

Руководство по эксплуатации

ASpect PQ



Производитель Analytik Jena GmbH+Co. KG
Konrad-Zuse-Straße 1
07745 Jena / Германия
Телефон: +49 3641 77 70
Факс: +49 3641 77 9279
E-Mail: info@analytik-jena.com

Служба технической поддержки Analytik Jena GmbH+Co. KG
Konrad-Zuse-Straße 1
07745 Jena / Германия
Телефон: +49 3641 77 7407
Факс: +49 3641 77 9279
E-Mail: service@analytik-jena.com



Для надлежащего и безопасного использования следовать этим инструкциям. Хранить для последующего информирования.

Общая информация <http://www.analytik-jena.com>

Номер документа -

Издание В (06/2023)

Техническая документация Analytik Jena GmbH+Co. KG

© Copyright 2023, Analytik Jena GmbH+Co. KG

Оглавление

1 Программное обеспечение ASpect PQ.....	7
1.1 Начало и завершение работы с ПО ASpect PQ.....	7
1.1.1 Запуск ASpect PQ.....	7
1.1.2 Открытие ASpect PQ во втором окне	10
1.1.3 Блокировка ASpect PQ.....	10
1.1.4 Завершение работы ASpect PQ	11
1.2 Общие инструкции по эксплуатации	11
1.2.1 Рабочий интерфейс	11
1.2.2 Функция помощи	12
1.2.3 Обзор строки меню, панели инструментов, строки символов	12
1.2.4 Наиболее часто используемые элементы управления	14
2 Рабочие листы	17
2.1 Создание нового рабочего листа.....	18
2.2 Редактирование рабочего листа.....	20
2.3 Загрузка рабочего листа	20
2.4 Удаление рабочего листа.....	21
3 Методы	22
3.1 Создание, сохранение и загрузка методов	22
3.1.1 Загрузка метода	22
3.1.2 Сохранение метода.....	23
3.1.3 Создание нового метода	24
3.2 Настройки параметров метода	25
3.2.1 Выбор аналитической линии –Вкладка Линии	25
3.2.2 Настройка параметров плазмы и передающей оптики – окно Метод / Плазма	31
3.2.3 Настройки транспортировки проб – окно Метод / Подача пробы	33
3.2.4 Оценка пиков – окно Метод / Обработка	34
3.2.5 Ввод параметров калибровки – окно Метод / Калибровка	39
3.2.6 Установка параметров статистических оценок – окно Метод / Статистика.....	44
3.2.7 Установка параметров проб для контроля качества для вкладок КК – окно Метод / ККС.....	46
3.2.8 Установка параметров контроля качества в последовательности – окно Метод / ККК.....	49
3.2.9 Установка параметров форматов вывода данных для результатов – окно Метод / Вывод.....	51
4 Последовательности.....	53
4.1 Создание, сохранение и открытие последовательностей	53
4.2 Диалоговые функции в окне Послед-ть	54
4.3 Объединение проб и порядка действий для последовательности	56
4.4 Вставка специальных действий в последовательность	57
4.5 Выбор элементов/линий для анализа проб/действия	59
5 Данные с информацией о пробах (ID проб).....	60
5.1 Создание, сохранение и открытие данных с информацией о пробах.....	60
5.2 Информация для проб – окно Имя пробы / Информация о пробе.....	61
5.3 Информация для контрольных проб – окно Имя пробы / Информ. о пробе КК	62
5.4 Настройка параметров информации о пробах.....	62
6 Проведение анализа и расчет результатов.....	64

6.1	Обзор команд меню и кнопок для начала анализа в главном окне	64
6.2	Розжиг и гашение плазмы	64
6.3	Запуск анализа	66
6.4	Прерывание и продолжение процесса анализа	68
6.5	Повтор действий последовательности	69
6.6	Пересчет результатов анализа	69
6.7	Обработка измерений параллельно с выполнением анализа (режим офлайн)	72
6.8	Отображение результатов и процесса анализа в главном окне	73
6.8.1	Вкладка Послед-ть/Рез-ты	73
6.8.2	Вкладка Послед-ть	73
6.8.3	Вкладка Результаты	74
6.8.4	Вкладка Обзор	77
6.9	Отображение и редактирование отдельных значений проб	78
6.10	Отображение и редактирование спектров интенсивности	80
6.10.1	Отображение спектров – окно Ред. спектр / Дисплей	81
6.10.2	Оценка пика и определение коррекции фона – окно Ред. спектр / Обработка	84
6.10.3	Устранение спектральных помех – окно Ред. спектр / Спектр. коррекции	86
6.11	Запись обзорного спектра	89
7	Калибровка	90
7.1	Графическое представление калибровочной кривой	91
7.2	Отображение результатов градуировки	92
7.2.1	Калибровка – вкладка Таблица	92
7.2.2	Калибровка – вкладка Остатки	93
7.2.3	Калибровка – вкладка LOD/ LOQ	93
7.2.4	Калибровка – вкладка LOD/ LOQ	94
7.3	Редактирование калибровочной кривой	95
8	Контроль качества (КК)	96
8.1	Параметры вкладок КК	96
8.2	Вводы и пределы вкладок КК	97
8.3	Отображение вкладок КК	98
9	Управление и мониторинг прибора и аксессуаров	100
9.1	Спектрометр	100
9.1.1	Настройка параметров спектрометра и тестирование функций	100
9.1.2	Диагностика параметров устройства	102
9.1.3	Непрерывное измерение пика	102
9.1.4	Запись кривой сигнала	103
9.2	Плазма	104
9.2.1	Розжиг плазмы и настройка условий для плазмы	105
9.2.2	Контроль подачи проб на насос	107
9.2.3	Юстировка и оптимизация плазмы	108
9.3	Автосамплер	110
9.3.1	Отображение подключенного автосамплера	111
9.3.2	Настройка штатива для проб	111
9.3.3	Технические параметры автосамплера	112
9.3.4	Отображение позиций проб на автосамплере	113
9.3.5	Функция развлечения	114
9.4	Рециркуляционный охладитель	115

10 Управление данными	116
10.1 Функции печати в ASpect PQ.....	116
10.1.1 Печать данных результатов.....	116
10.1.2 Печать других параметров анализа и установок	119
10.1.3 Шаблоны отчетов.....	120
10.2 Управление данными для всех типов данных в ASpect PQ.....	122
10.2.1 Управление методами и последовательностями.....	123
10.2.2 Управление файлами результатов	125
10.2.3 Экспорт файлов линий/длин волн	126
10.2.4 Управление моделями коррекции.....	126
10.2.5 Удаление корректирующих спектров.....	127
10.2.6 Импорт шаблонов отчета	128
10.2.7 Управление избранными линиями	128
10.2.8 Импорт и экспорт рабочих листов	129
10.3 Сохранение результатов в формате ASCII/CSV	129
10.4 Установка единиц измерения	130
10.5 Управление базами данных для исходных растворов и проб КК	130
10.6 Создание предварительно заданных комментариев	131
10.7 Использование буфера обмена Windows.....	132
11 Настройка программы ASpect PQ	133
11.1 Возможности отображения	133
11.2 Пути сохранения	134
11.3 Опции экспорта	135
11.4 Опции для непрерывного экспорта в формате ASCII.....	135
11.5 Опции для процесса анализа	136
12 Приложение	140
12.1 Обзор обозначений, используемых при отображении значений.....	140

1 Программное обеспечение ASpect PQ

ASpect PQ представляет собой программу управления и анализа для следующих ИСП-ОЭС:

- PlasmaQuant PQ 9000
- PlasmaQuant 9100

Параметры метода для процедуры измерений можно оптимизировать для специфических особенностей анализируемых проб. Полученные данные можно повторно рассчитать, экспортировать в файлы различных форматов и распечатать.

Описанная версия ПО

Настоящий документ основан на версии ASpect PQ 1.3.

Область применения

ПО ASpect PQ предназначено исключительно для работы с вышеназванными устройствами и для обработки аналитических данных, полученных с помощью этих устройств.

Производитель не несет ответственности за проблемы и повреждения, связанные с использованием ПО ASpect PQ не по назначению.

Работать с ПО ASpect PQ и управляемыми им устройствами должен только обученный и проинструктированный персонал. Пользователь должен быть ознакомлен с содержанием данного документа и содержанием руководства пользователя прибора.

1.1 Начало и завершение работы с ПО ASpect PQ

1.1.1 Запуск ASpect PQ

- ▶ Включите устройство и автосамплер.
- ▶ Щелкните по ярлыку ASpect PQ на рабочем столе Windows.



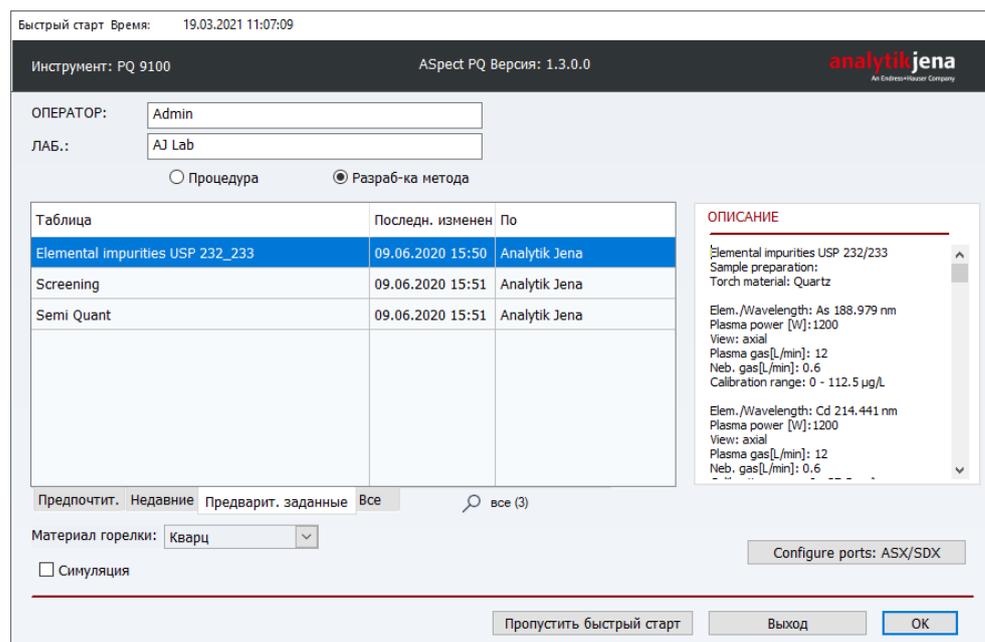
ASpect PQ запустится.

