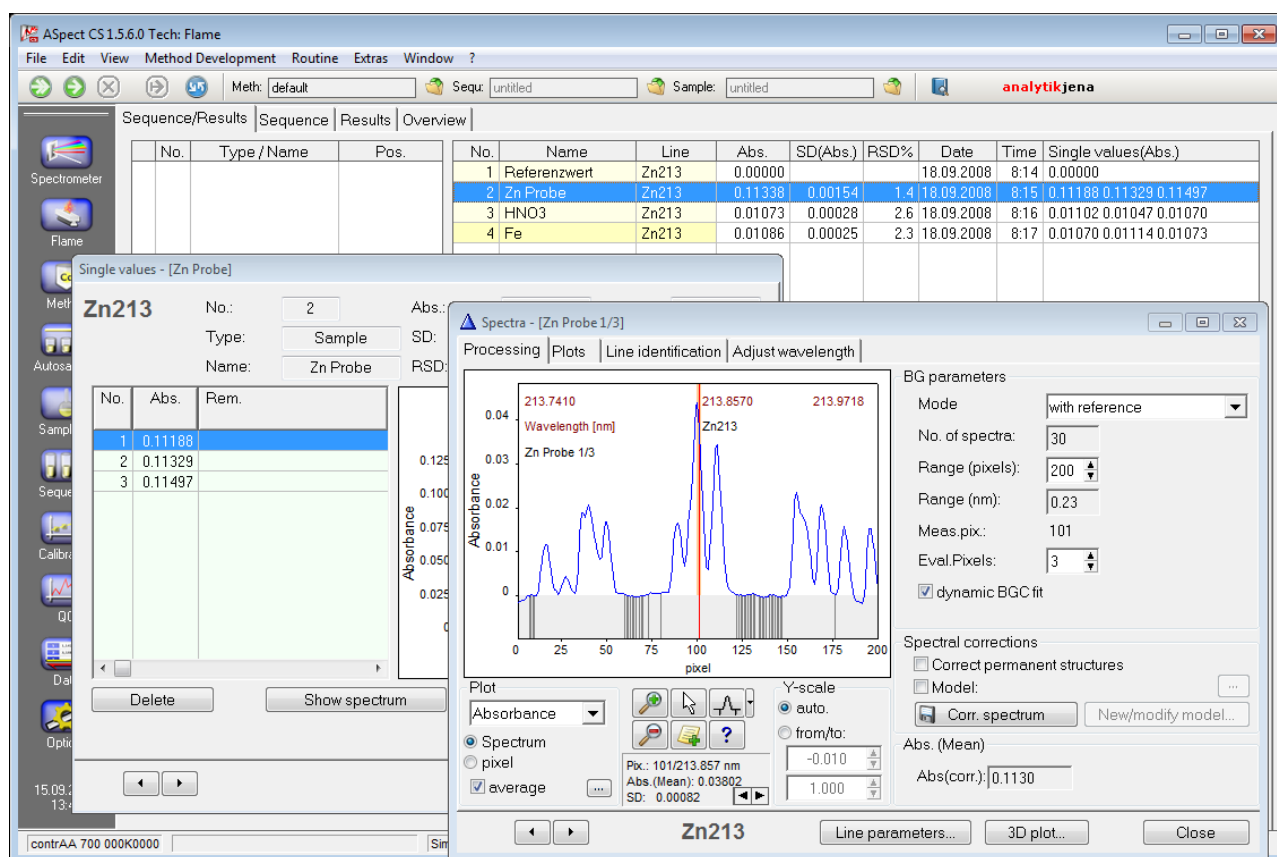
En el método, en la pestaña EVALUACION, la posición inicial está seleccionada como corrección de fondo CON REFERENCIA y como ajuste DINAMICO. Además en la pestaña SALIDA, las funciones GUARDAR CON RESULTADOS: METODOS y ESPECTROS están activadas.