- ▶ Если установлена опциональная функция управления пользователями, на экран выводится запрос имени пользователя и пароля. После успешного ввода данных программа ASpect PQ активируется.

После запуска ПО откроется окно быстрого запуска. Здесь можно выбрать рабочие листы с предустановленными методами и последовательностями или перейти непосредственно к интерфейсу ASpect PQ.

1.1.1.1 Окно быстрого запуска

После запуска программы и входа пользователя в систему (только если установлена система управления пользователями) откроется окно **Быстрый старт**. Из него можно загрузить рабочий лист или без дополнительных предварительных настроек перейти в ASpect PQ. Окно **Быстрый старт** можно также открыть в ASpect PQ с помощью команды меню **Файл | Быстрый старт**.



Настройки в окне Быстрый старт

В окне **Быстрый старт** доступны следующие опции и кнопки.

Опция / кнопка	Описание
Оператор	При использовании опциональной системы управления пользователями отображается зарегистрированный пользователь. Если управление правами не используется, пользователя можно ввести здесь вручную.
Лаб.	Можно ввести до 30 символов. Введенное последним обозначение сохраняется и выводится в виде информации в отчетах результатов.
Процед.	Запуск программы для штатного режима работы. В штатном режиме отображаются только методы, активированные для штатного режима работы.
Разраб-ка метода	Полный запуск программы. В разработке метода активированы все настройки.
Материал горелки	Выберите используемый материал горелки (кварц или керамика), чтобы настроить чувствительность оптического детектора плазмы.
Симуляция	В целях обучения или демонстрации можно использовать ASpect PQ без подключенного анализатора. При активации все функции прибора (включая сбор и обработку измеренных значений) обрабатываются в режиме симуляции.
[Пропустить быстрый старт]	Переход к интерфейсу ASpect PQ без выбора рабочего листа.
[Configure ports:ASX/SDX]	Только при подключенной системе разбавления Teledyne Cetac SDXHPLD с автосамплером ASX-560 При щелчке по кнопке занятые автосамплером и системой разбавления USB-порты настраиваются автоматически. Если установлен опциональный модуль 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ (управление пользователями), эту функцию может выполнять только пользователь с правами администратора.
[Выход]	Закрытие окна Быстрый старт и завершение работы программы ASpect PQ.

Опция / кнопка	Описание
[OK]	После выбора рабочего листа переход к интерфейсу ASpect PQ.

Таблица рабочих листов

Таблица рабочих листов отображает доступные в данный момент рабочие листы. 4 закладки позволяют легко найти рабочий лист:

Закладка	Содержание
Предпочтит.	Рабочие листы с обозначением Избранное
Недавние	Рабочие листы, использованные недавно
Предварит. заданные	Рабочие листы Analytik Jena, которые были установлены вместе с ASpect PQ
Все	Все рабочие листы
	Значок лупы позволяет применить к рабочим листам фильтр по элементам. При щелчке по этому значку отображается список элементов, в котором можно выбрать элемент. Если понадобится найти другие элементы, выбор можно будет повторить. При выборе нескольких элементов отобразятся все рабочие листы, в которых содержится хотя бы один из элементов в сохраненном методе (логика ИЛИ).

1.1.1.2 Начало работы с рабочим листом

Рабочий лист - это папка, в которой находятся метод и последовательность. В качестве опции рабочие листы могут также содержать настройки для ID пробы и для сохранения файла результатов. С помощью выбранного рабочего листа можно немедленно начать измерение. Если есть несколько версий метода и последовательности, для измерения всегда используются последние (актуальные) версии.

- ▶ Установите комплектующие на анализатор, после чего включите комплектующие и устройство.
- ▶ Запустите программное обеспечение.
 - ✓ Появится окно быстрого запуска.
- ▶ Введите необходимые данные в поля **Оператор** и **Лаб.**.
- ▶ Выберите **Материал горелки**.
- ▶ Выделите требуемый рабочий лист в таблице рабочих листов.
- ▶ Нажмите кнопку **[OK]**.
 - ✓ Появится интерфейс ASpect PQ. Метод и последовательность уже загружены.

В зависимости от конфигурации рабочего листа теперь можно объединить метод и последовательность, загруженные с рабочим листом, с идентификационным файлом пробы или сразу же начать измерение.

1.1.1.3 Начало работы без рабочего листа

Без подготовленного рабочего листа вы должны загрузить или повторно настроить метод, последовательность и ID проб для измерения.

- ▶ Установите комплектующие на анализатор, после чего включите комплектующие и устройство.
- ▶ Запустите программное обеспечение.
 - ✓ Появится окно быстрого запуска.
- ▶ Введите необходимые данные в поля **Оператор** и **Лаб.**.

- ▶ Выберите **Материал горелки**.
- ▶ Нажмите кнопку **[Пропустить быстрый старт]**.
 - ✓ Появится интерфейс ASpect PQ.

Основная процедура измерения

Укажите метод и последовательность выполнения анализа и запустите процедуру измерения.

Для процедуры автоматического или ручного измерения необходимо выполнить следующие действия:

- ▶ Задать **параметры метода** (разработка метода).
- ▶ Создать **последовательность**. Последовательность содержит пробы и действия в том порядке, в котором они должны быть выполнены. Некоторые данные о пробе, такие как наименование пробы, ее позиция на автосамплере, можно также непосредственно ввести и сохранить в последовательности.
- ▶ Для стандартного анализа будет целесообразно создать **файл идентификации пробы** (ID пробы). Этот файл содержит данные о пробе, такие как наименование пробы, коэффициент разбавления и позицию пробы в автосамплере. Эти данные необходимы для пересчета концентрации в концентрацию исходной пробы. Файлы информации о пробе являются текстовыми файлами, и их можно также создать с помощью независимых программ.
- ▶ Начать **измерение**.

Во время измерения результаты сразу записываются в базу данных результатов. Доступ к основному файлу результатов осуществляется через встроенную систему управления данными (например, экспорт, печать).

После начала измерения данные результатов постоянно вводятся в список результатов в главном окне. Детальное представление результатов (например, отдельные значения, спектры) можно открыть, выбрав соответствующую строку пробы. Последние полученные результаты всегда добавляются в конец таблицы; перезапись результатов невозможна.

При необходимости дальнейший анализ данных можно выполнить с помощью функции Пересчет. Данные измерений можно подготовить для печати отчета или экспортировать их.

1.1.2 Открытие ASpect PQ во втором окне

Если приложение уже запущено, другие окна этой программы будут открыты в режиме оффлайн. В этом режиме отсутствует соединение с прибором. Несмотря на это все другие функции, такие как создание методов или загрузка и оценка результатов, можно использовать параллельно с выполнением измерений в основном режиме программы.

- ▶ Запустите программу во втором окне с помощью пункта меню **Файл | Старт Оффлайн Ступень программы**.

1.1.3 Блокировка ASpect PQ

Приложение можно заблокировать для управления, при этом в период блокировки измерения будут продолжены. В сочетании с опциональной системой управления пользователями для разблокировки экрана требуется подтверждение пароля.

- ▶ Выберите пункт меню **Прочее | Закрепить**.
- ▶ Чтобы разблокировать приложение, щелкните по значку замка на экране.

1.1.4 Завершение работы ASpect PQ

- ▶ Погасите плазму.
- ▶ Завершите работу программы, выбрав пункт меню **Файл | Выход**.
- ▶ Если при этом открыты метод, последовательность или файлы информации о пробе, которые еще не были сохранены, программа сообщит об этом. Если нужно сохранить эти файлы, нажмите **[Да]**.
- ▶ После отключения плазмы ИСП-ОЭС нужно время для охлаждения системы. Если целевая температура еще не достигнута, отображается окно прогресса с уведомлением для безопасного отключения устройства. Отключайте ИСП-ОЭС только после завершения работы ASpect PQ.



ПРИМЕЧАНИЕ

Если завершить работу ASpect PQ во время, когда горит плазма, после запроса плазма будет погашена автоматически!

См. также

- 📄 Розжиг и гашение плазмы [▶ 64]

1.2 Общие инструкции по эксплуатации

1.2.1 Рабочий интерфейс

После запуска программы ASpect PQ сначала откроется окно **Быстрый старт**. Из него производится переход к окну рабочего интерфейса.