Realice en la técnica de llama una medición de referencia y de muestra y en la técnica de tubo de grafito sólo una medición de muestra. Si hace doble clic (con el botón izquierdo del ratón) en el mensaje de resultados de la medición de la muestra, se abren los valores individuales correspondientes de la muestra. A través del botón [MOSTRAR ESPECTRO] puede visualizar los respectivos espectros.

Aquí puede comprobar si existe alguna alteración de la señal de analito por la superposición de líneas de elementos de matriz o absorciones moleculares.

i Nota

Los posibles elementos alterados o las bandas moleculares se pueden deducir con el libro Welz et. al.: "High-Resolution Continuum Source AAS".



Representación del espectro de muestra a corregir

Ejemplo

La línea de cinc con 213,857 nm puede reducirse a través de bandas moleculares NO o también a través de una línea de hierro (véase imagen). Las bandas moleculares NO se producen p. ej. por altas concentraciones de HNO₃ en la solución de muestras.

13.3.2 Registro de los espectros de corrección

Mida los distintos componentes de matriz que producen las superposiciones espectrales.

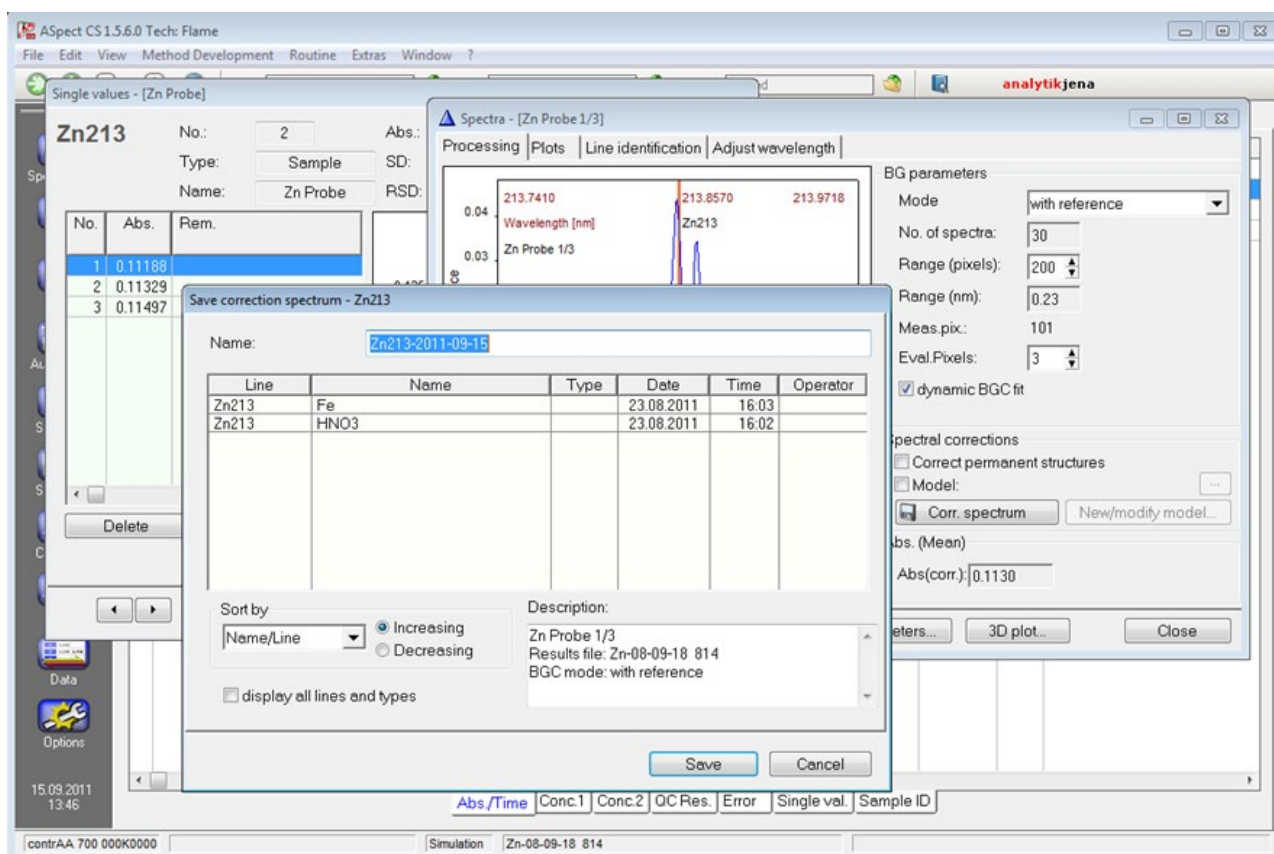
i Nota

Las concentraciones de los componentes de matriz no tienen que coincidir con las de las muestras. Las concentraciones tienen que ser, únicamente, lo suficientemente elevadas para que los espectros promedio muestren valores de absorbancia suficientes. Para una corrección espectral correcta es necesario que se mida cada vez un sólo componente como sustancia pura.

Ejemplo

Para la superposición de la línea de zinc por el HNO_3 y el hierro, se medirá una solución de HNO_3 de alta concentración (p. ej. 5%) y una solución de hierro (varios cientos de miligramos por litro) que servirá de muestra.

1. Después de las mediciones abra, haciendo doble clic en la lista de resultados, los valores individuales y a través del botón MOSTRAR ESPECTRO el mensaje de espectro.
2. Con el botón ESPECTRO DE CORR. guarda el espectro promedio del componente de matriz como espectro de corrección.