Основные компоненты рабочего интерфейса

№	Тип пробы	Назв.	Разб.АС	Поз	№	Назв.	Линия	Тип	Интенс.	О(Интенс.	СКО%	Дата	Время	Единиичн. знач.(Интенс.)
1	Кал-ноль1		101	1	Cal-Zero1	A420.068	IS1	9996101	32344	0.32	28.02.2019	10:02	10010180	10019020 9959104
2	Кал-Станд.1		102	2	Y371.030		IS2	1171010	27743	2.37	28.02.2019	10:02	1145770	1166546 1200714
3	Кал-Станд.2		103	3	Au242.795			232	5	2.01	28.02.2019	10:02	238	239 229
4	Вычисл. калиб.			4	Cal-Std1	A420.068	IS1	9935894	19617	0.20	28.02.2019	10:02	9953607	9914931 9938945
5	Проба		1 101	5	Y371.030		IS2	1171416	32442	2.77	28.02.2019	10:02	1137374	1174896 1201977
6	Проба		1 102	6	Au242.795			12971	178	1.37	28.02.2019	10:02	13142	12983 12788
7	Проба		1 103	7	Cal-Std2	A420.068	IS1	9895028	17727	0.18	28.02.2019	10:02	9874618	9903888 9906577
8	Проба		1 104	8	Y371.030		IS2	1170380	18724	1.60	28.02.2019	10:02	1157376	1161924 1191841
9	Проба		1 105	9	Au242.795			126438	1290	1.02	28.02.2019	10:02	125017	127535 126762
10	Проба		1 106	10	Cal-Std3	A420.068	IS1	9933654	13905	0.14	28.02.2019	10:02	9947191	9919408 9934264
11	Проба		1 107	11	Y371.030		IS2	1180806	15224	1.29	28.02.2019	10:02	1197954	1166884 1175579
12	Проба		1 108	12	Au242.795			1244682	5391	0.43	28.02.2019	10:02	1240320	1243016 1250709
13	Проба		1 109	13	Compute calib.	Au242.795						28.02.2019	10:02	
14	Проба		1 110	14	blank	A420.068	IS1	9860386	40006	0.41	28.02.2019	10:02	9899823	9861503 9819834
15				15	Y371.030		IS2	1177755	26284	2.23	28.02.2019	10:02	1181516	1149793 1201955
16				16	Au242.795			898	13	1.39	28.02.2019	10:02	912	893 889
17				17	A2	A420.068	IS1	8910786	42829	0.48	28.02.2019	10:02	8953602	8910811 8867944
18				18	Y371.030		IS2	1234129	5305	0.43	28.02.2019	10:02	1238221	1236032 1228135
19				19	Au242.795			105317	1084	1.03	28.02.2019	10:02	104128	105570 106252
20				20	QC spike	A420.068	IS1	8881736	27245	0.31	28.02.2019	10:02	8856828	8910832 8877548
21				21	Y371.030		IS2	1279370	10196	0.80	28.02.2019	10:02	1268553	1280759 1288805
22				22	Au242.795			234785	553	0.24	28.02.2019	10:02	234211	235314 234829
23				23	Mn 10 mg/L	A420.068	IS1	10814295	24141	0.22	28.02.2019	10:02	10835751	10788155 10818979
24				24	Y371.030		IS2	1300272	10536	0.81	28.02.2019	10:02	1288594	1303155 1309065
25				25	Au242.795			14033	240	1.71	28.02.2019	10:02	14301	13960 13838
26				26	Mn 100 mg/L	A420.068	IS1	10682298	12331	0.12	28.02.2019	10:02	10684122	10693616 10669156
27				27	Y371.030		IS2	1224179	2969	0.24	28.02.2019	10:02	1224980	1221998 1227560
28				28	Au242.795			132071	2724	0.22	28.02.2019	10:02	132071	132071 132071

№ Описание

- 1 В строке заголовка находится информация о версии программного обеспечения, подключенном приборе, технике и (если загружен) рабочем листе.
- 2 Через панель меню осуществляется доступ ко всем функциям программы.

№	Описание
3	Панель инструментов содержит кнопки для запуска и приостановки последовательностей измерений и отображает загруженный в данный момент метод, последовательность и идентификационный файл пробы. Нажав кнопку  за полями, можно загрузить запись данных. Кроме того, здесь находится кнопка для создания нового рабочего листа.
4	С помощью панели символов можно получить доступ к наиболее важным окнам (функциям) программы. Как только одно из окон откроется, соответствующий символ станет красным. Если открыто несколько окон, выведите окно на передний план, снова нажав на символ.
5	В главном окне отображаются последовательность и результаты измерений.
6	Некоторые основные вкладки содержат дополнительные подвкладки , расположенные в нижней области окна.
7	В панели состояния внизу выводится информация о подключенном приборе, зарегистрированном пользователе и имени отображаемой в данный момент базы данных результатов.

См. также

-  Отображение результатов и процесса анализа в главном окне [▶ 73]
-  Окно быстрого запуска [▶ 7]

1.2.2 Функция помощи

Справка по работе с ASpect PQ доступна через команду меню ? | **Помощь: заголовки**. При работе с окнами/ диалоговыми окнами ASpect PQ можно активировать контекстно-ориентированную справку, нажав клавишу [F1].

При перемещении курсора по кнопкам программа показывает на экране краткую информацию (всплывающие подсказки) о кнопках панели инструментов/ строки символов и других кнопках, а также о заголовках таблиц в окнах **Метод**, **Послед-ть** и **Назв. пробы**.

1.2.3 Обзор строки меню, панели инструментов, строки символов

Функции строки меню

В верхней области ASpect PQ находится строка меню, с помощью которой можно запускать все рабочие процессы программного обеспечения. Меню и кнопки, применение которых невозможно в текущем рабочем поле, имеют нейтральный серый цвет. Некоторые пункты меню, например, функция печати, отображаются в зависимости от того, какие окна открыты в данный момент.

Пункт меню	Описание
Файл	<ul style="list-style-type: none"> ■ Создание, открытие и сохранение методов, последовательностей и данных с информацией о пробе ■ Открытие файлов результатов ■ Удаление методов и последовательностей ■ Экспорт данных спектров ■ Печать активного окна или отчета ■ Запуск программы в режиме оффлайн или онлайн ■ Запуск режима обработки отчета ■ Открытие окна Быстрый старт ■ Завершение работы программы ■ Непосредственный вызов последних открытых методов и последовательностей

Пункт меню	Описание
Ред.	<ul style="list-style-type: none"> Копирование и вставка содержимого текстовых полей и полей ввода Копирование выделенных строк списка результатов в буфер обмена Удаление содержимого списка результатов
Вид	<ul style="list-style-type: none"> Открытие и закрытие окон, отображающих графики и информацию во время процесса анализа, например, кривые сигналов. Выбор шкалы оси сигнала для графиков
Разраб. метода	<ul style="list-style-type: none"> Открытие окон, обходимых для разработки методов Запись обзорного спектра
Процед.	<ul style="list-style-type: none"> Запуск, приостановка и отмена процесса измерения Пересчет результатов Гашение плазмы Промывка системы
Прочее	<ul style="list-style-type: none"> Открытие окна Файлы/Записи и Опции Открытие списка линий Запуск поиска отдельных проб Печать текущего вида экрана Проверка и проведение обслуживания (рециркуляционный охладитель) Блокировка рабочего места
Статус системы	<p>Доступно при установленном опциональном модуле 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ</p> <ul style="list-style-type: none"> Конфигурирование системы управления пользователями Изменение пароля Просмотр контрольного журнала (Audit Trail) Подписывание результатов
?	<ul style="list-style-type: none"> Просмотр справки и информации о версии ПО

Панель инструментов

Кнопки на панели инструментов предназначены, главным образом, для запуска/ прерывания и продолжения последовательного измерения. В полях панели инструментов отображаются загруженные в данный момент методы, последовательности и идентификаторы проб.

Кнопка	Описание
	Запуск последовательного измерения.
	Измерение выделенных строк в последовательности.
	Прерывание текущего последовательного измерения.
	Продолжение прерванного измерения.
	Пересчет результатов, например, после измерения следующего образца.
	Запуск/ остановка насоса ИСП-ОЭС.
	
	Ускорение насоса (промывка пути подачи пробы).
	Розжиг/ гашение плазмы.

Кнопка	Описание
	Открытие файлов. Сохраненные методы, последовательности или ID проб можно загрузить в программу и использовать для текущего анализа.
	Создание нового рабочего листа.

Строка символов

Строка символов обеспечивает быстрый доступ к важнейшим функциям программы ASpect PQ. Щелчок по значку открывает окно с соответствующей функцией программы. После установки строка символов находится в левом крае экрана, однако ее можно переместить в любое место на экране, нажав и удерживая кнопку мыши.

Значок	Описание
	Контроль атомизации: <ul style="list-style-type: none"> ▪ Розжиг/гашение плазмы ▪ Настройки газовых потоков ▪ Проверка насоса для подачи пробы на распылитель ▪ Юстировка передающей оптики ▪ Оптимизация мощности плазмы и газа в распылителе
	Проверка функций спектрометра: <ul style="list-style-type: none"> ▪ Данные устройства ▪ Тестирование коррекций длин волн ▪ Запуск измерения на тестовой длине волны ▪ Запуск непрерывного измерения для оптимизации устройств
	Открытие окна метода
	Настройка автосамплера
	Открытие окна с информацией о пробах
	Открытие окна последовательности
	Открытие окна калибровки
	Открытие окна с данными контроля качества
	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Управление данными ▪ Печать результатов и управление шаблонами отчетов ▪ Выбор единиц измерения ▪ База данных для маточных стандартных растворов и контрольных проб
	Управление рабочими листами, открытие сохраненных рабочих листов

1.2.4 Наиболее часто используемые элементы управления

В ПО ASpect PQ различные экранные кнопки, кнопки мыши и клавиатуры часто имеют одинаковые или схожие функции.

Эти элементы управления описаны здесь в общих чертах; при необходимости можно найти конкретную информацию в описании соответствующих окон.

Основные кнопки

Функциональное назначение кнопки в строке символов отображается при наведении курсора мыши на соответствующую кнопку.

Экранная кнопка	Описание
[ОК]	Заккрыть окно и принять установки.
[Отмена]	Заккрыть окно без изменения установок.
[Принять]	Принять установки, не закрывая окно.
[Заккрыть]	Заккрыть окно; установки не сохраняются.
[Откр.]	Открыть выбранное окно для загрузки файла или записи данных.
[Сохран.]	Открыть выбранное окно для сохранения файла или записи данных.
	Открыть диалоговое окно выбора, например, для выбора пути.
	Открыть окно Печать . Из этого окна можно распечатать содержимое активного окна или экспортировать файл.

Таблицы

№	Линия	Калибр. функ.	Пересечение	Навеска	Контроль	Един.
1	Ag420.068					
2	As188.979	линейн.	Вычисл.	нет	нет	µg/L
3	Cd214.441	линейн.	Вычисл.	нет	нет	µg/L
4	Hg184.886	линейн.	Вычисл.	нет	нет	µg/L
5	Pb220.353	линейн.	Вычисл.	нет	нет	µg/L
6	Co237.863	линейн.	Вычисл.	нет	нет	µg/L
7	Ni231.604	линейн.	Вычисл.	нет	нет	µg/L
8	V292.464	линейн.	Вычисл.	нет	нет	µg/L
9	Ag328.068	линейн.	Вычисл.	нет	нет	µg/L
10	Se196.028	линейн.	Вычисл.	нет	нет	µg/L

Исходные... Таблица калиб-ки

В некоторых окнах значения вводятся непосредственно в таблицы. В зависимости от типа записи ячейка таблицы функционирует как поле ввода, список выбора или поле ввода для ограниченного диапазона числовых значений с помощью клавиш со стрелками.

- ▶ Для выделения строки таблицы щелкните по соответствующей строке в первом столбце таблицы, выделенном серым цветом. Затем можно перемещать курсор строки клавишами со стрелками.
- ▶ Для изменения ширины столбца переместите курсор мыши к соответствующей линии границы между двумя столбцам таким образом, чтобы курсор превратился в двойную стрелку. Отрегулируйте ширину столбца, удерживая левую кнопку мыши.

В полях ввода дополнительно доступны следующие функции:

- ▶ [F2] активирует режим редактирования. В этом режиме клавиши со стрелками на клавиатуре используются для посимвольного редактирования. При повторном нажатии [F2] снова активируется стандартный режим, в котором клавиши курсора используются для навигации по ячейкам.
- ▶ Текст можно скопировать в буфер обмена Windows и вставить в нужное место через меню **Ред. | Копия** и **Ред. | Вставка** или сочетанием клавиш [Strg+C] и [Strg+V].

Кнопки в таблицах

Экранная кнопка	Функция
[Добавить]	Добавить новую строку таблицы в конец списка.
[Вставка]	Вставить новую строку таблицы перед выделенной строкой.
[Удалить]	Удалить выделенную строку таблицы.

Экранная кнопка	Функция
	Переместить выделенную строку таблицы на одну позицию вверх. Примечание: чтобы переместить строку таблицы, ее необходимо выделить. Для этого щелкните по номеру соответствующей строки в первом столбце таблицы.
	Переместить выделенную строку таблицы на одну позицию вниз.
	Применяет значение выделенной ячейки ко всем последующим строкам таблицы аналогичного типа пробы (проба, стандартные растворы, контрольные пробы и т. д.). Если активировано контрольное поле Инкрем. (означает инкремент, приращение), значение будет возрастать автоматически, например, проба001, проба002 ...

Графики

В графиках с помощью правой кнопки мыши можно открыть контекстное меню, чтобы скопировать график или все окно в графическом формате в буфер обмена Windows.

Во многих окнах с графиками доступны дополнительные кнопки строки символов:

Значок	Функция
	Активирует режим масштабирования. При нажатой левой кнопке мыши можно выбрать графическую область, которая будет увеличена.
	Отключает режим масштабирования и возвращает первоначальный масштаб.
	Активирует текстовый режим. При нажатой левой кнопке мыши можно выбрать область окна, куда будет добавлен текст для графика. Двойной щелчок по существующему тексту открывает окно, в котором текст можно отредактировать или удалить. Сочетание клавиш Strg + правая кнопка мыши позволяет переместить существующий текст.
	Активирует режим выделения в окнах кривой сигнала или спектров. При помощи левой кнопкой мыши можно добавить надписи к пунктам меню.

Функциональные кнопки

Значок	Функция
[F1]	Вызов контекстной онлайн-помощи.
[F2]	Редактирование ячейки таблицы.
[F5]	Запуск печати содержимого экрана.
[F6]	Измерение выделенной строки последовательности (пункт меню Процед. Старт выдел. строки пос-ти... F6).
[F7]	Отображение дополнительных окон (например, кривая сигнала).
[F8]	Закрытие дополнительных окон.
[F10]	Переключение между строкой меню рабочего поля и окном результатов для работы с клавиатурой.
[F11]	Продолжение остановленного измерения (пункт меню Процед. Продолжить).
[F12]	Запуск и остановка измерения (пункты меню Процед. Старт пос-ти... F12 и Процед. Стоп F12).

Использование принтера

В ASpect PQ используется настроенный в Windows принтер по умолчанию.

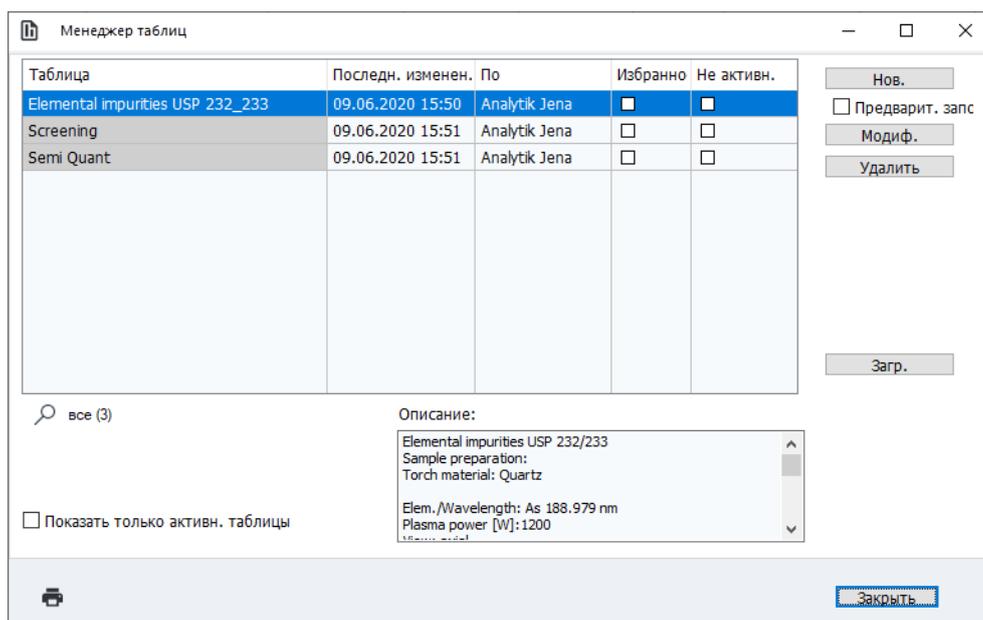
2 Рабочие листы

Рабочий лист - это папка, в которой находятся метод и последовательность. Кроме того, в рабочем листе можно сохранить настройки ID пробы и файлов результатов. С загруженным рабочим листом можно сразу же запустить измерение последовательности.

Вы можете создавать, изменять, удалять, деактивировать или загружать рабочие листы. Соответствующие функции находятся в окне **Менеджер таблиц**.

Открыть окно **Менеджер таблиц** можно щелчком по  в строке символов.

Элементы в окне Менеджер таблиц



Кнопки / опции	Описание
[Нов.]	Создание нового рабочего листа.
Предварит. запл.	Будут применены уже загруженная последовательность и метод.
[Модиф.]	Редактировать выделенный рабочий лист.
[Удалить]	Удалить выделенный рабочий лист.
[Загр.]	Загрузить выделенный рабочий лист для измерения.
Показать только активн. таблицы	Скрыть все рабочие листы в таблице, отмеченные как Не активн..
Описание	Описание отмеченного рабочего листа Эта информация сохраняется при создании рабочего листа.

В таблице представлена следующая информация о рабочих листах:

Столбец таблицы	Описание
Таблица	Имя рабочего листа
Последн. изменен.	Дата последнего измерения рабочего листа
По	Пользователь, который выполнил это изменение Имя пользователя принимается из окна быстрого запуска.

Столбец таблицы	Описание
Избранное	Если активировано, рабочий лист отображается на вкладке Предпочтит. в окне Быстрый старт
Не активн.	Если активировано, данный рабочий лист не отображается в окне быстрого запуска. Рабочий лист, отмеченный как неактивный, можно загрузить из окна Менеджер таблиц .

См. также

 Начало работы с рабочим листом [▶ 9]

2.1 Создание нового рабочего листа

- ▶ Чтобы создать новый рабочий лист, щелчком по кнопке  в строке символов откройте окно **Менеджер таблиц** и выберите **[Нов.]**.
В качестве альтернативы можно нажать в панели инструментов на .
- ✓ Откроется окно **Новая таблица**.
- ▶ Выберите метод и последовательность.
Примечание: В одной последовательности можно загрузить дополнительные методы в виде действий.
- ▶ По желанию можно принять меры для сохранения файла результатов и использования идентификационного файла пробы, а также отредактировать описание (см. ниже).
- ▶ Для выхода из окна нажмите **[ОК]**.
 - ✓ Новый рабочий лист появится в окне **Менеджер таблиц** и его можно будет загрузить.

Элементы в окне Новая таблица

Новая таблица

Назв.: ★ Избранное
 Не активн.

Метод:  
08.06.2020 15:10

Послед-ть: 
09.06.2020 7:45

Назв. пробы: 

Папка: 

Файл рез-тов: 

Папка: 

Назв.:

C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectPQ\ICP\RESULTS\

Элементы:

Исследн. изменен.: 22.03.2021 12:28

Описание:

Поле / опция	Описание
Назв.	Введите имя рабочего листа
Метод	Метод, который сохранен в рабочем листе Нажав на  , откройте окно базы данных и выберите метод.
Послед-ть	Последовательность, которая сохранена в рабочем листе Нажав на  , откройте окно базы данных и выберите последовательность.
Назв. пробы	Дополнительно можно выполнить настройки для загрузки идентификационного файла пробы: (нет) : Настройки идентификационного файла пробы не сохраняются. Открыть папку с файлами Sample ID : После загрузки рабочего листа откроется папка, в которой уже находится идентификационный файл пробы. Нажмите на  и выберите папку. Загрузить файл Sample ID : При загрузке рабочего листа автоматически загружается идентификационный файл пробы. Нажмите на  и выберите файл. Вы также можете определить маску файла с помощью символов-заполнителей "*" и "?".
Файл результатов	Дополнительно можно выполнить настройки для сохранения результатов: (нет) : Измерение запускается в окне Старт, в котором указывается имя файла результатов и его расположение. Всегда создавать новый файл (добавлять печать времени) : Каждый из файлов результатов последовательности сохраняется в новом файле. Имя файла состоит из постоянной части (имени) и метки времени измерения. Выберите папку, в которой будет сохранен файл, и введите имя.