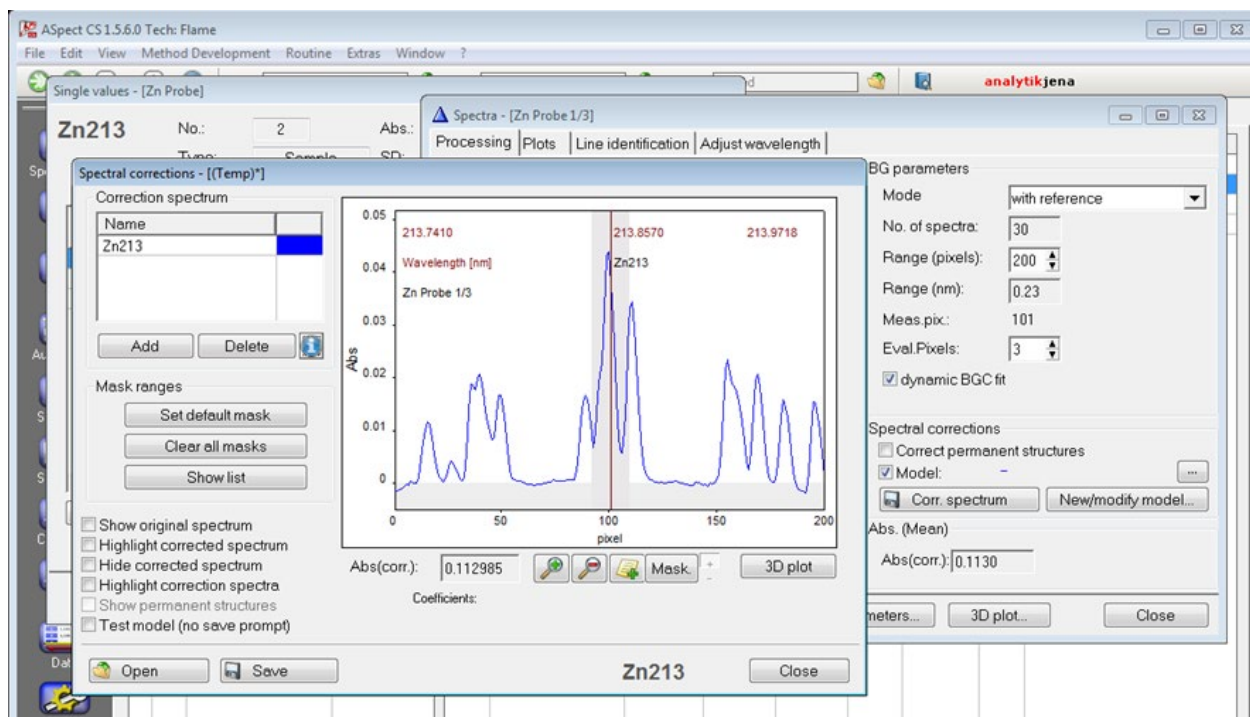
Guardar el espectro de corrección

3. Introduzca un nombre para el espectro y finalice el proceso con GUARDAR.
4. Repita estos pasos para cada componente de matriz.

13.3.3 Creación de un modelo de corrección

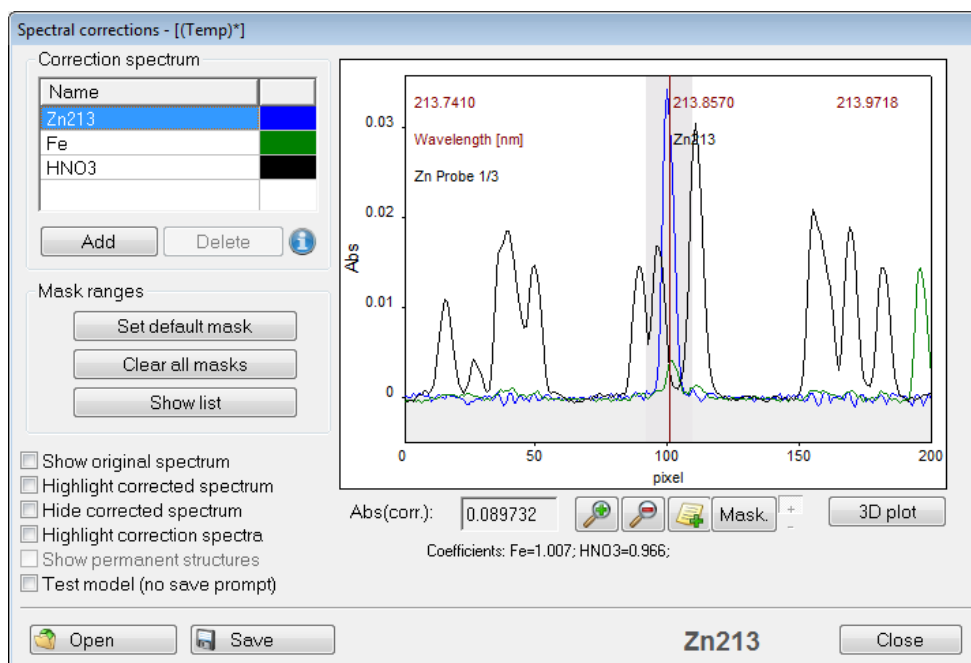
1. Vuelva a abrir los valores de medición individuales de la muestra a determinar haciendo doble clic en la lista de resultados, y a través del botón [MOSTRAR ESPECTRO] abra la visualización de espectros de la muestra.

2. Active ahora la casilla de control MODELO.
3. A través del botón [MODELO NUEVO/MODIFICAR...] abra la ventana [CORRECCIONES ESPECTRALES] con el espectro de la muestra.



Crear un nuevo modelo de corrección

4. Con el botón [AÑADIR] abra la selección de los espectros de corrección guardados.
5. Seleccione con un clic del ratón el espectro de corrección y finalice el proceso con [CARGAR].
6. Repita estos pasos para cada espectro de corrección.



Ventana Correcciones espectrales con espectros de corrección

- Active el botón RESALTAR EL ESPECTRO CORREGIDO para comprobar si el espectro resultante de la muestra no tiene superposiciones.
- Para probar temporalmente el modelo, puede activar la casilla COMPROBAR MODELO (SIN PETICION DE MEMORIA) y con [CERRAR] volver a la ventana ESPECTROS.
Atención: el modelo no se guarda.
- Para guardar el modelo de corrección abra de nuevo la ventana CORRECCIONES ESPECTRALES por medio de [MODELO NUEVO/MODIFICAR]. Allí, haga clic en [GUARDAR] e introduzca un nombre para el modelo. Cierre el proceso con [GUARDAR].
- Con el botón [GUARDAR], abra la ventana para guardar el modelo de corrección. Introduzca un nombre para el modelo y finalice el proceso con [GUARDAR].