Поле / опция	Описание
	Создать и добавить к файлу: При первом запуске последовательности создается файл результатов. При каждом последующем запуске последовательности результаты добавляются к этому файлу.
Описание	В поле Описание по умолчанию отображаются некоторые параметры анализа, извлеченные из метода. Вы можете произвольно редактировать эту информацию, чтобы предоставить конкретные указания по использованию рабочего листа. Введенные данные для выбранного листа появляются в окне быстрого запуска и в окне Менеджер таблиц .
Избранное	Нажав на звездочку, можно отменить признак Избранное для рабочего листа: Желтая звездочка: Избранное Серая звездочка: Не избранное
Не активн.	Если активировано, данный рабочий лист не отображается в окне быстрого запуска. Рабочий лист, отмеченный как неактивный, можно загрузить из окна Менеджер таблиц .

См. также

 Запуск анализа [▶ 66]

2.2 Редактирование рабочего листа

Вы можете редактировать все настройки в имеющемся рабочем листе.

- ▶ Щелчком по значку  в строке символов откройте окно **Менеджер таблиц**.
- ▶ Выделите рабочий лист и нажмите кнопку **[Модиф.]**.
Откроется окно **Редактир. таблицу**.
- ▶ Изменения вносятся по аналогии с созданием нового рабочего листа.

2.3 Загрузка рабочего листа

Рабочий лист можно выбрать в окне **Быстрый старт** или загрузить в окне **Менеджер таблиц**:

- ▶ Откройте окно **Менеджер таблиц**, щелкнув по значку  в строке символов.
- ▶ Выделите рабочий лист в таблице, щелкнув по нему кнопкой мыши, и нажмите кнопку **[Загр.]**.
✓ Загрузится рабочий лист, а в главном окне отобразится последовательность.

В зависимости от конфигурации рабочего листа теперь можно объединить метод и последовательность, загруженные с рабочим листом, с идентификационным файлом пробы или сразу же начать измерение.



ПРИМЕЧАНИЕ

При загрузке рабочего листа всегда используются текущие версии метода и последовательности.

При загрузке метода или последовательности, отличающихся от рабочего листа, параметры файла результатов и ID проб в рабочем листе сбрасываются.

2.4 Удаление рабочего листа

Ненужный рабочий лист можно удалить.

- ▶ Щелчком по значку  в строке символов откройте окно **Менеджер таблиц**.
- ▶ Выделите рабочий лист и нажмите кнопку **[Удалить]**.
 - ✓ После вопроса рабочий лист удаляется.

3 Методы

В методах сохранены необходимые для анализа параметры:

- Выбор аналитических линий
- Параметры оценки линий
- Настройки плазмы и спектрометра
- Способ подачи проб
- Параметры калибровки
- Статистические оценки
- Настройки контроля и обеспечения качества
- Настройки вывода измеренных значений

Метод является основой последовательности измерения, в которой заданы очередности измерения проб и другие действия в анализе. Сохраненные методы можно, тем самым, использовать для анализа с разными последовательностями.

Открыть окно **Метод** можно щелчком по значку  в строке символов. Отобразится последний активный метод. Если после запуска программы до последнего момента методы не загружались, в окнах отображаются настройки по умолчанию, или окна пустые.

3.1 Создание, сохранение и загрузка методов

Методы сохраняются в базе данных. Если параметры существующего метода меняются, и эти изменения сохраняются под тем же именем, создается новая версия метода. Т. е., невозможно перезаписать и тем самым случайно удалить существующий метод. Другие функции для экспорта, импорта или удаления методов находятся в окне **Данные**.

См. также

-  Управление методами и последовательностями [▶ 123]

3.1.1 Загрузка метода

Загрузить параметры метода можно как из базы данных методов, так и из существующего файла результатов.

Загрузка из базы данных

- ▶ Откройте окно базы данных. Это можно сделать следующими способами:
 - На панели инструментов щелкните по значку папки рядом с полем **Метод**.
 - Выберите пункт меню **Файл | Загр. метод**.
 - В окне нажмите кнопку **Метод [Откр.]**.
- ▶ Выберите требуемый метод из списка.
- ▶ В поле **Кат.** можно ограничить отображаемые методы, выбрав категорию. Для отображения всех методов удалите запись в поле **Кат.**
- ▶ Активируйте контрольное поле **Только текущ. версия**, если для одноименных методов следует отобразить только метод с наибольшим номером версии.
- ▶ Чтобы открыть окно **Метод**, нажмите **[OK]**.

Загрузка из файла результатов

- Из отображенного в главном окне файла результатов можно извлечь метод.
 - ▶ Правой кнопкой мыши щелкните по произвольной пробе.

- ▶ В контекстном меню выберите пункт **Загр. метод из рез-тов**.
- ▶ После контрольного вопроса, следует ли перезаписать текущие параметры метода, щелчком по значку  можно отобразить метод.

3.1.2 Сохранение метода

После ввода параметров метода сохраните метод в базе данных:

- ▶ В окне **Метод** нажмите кнопку **[Сохранить]**, чтобы открыть окно **Сохранение метода**. Или выберите пункт меню **Файл | Сохранить | Метод**.

Сохранение метода

Назв.: Кат.:

Назв.	Верс.	Дата	Время	Кат.	Оператор	Статус
Example Multiline Ev	1	08.06.2020	15:10	INS	User	Разраб.
Mehrlinienauswertung	1	08.06.2020	13:39		User	Разраб.
Method_Ground	1	05.06.2020	17:15	INS	User	Разраб.
test	2	03.11.2020	9:15		Admin	Разраб.
TW_Standardkit	1	08.06.2020	12:34		User	Разраб.
USP_232/233	2	10.03.2021	16:26		User1	Разраб.

Сорт. по: Увеличение Уменьшение

Только текущ. версия

Исполз. как рутинный метод

Сохранить данные калиб-ки

Описание:

- ▶ Выполните следующие настройки:

Опция	Запись/ настройка
Назв.	Ввод имени метода.
Таблица	Обзор существующих методов Опции группы Сорт. по позволяют упорядочить методы по различным критериям.
Описание	Опциональный ввод более подробных пояснений для метода.
Только текущ. версия	При активированном контрольном поле при одноименных методах будет отображаться только метод с наибольшим номером версии.
Исполз. как рутинный метод	При активированном контрольном поле метод будет доступен в программном режиме Процедура . Выбор программного режима осуществляется в окне Быстрый старт .
Кат.	Опциональный ввод категории (три символа) для дальнейшей маркировки и упорядочивания методов.
Сохранить данные калиб-ки	Существующие калибровочные кривые сохраняются с методами и могут использоваться для дальнейшего анализа.

- ▶ Сохраните метод, нажав кнопку **[OK]**.

После этого метод будет сохранен в базе данных. При использовании уже существующего имени метода этот метод не будет перезаписан, а будет создана новая версия в базе данных. Чтобы удалить методы из базы данных, необходимо сделать это посредством однозначной соответствующей команды.



ПРИМЕЧАНИЕ

Метод сохраняется также в файле результатов измерений. После загрузки файла результатов можно также восстановить метод.

См. также

- 📖 Окно быстрого запуска [▶ 7]
- 📖 Управление методами и последовательностями [▶ 123]

3.1.3 Создание нового метода

При создании нового метода можно обращаться к настройкам по умолчанию, параметрам сохраненного метода или текущим параметрам метода.

- ▶ Выберите пункт меню **Файл | Создать новый метод**.
- ▶ Активируйте одну из трех доступных опций и откройте окно **Метод**:

Опция	Значение
На основе параметров по умолч.	Открытие окна с новыми параметрами метода (только с настройками по умолчанию для калибровки и статистики).
На основе текущ. параметров	Открытие окна Метод с текущими параметрами метода.
На основе сохран. метода	Открытие окна Загр. метод . После выбора метода его параметры будут отображены в окне Метод .

- ▶ Или щелкните по значку  или выберите пункт меню **Разраб. метода | Метод**, чтобы открыть окно **Метод** с текущими параметрами.
- ▶ Выполните необходимые настройки метода.
- ▶ Активируйте установленные параметры метода для последующего анализа кнопкой **[ОК]** или **[Принять]**.

См. также

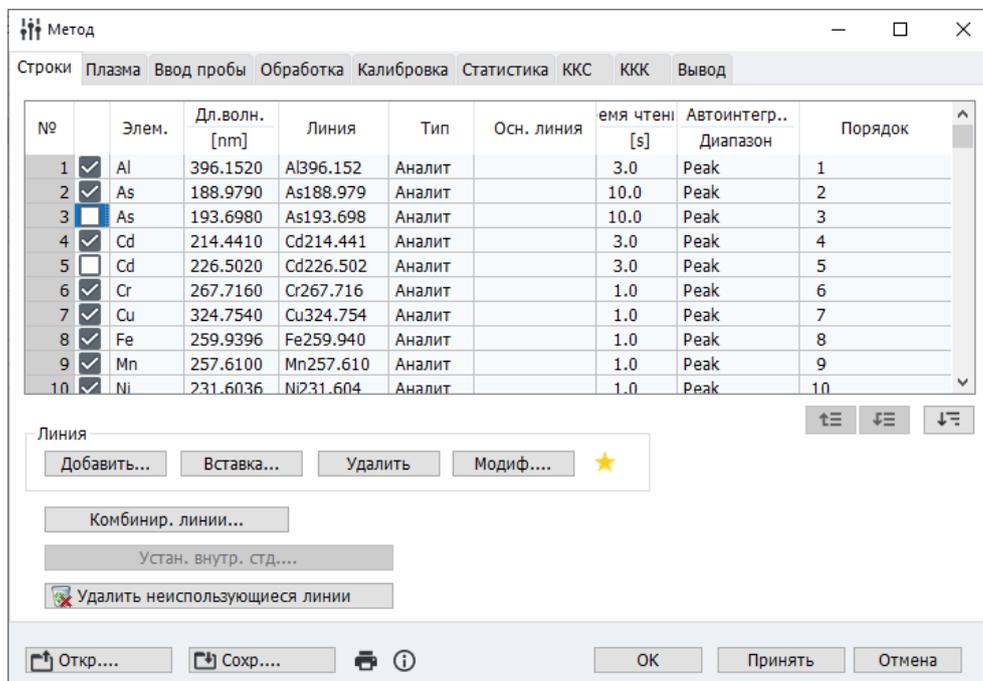
- 📖 Настройки параметров метода [▶ 25]

3.2 Настройки параметров метода

3.2.1 Выбор аналитической линии –Вкладка Линии

В окне **Метод / Строки** выберите аналитические линии для измерения.

Окно Метод / Строки



Параметры таблицы линий

Столбец таблицы	Описание
№	Последовательность выбранных линий в таблице
<input type="checkbox"/> / <input checked="" type="checkbox"/>	Доступно только в режиме Отметка облегчает разработку метода, при которой в начале измеряется несколько линий одного элемента, после чего выбирается подходящая линия. Линия элемента, активированная флажком, используется для анализа и измеряется. Деактивированные линии исключены из последующего анализа и не измеряются. Деактивированные линии не удалены в явном виде из таблицы линий.
Элем.	Символ анализируемого элемента
Длина волны	Длина волны аналитической линии в нм
Линия	Наименование аналитической линии. В настройке по умолчанию наименование линии состоит из символа элемента и длины волны. Однако наименование можно произвольно редактировать, и оно должно быть однозначным.
Тип	Выбор между Аналит (анализируемая линия) и Внутр.станд. (внутренняя базовая линия)
Осн. линия	Индикация, с какой аналитической линией одновременно измеряется текущая линия (синхронное измерение). Время измерения можно сократить, зарегистрировав линии, расположенные почти рядом, посредством настройки спектрометра. При щелчке по кнопке [Комбинируй. линии] отобразятся возможные сочетания.
Время чтения	Общее время измерения для аналитической линии

Столбец таблицы	Описание
Автоинтегр. Диапазон	<p>Автоматический выбор времени интегрирования, так, чтобы CCD-детектор оптимально освещался, и не возникало пересвета. При пересвете не принятый пикселем избыточный заряд растекается на соседний пиксель и вызывает погрешность измерения (эффект блюминга). Для определения времени интегрирования необходимо выбрать соседний участок:</p> <p>Спектр Время интегрирования оптимизируется под самый высокий пик в спектральной области линии. Эта опция установлена по умолчанию и дает надежный результат.</p> <p>Peak Время интегрирования оптимизируется под пик анализа. При выборе этой опции для анализа оптимально используется динамический диапазон CCD-детектора. Однако следует обратить внимание на то, что не в непосредственной близости пикселя анализа расположен более высокий пик. В этом случае результат измерения может быть искажен эффектом блюминга.</p> <p>етектор Время интегрирования настраивается по самому высокому пику на детекторе. При этой опции нет засвеченных областей детектора, при определенных обстоятельствах пиксели пика анализа освещаются неоптимально.</p>
Порядок	<p>Последовательность в ходе анализа Последовательность измерения может быть задана произвольно.</p> <p>Примечание: После выделения числа и щелчка по значку  последующих строк числа будут упорядочены по возрастанию. Вы можете упорядочить выделенные строки (элементные линии) в таблице щелчком по значку  и  в желаемой последовательности измерения, ввести в первой строке под последовательностью «1» и, щелкнув по значку , упорядочить последовательность измерения по возрастанию всех других аналитических линий.</p>

Кнопки группы Строки

Кнопки **[Добавить]**, **[Вставка]** и **[Модиф.]** позволяют добавить в таблицу линий дополнительные аналитические линии или отредактировать выбранную линию. По щелчку по одной из этих экранных кнопок откроется окно **Выбрать элемент/линию** для ввода дальнейших данных. Кнопка **[Удалить]** позволяет удалить из метода одну или несколько выделенных аналитических линий.

Дополнительные экранные кнопки

Экранная кнопка	Описание
[Комбинируемые линии]	Возможность синхронного измерения аналитических линий, которые регистрируются вместе посредством настройки монохроматора.
[Устан. внутр. станд.]	Привязка аналитических линий ко внутреннему стандарту и их коррекция.
[Удалить неиспользуемые линии]	<p>Доступно только в программном режиме Разраб. метода Удаление всех деактивированных линий из списка методов.</p> <p>Примечание: Если в таблице линий используются все линии, методы можно сохранять и использовать только как штатные методы.</p>

См. также

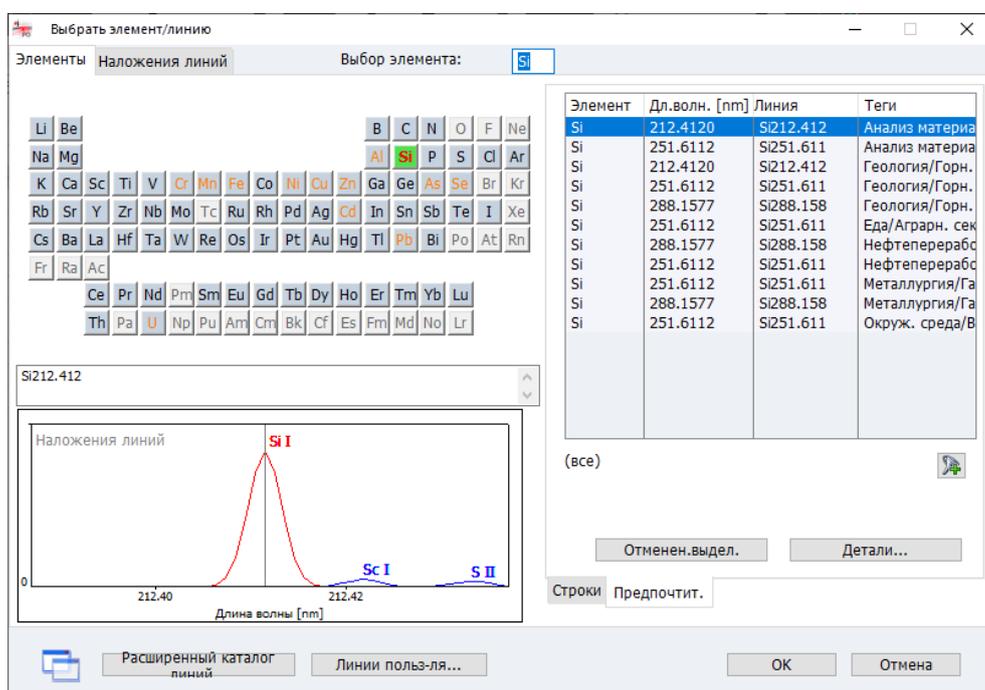
- 📖 Синхронное измерение линий [▶ 29]
- 📖 Наиболее часто используемые элементы управления [▶ 14]
- 📖 Назначение внутренних стандартов [▶ 30]

3.2.1.1 Вставка аналитических линий в таблицу линий

Выбор аналитических линий осуществляется в окне **Выбрать элемент/линию**.

Элементы в окне Выбрать элемент/линию

Вкладка **Элементы** содержит периодическую систему со всеми анализируемыми в ИСП-ОЭС элементами (темно-серые экранные кнопки и черные значки элементов). Выделенные серым элементы недоступны. Вкладка **Наложения линий** отображает известные возможные помехи для выбранной линии с относительной чувствительностью.



Лист таблицы **Предпочтит.** содержит предварительно выбранные линии с рекомендуемыми приложениями (ключевые слова). При выборе этих линий оптимизированные параметры метода одновременно переносятся в метод. В эти избранные линии также можно добавить собственные линии.

Лист таблицы **Строки** содержит все доступные для выбора линии со следующими данными:

Столбец таблицы	Описание
Элемент	Элемент
Дл.волн.	Аналитическая длина волны в Нм
Тип	Отображение типа атомизации: I: атомная линия II: ионная линия
БЕК (ВЕС)	Стандартное значение ФЭК (фоновая эквивалентная концентрация) линии аналита. Значение ФЭК (фоновая эквивалентная концентрация) – концентрация анализируемого вещества, порождающая сигнал, эквивалентный фоновому. Тем самым меньшее значение соответствует более высокой чувствительности.

Столбец таблицы	Описание
	Значения ФЭК определяются при следующих условиях: обзор в осевом направлении, мощность 1200 Вт, поток плазмообразующего газа 12 л/мин, поток вспомогательного газа 0,5 л/мин, поток газа распылителя 0,6 л/мин.
Диапазон	Иерархия рекомендуемых аналитических линий. Рекомендуемая аналитическая линия зависит как от чувствительности, так и от возможных помех от соседних линий других элементов. Чем выше линия находится в иерархии, тем выше шансы успешного получения с аналитической линией хороших результатов.

Опции **Элемент**, **Длина волны** или **БЕК (ВЕС)** позволяют упорядочить таблицу линий по возрастанию по химическому элементу, длине волны или ФЭК.

При активации опции **Сортировать выделение как список** линии вставляются в таблицу линий метода в последовательности упорядочивания списка (**Сорт. по**). Если эта опция деактивирована, линии вставляются в последовательности маркировки.

Выбор линий

- ▶ В окне **Метод / Строки** щелкните по кнопке **[Добавить]** или **[Вставка]**. Откроется окно **Выбрать элемент/линию**.
- ▶ В периодической системе щелкните по символу элемента (элементы, которые можно выбрать, представлены серыми экранными кнопками). Тем самым в таблице линий/ таблице избранного отобразятся только линии выбранного элемента.
Или введите в поле **Выбор элемента** символ элемента.
Чтобы снова показать полный список элементов в таблице линий, удалите введенные данные в поле **Выбор элемента**.
- ▶ В листе таблицы **Предпочтит.** выделите линии согласно вашей задаче или в таблице **Строки** установите флажки для нужных линий.
- ▶ Перейдите во вкладку **Наложения линий** и проверьте линии на известные интерференции.
- ▶ Продолжайте, пока не выберете линии для каждого аналита. Выйдите из окна, нажав кнопку **[ОК]**.
✓ Выделенные линии сохраняются в окне **Метод / Строки**.