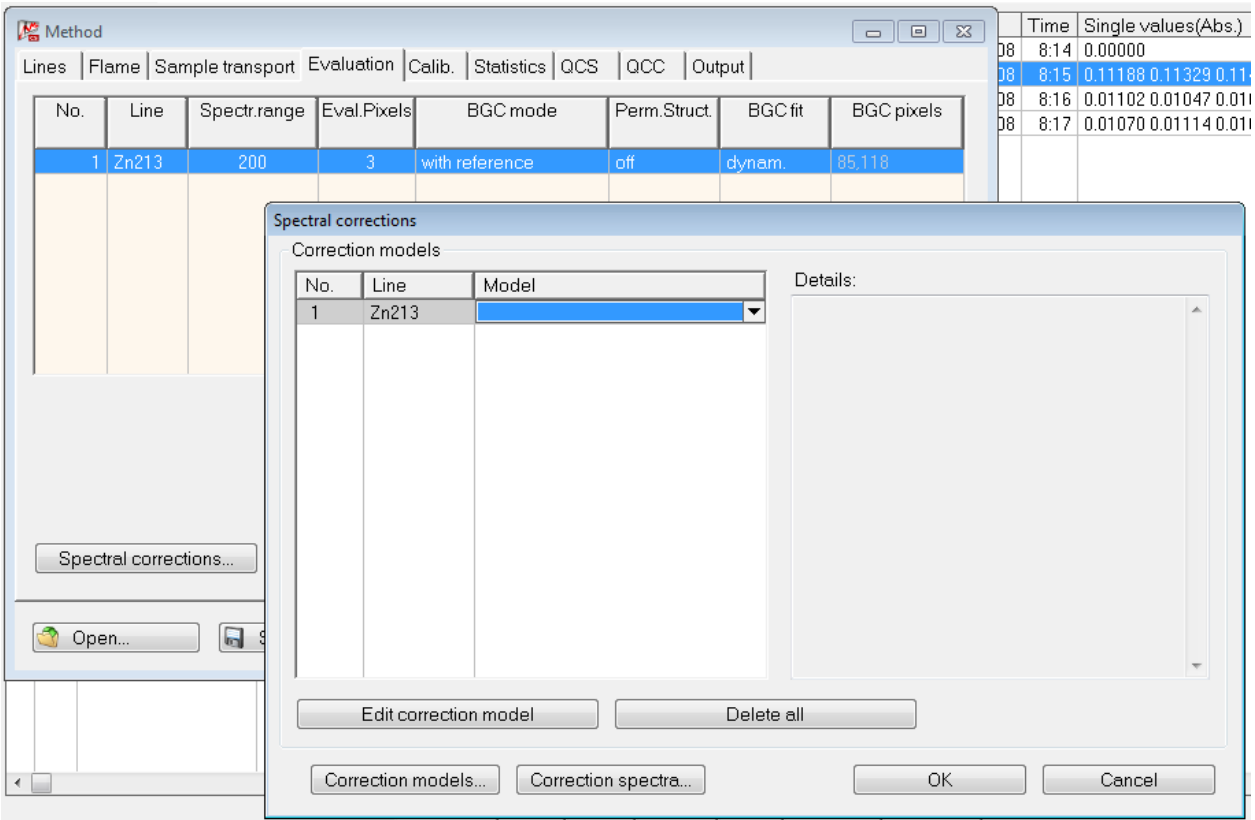
Nota

Con el botón [MASC.] se pueden ocultar rangos del espectro que no deben utilizarse para el cálculo del modelo de corrección. Para ello debe hacer clic con el botón izquierdo del ratón. El rango de la línea de analito viene oculto de serie (92 -110 píxeles). Puede que sea necesario ocultar otros rangos si no se dispone de sustancias puras para el registro de los espectros de corrección y pueden surgir contaminaciones en porcentajes variables.