Примечание:

В ходе разработки метода выбирайте несколько линий для каждого аналита.

Расширенный каталог линий

После установки список линий содержит предварительно выбранные аналитические линии. Эти линии можно дополнить аналитическими линиями из расширенного каталога линий.

- ▶ В окне **Выбрать элемент/линию / Элементы** выберите **[Расширенный каталог линий]**.
- ▶ В списке выделите мышью нужные линии.
Повторный щелчок мыши по отдельной линии позволяет снять выделение. Кнопка **[Отменен.выдел.]** позволяет снять все выделения.
- ▶ Щелчком по кнопке **[Добавить к таблице линий]** добавьте выбранные линии в список.



ПРИМЕЧАНИЕ

Линии, добавленные из расширенного каталога линий, нельзя удалить из стандартного каталога.

Создание и редактирование собственных аналитических линий

В ASpect PQ можно создавать собственные аналитические линии:

- ▶ В окне **Выбрать элемент/линию / Элементы** выберите [**Линии польз-ля**].
- ▶ В окне **Ред. линии** введите данные для **Элемент** и **Длина волны** и выберите в списке **Тип**.
- ▶ Нажав кнопку [**Доб.**], добавьте введенные данные в собственный список линий.
- ▶ При нажатии кнопки [**Закреть**] собственные линии будут добавлены в список линий.

Собственные линии можно редактировать и снова удалять из списка линий.

- ▶ Чтобы отредактировать линию в собственном списке, щелчком мыши выделите линию в списке окна **Ред. линии**.
Введите новые данные линии, после чего нажмите кнопку [**Модиф.**].
- ▶ Удалить выделенную запись из списка можно, нажав кнопку [**Удалить**].

См. также

- 📖 Определение собственных избранных линий [▶ 30]

3.2.1.2 Синхронное измерение линий

При слиянии линий в текущей программе измерения выполняется поиск линий, которые вместе можно измерить и таким образом также синхронно измерить детектор посредством настройки монохроматора.

- ▶ В окне **Метод / Сохр. отклонение в данных линии** выберите [**Комбинир. линии**].
Откроется одноименное окно с обзором возможных сочетаний линий.

Элементы в окне Комбинир. линии

В окне **Комбинир. линии** приведены возможные сочетания линий. Столбцовая диаграмма показывает положение линий на детекторе для выбранной строки списка.

Комбинир. линии

	Осн. линия		Доп. линия		Дл.волн.изм. [nm]	Статус
	Линия	Дл.волн. [nm]	Линия	Дл.волн. [nm]		
<input type="checkbox"/>	Sn181.062	181.0620	S180.672	180.6720	180.8670	диапазон частично лежит вне области
<input type="checkbox"/>	Si190.073	190.0730	Os189.900	189.9000	189.9865	диапазон частично лежит вне области
<input checked="" type="checkbox"/>	Si190.073	190.0730	Sn189.927	189.9270	189.9865	ОК
<input type="checkbox"/>	W218.936	218.9360	Yb218.571	218.5710	218.7605	диапазон частично лежит вне области
<input checked="" type="checkbox"/>	W218.936	218.9360	W218.950	218.9500	218.7605	ОК

Нет скомбинир. линий
Использ. для измерения

Положения линий на ПЭС [nm] Показ. все полож. линий

ОК Отмена

Столбцы таблицы/
экранная кнопка

Контрольное поле

Содержание

Если установлен, соответствующее сочетание линий в методе будет измеряться синхронно.

Столбцы таблицы/ экранная кнопка	Содержание
Осн. линия	Для измерения сочетания линий используются параметры измерения Осн. линия . Линия Наименование основной линии Дл.волн. Длина волны основной линии в Нм
Доп. линия	Линия Наименование дополнительной анализируемой линии Дл.волн. Длина волны в Нм дополнительной анализируемой линии
Дл.волн.изм.	Измеренная длина волны в Нм (середина строки детектора)
Статус действия	Комментарии
[Нет скомбинир. линий]	Снятие всех выделений. Линии в методе не будут измеряться вместе.
[Использ. для измерения]	В сочетании линий меняет местами основную и дополнительную линию.

Для сочетания линий автоматически определяются основная и дополнительные линии. Дополнительные линии берут на себя продолжительность анализа и параметры плазмы основной линии. Кнопка **[Использ. для измерения]** позволяет поменять этот приоритет местами.

3.2.1.3 Определение собственных избранных линий

Предпочтительные аналитические линии можно добавить в список избранного с указаниями по предпочтительному использованию. Под этой записью сохраняются данные по аналитической линии со всеми существенными для линий параметрами метода. Список избранного доступен при каждом выборе элементных линий.

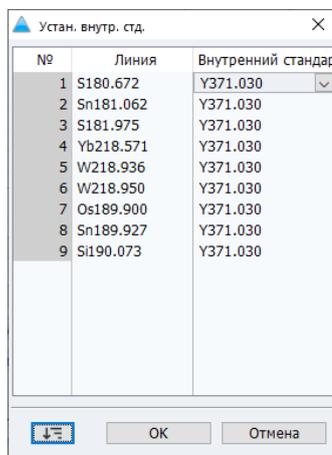
- ▶ Выделите линию в таблице окна **метод / Строки** и щелкните по значку .
- ▶ В окне **Добавить к предпочтит.** отредактируйте наименование линии.
- ▶ В поле **Примеч.** можно внести дополнительные комментарии о линии.
- ▶ В списке **Теги** выберите одно или несколько слов. Список ключевых слов можно дополнить собственными записями. Предопределенные ключевые слова помечены синим цветом.
 - ✓ Линия доступна в окне **Выбрать элемент/линию** .

3.2.1.4 Назначение внутренних стандартов

Внутренние стандарты предназначены, главным образом, для коррекции неспектральных сбоев, в основании которых лежат сбои при транспортировке проб. Внутренние стандарты задаются в таблице линий окна **Метод / Строки**.

- ▶ Вставьте аналитическую линию, которую вы хотите использовать как внутренний стандарт, в таблицу линий, и выберите в столбце таблицы **Тип** опцию **Внутр.станд.**.
- ▶ Нажмите кнопку **[Устан. внутр. std.]**.
Откроется окно **Устан. внутр. std.** .
- ▶ Теперь каждой аналитической линии в таблице можно назначить внутренний стандарт.

- ▶ Щелчок по значку  применяет настройки для аналитической линии ко всем последующим линиям в таблице.
- ▶ При нажатии кнопки [OK] настройки будут применены к методу.

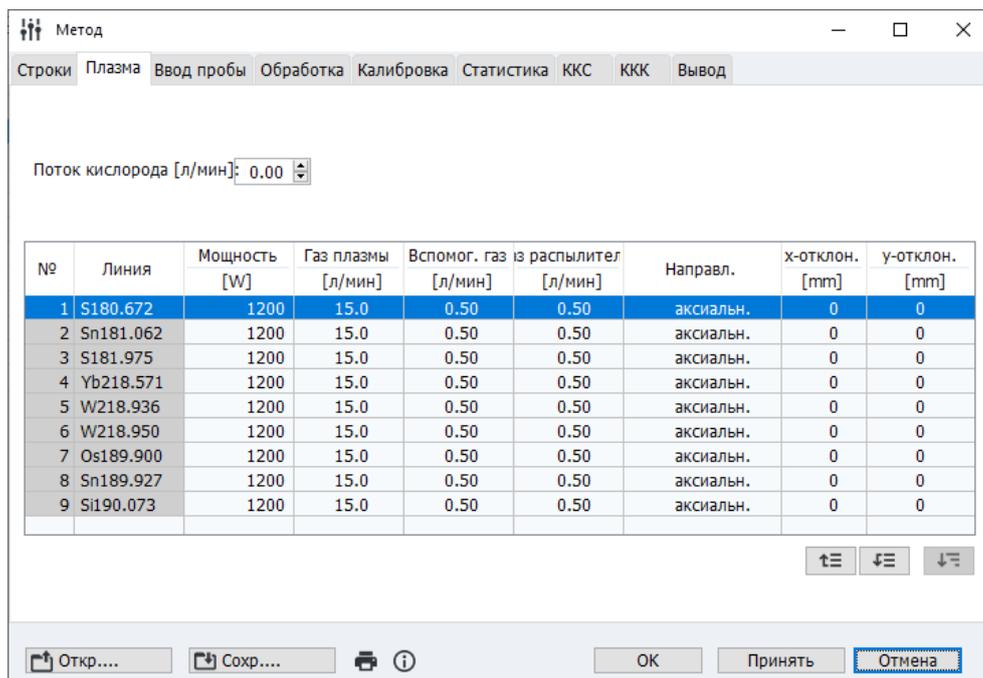


3.2.2 Настройка параметров плазмы и передающей оптики – окно Метод / Плазма

В окне **Метод / Плазма** выполните следующие настройки:

- Газовые потоки для плазмы в горелке
- Выбор направления обзора плазмы и ее юстировки

Элементы в окне Метод / Плазма



Столбец таблицы	Описание
№	Последовательность выбранных линий в таблице
Линия	Наименование аналитической линии
Мощность	Эффективная мощность плазмы в Вт