13.3.4 Incorporación del modelo de corrección al método



1. Con , abra el MÉTODO actual y seleccione la pestaña EVALUACIÓN.
2. Con el botón [CORRECCIONES ESPECTRALES] se abre la ventana correspondiente.
3. Seleccione en el cuadro de diálogo para la línea de analito el MODELO correspondiente y salga de la ventana con [OK].



Enlazar el modelo de corrección con el método

Después de guardar el método, las mediciones futuras con este método se realizarán con el modelo de corrección creado. Las mediciones ya efectuadas también se pueden volver a calcular con este método de modo que no sea necesaria una nueva medición.

Los modelos y espectros de corrección espectrales se guardan con los datos de resultados. Si se transfieren los datos de resultados a otro ordenador en el que no estén guardados los modelos de corrección, estos se importarán automáticamente después de una solicitud.

13.4 Lugar de almacenamiento de los archivos de ASpect CS

Las carpetas utilizadas para el almacenamiento de archivos difieren en función de las opciones de instalación y la versión de Windows utilizada. La siguiente vista general contiene las carpetas utilizadas por defecto. Las carpetas utilizadas por la instalación actual se muestran en la ventana OPCIONES / CARPETAS (→ "Ruta de archivo" p. 181).

Directorios de trabajo y subdirectorios

Unidad:>Usuario>Público>Documentos públicos>Analytik Jena>ASpect CS

Tipo	Carpeta	Archivos
Resultados	C:\User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\<Technik>\Results	*.tps – Lista de resultados *.spk – Datos espectrales

Datos de métodos, secuencias y espectros de corrección	C:\User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\<Technik>\meth	*.tps
Resultados de optimización (p. ej., optimización del programa del horno)	C:\User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\<Technik>\opt	*.tps
Parámetros por defecto	C:\User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\<Technik>\tables	*.dat
Archivos de ID de muestras, archivos de unidades y datos exportados (*.csv)	C:\User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\user	*.tps; *.csv
Plantillas de informes	C:\User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\user\Reports	*.lst – Plantillas *.jpg – Archivo de vista previa
Opciones y valores de ajuste	C:\User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS	*.cfg; *.ini

Datos de aplicación (y subcarpetas)

Unidad:>ProgramData>Analytik Jena>ASpectCS

Tipo	Carpeta	Archivos
Listas de líneas	C:\ProgramData\Analytik Jena\ASpectCS\<Technik>\tables	Lines.dat
Datos de equipos y comentarios predeterminados	C:\ProgramData\Analytik Jena\ASpectCS	*.dat; *.tps
Datos de la gestión de usuarios y del Audit Trail	C:\ProgramData\Analytik Jena\ASpectCS\UserMgmt	Usrlrv.tps – Base de datos de usuarios Eventlog*.tps – Audit Trail

Programa

Unidad:>ProgramDAa | Analytik jena>ASpect CS o

Unidad:>Programme(x86)>Analytik Jena>ASpectCS

Tipo	Carpeta	Archivos
Configuración del sistema y equipos	C:\Program Files (x86)\ASpectCS	ASpectCS.ini

Técnica: FL – Llama, EA – Horno de grafito, EAS – Horno de grafito sustancias sólidas, HS – Hidruro, HF – HydrEA

Antes de una restauración completa (aplicaciones y datos) es necesario además ejecutar la instalación de ASpect CS.

Advertencia acerca de la visualización de carpetas y extensiones de archivo

En el caso de algunas carpetas puede tratarse de carpetas ocultas. Es posible que la visualización de extensiones de archivo también esté desactivada. De ser necesario, abra el punto VISTA en el menú de Windows Explorer para mostrar archivos, carpetas y extensiones ocultos.