Столбец таблицы	Описание
	Повышение мощности плазмы улучшает ее стабильность, например, для органических растворителей или проб с высоким содержанием солей в качестве анализируемого раствора. В то же время более высокая мощность плазмы требует также более высокого потока плазмообразующего газа во избежание расплавления или повреждения горелки.
Газ плазмы	Поток плазмообразующего газа в л/мин Плазмообразующий газ протекает между внешней и внутренней кварцевой трубкой горелки. За счет индукции катушки газ переводится в состояние плазмы и одновременно охлаждает внешнюю трубку горелки. Более высокий поток плазмообразующего газа может увеличить срок службы горелки.
Вспомог. газ	Поток вспомогательного газа в л/мин Вспомогательный газ протекает между внутренней кварцевой трубкой и инжектором. Он поддерживает формирование измерительного канала и отталкивает плазму от наконечника инжектора. Более высокий поток вспомогательного газа требуется, например, для измерительных растворов с органическими растворителями или более высокими концентрациями соли.
Газ распылителя	Поток газа распылителя в л/мин Газ подается распылителем. Распылитель распыляет пробу и переводит ее через камеру распылителя и инжектор в плазму.
Направл.	Направление обзора плазмы Передающая оптика позволяет перенести эмиссионный спектр излучения из плазмы в двух направлениях к спектрометру. В зависимости от линии аналита можно выбрать оптимальное направление обзора. радиальн. Обзор плазмы осуществляется со стороны на определенной высоте через верхний край катушки. аксиальн. Обзор осуществляется сверху вдоль продольной оси плазмы. Оба направления обзора можно также ослабить. При высоких интенсивностях это позволит избежать перелива детектора и увеличить аналитический диапазон.
х-отклон. и у-отклон.	Коррекция передающей оптики в мм Смещение оптики по измерительному каналу (при обзоре в радиальном направлении) и из центра измерительного канала (при обзоре в радиальном и осевом направлении) позволяет сканировать участки разной температуры нагрева и, таким образом, учитывать оптимальную температуру эмиссии аналитической линии. Вы можете задать автоматическое определение оптимального значения для линии в окне Плазма .



ПРИМЕЧАНИЕ

На первом этапе разработки метода (выбор подходящих линий) будет достаточно предустановленных параметров плазмы. Изменить эти параметры можно будет после определения аналитических линий, необходимых коррекций фона и определения участка линейности для дальнейшей оптимизации параметров метода.

Использование кислорода

Для специальных задач, например, органических матриц, в качестве дополнительного газа можно использовать кислород.

- ▶ В поле Поток кислорода настройте поток газа.

См. также

- 📄 Юстировка и оптимизация плазмы [▶ 108]

3.2.3 Настройки транспортировки проб – окно Метод / Подача пробы

В окне **Метод / Подача пробы** выполните следующие настройки анализатора:

- Скорости нагнетания насоса анализатора
- Использование автосамплера
- Параметры промывки

Окно Метод / Подача пробы

Продолжительность нагнетания на ИСП-ОЭС

Опция	Описание
Нормальн. реж.	Стандартная скорость нагнетания, с которой проба транспортируется в ходе анализа Эта скорость должна обеспечивать оптимальное распыление пробы и ориентироваться на рекомендуемую скорость нагнетания используемого распылителя.
Быстр. режим	Повышенная скорость, с которой можно запустить промывку в перерывах между измерениями (с промывочной жидкостью) и транспортировать пробу до распылителя Включение этой скорости оптимизирует время транспортировки. Однако эту скорость нельзя использовать во время измерения, так как однородное распыление пробы больше не гарантировано.
Время задержки	Время от начала всасывания пробы до фактического запуска измерения. Это время требуется для промывки пробой всего пути подачи пробы, включая горелку, и для обеспечения стабильной атомизации. Примечание: Время задержки включает также время, установленное в поле [s].
Время быстр. режима	Время, когда по истечению времени задержки проба транспортируется с повышенной скоростью нагнетания



ПРИМЕЧАНИЕ

В окне **Метод / Подача пробы** выставьте скорости нагнетания перистальтического насоса ИСП-ОЭС. Скорость нагнетания на автосамплере для подачи промывочной жидкости регулируется ручкой настройки над насосом на автосамплере или, для Cetas-сAMPLеров, в окне **Автосамплер / Техн. параметры**.

Использование автосамплера

Если для анализа используется автосамплер, активируйте опцию **Автосамплер**. При нажатии кнопки **[Параметры]** производится переход к настройкам автосамплера.

Промывка

В ходе отработки последовательности этапы промывки можно настраивать после каждого измерения пробы. При автоматическом измерении промывочная жидкость забирается из промывочной емкости автосамплера. При ручном измерении выводится требование предоставить промывочную жидкость.

- ▶ Если вы хотите промывать путь подачи пробы во время отработки последовательности, в группе **Продувка** в списке выберите опцию **Между пробами**.
- ▶ В поле ввода **Время промывки** задайте продолжительность промывки в секундах.
- ▶ Если весь этап промывки должен производиться только на ускоренном ходу, активируйте опцию **Wash only in fast mode**. При отключенной опции сначала промывка производится на ускоренном ходу в течение введенной продолжительности ускоренного хода (**Время быстр. режима**), а оставшееся время промывки – на стандартной скорости.
- ▶ Если промывка не требуется, выберите опцию **off**.

Проверка очистки

Если при анализе проб происходит превышение рабочего диапазона калибровочной кривой более чем на 10 %, можно прополоскать путь подачи пробы и горелку, что позволит удалить загрязнения от предыдущего измерения. В ходе промывки в целях контроля результата очистки измеряется интенсивность, а промывка производится до достижения контрольного предела. Автоматический контроль очистки рекомендуется после измерения высококонцентрированных проб.

Опция	Описание
Управляемая очистка	Если опция активирована, при превышении концентрации автоматически выполняется контролируемая очистка.
Контр.предел (Интенс.)	Значение уровня сигнала, которое должно быть достигнуто в ходе промывки до измерения следующего раствора.
Линия	Элементная линия, которая используется как контрольная

3.2.4 Оценка пиков – окно Метод / Обработка

В окне **Метод / Обработка** задайте параметры оценки пиков.



ПРИМЕЧАНИЕ

В разработке метода определите оптимальные настройки коррекции фона соответствующей аналитической линии в окне **Ред. спектр / Анализ** и выполните перенос данных в метод.

Окно Метод / Обработка

Метод

Строки Плазма Ввод пробы Обработка Калибровка Статистика ККС ККК Вывод

№	Линия	Диапазон [nm]		Обраб. пик	теп. пол	Коррекц.	Постр.КФ	Пиксели КФ
		ниж.	верх.					
1	S180.672	-0.11	0.11	3 пиксель	авто	выкл.	динамич.	-15,15
2	Sn181.062	-0.15	0.15	3 пиксель	авто	выкл.	динамич.	-15,15
3	S181.975	-0.11	0.11	3 пиксель	авто	выкл.	динамич.	-15,15
4	Yb218.571	-0.13	0.13	3 пиксель	авто	выкл.	динамич.	-15,15
5	W218.936	-0.12	0.12	3 пиксель	авто	выкл.	динамич.	-15,15
6	W218.950	-0.12	0.12	3 пиксель	авто	выкл.	динамич.	-15,15
7	Os189.900	-0.11	0.11	3 пиксель	авто	выкл.	динамич.	-15,15
8	Sn189.927	-0.11	0.11	3 пиксель	авто	выкл.	динамич.	-15,15
9	Si190.073	-0.11	0.11	3 пиксель	авто	выкл.	динамич.	-15,15

↑ ↓ ↕

Спектр. коррекции...
Факторы ИЕС...

Откр.... Сохр.... ОК Принять Отмена

Столбец таблицы	Описание
№	Последовательность выбранных линий в таблице
Линия	Наименование аналитической линии
Диапазон	<p>ниж. Нижний предел спектральной области для анализа спектров относительно измеренной длины волны</p> <p>верх. Верхний предел спектральной области относительно измеренной длины волны</p>
Степ. пол.	<p>Выбор степени многочлена кривой регрессии при статической коррекции фона</p> <p>На выбор доступны многочлены 0-й, 1-й, 2-й и 3-й степени или автопоиск степени многочлена (опция авто).</p>
Обраб. пика	<p>Выбор оценки пика</p> <p>Пиксели Число пикселей, которые берутся для оценки интенсивности и из которых в конечном счете формируются результаты измерений. Интенсивности обрабатываемых пикселей суммируются. Таким образом можно минимизировать неточности анализа, возникающие в результате колебаний позиции пика. Рекомендуемое число выбираемых пикселей: 3</p> <p>Высота Интерполяция максимального пика</p> <p>Опред. поль-лем Произвольный выбор обрабатываемых пикселей, например, для оценки мультиплета. Пример ввода: 50,120-130 образует сумму выше результатов измерений пикселей 50 и от 120 до 130.</p>
Коррекц.	<p>Алгоритм спектральной коррекции (см. ниже).</p> <p>выкл. Не проводить спектральной коррекции</p> <p>LSM Спектральная коррекция методом наименьших квадратов</p>

Столбец таблицы	Описание
	ИЕС Спектральная коррекция путем поправки на матричные эффекты (Inter Element Correction)
Постр.КФ	Настройка пикселей для коррекции фона динамич. Поиск пикселей для коррекции фона осуществляется автоматически программой. статич. Пиксели для коррекции фона задаются пользователем в столбце Пиксели КФ .
Пиксели КФ	Положение пикселей относительно анализируемого пикселя при статической настройке коррекции фона Введите номера пикселей для коррекции фона.
Экранные кнопки	Описание
[Спектр. коррекции]	Назначение аналитическим линиям модели для спектральной коррекции.
[Факторы ИЕС]	Назначение аналитическим линиям поправки на матричные эффекты.

См. также

- 📖 Оценка пика и определение коррекции фона – окно Ред. спектр / Обработка [▶ 84]

3.2.4.1 Спектральная коррекция методом наименьших квадратов

Спектральная коррекция позволяет расчетным путем устранить структурированные эмиссии фона, вызванные, например, наложением аналитических линий. Условие: объединение возможных спектров помех для соответствующей аналитической линии в одной модели коррекции.

- ▶ В окне **Метод / Обработка** выберите **[Спектр. коррекции]** и выставьте подходящую модель коррекции отдельно для каждой линии.
 - ✓ Линии, которым назначена модель коррекции, обозначены в столбце **Коррекц.** как **LSM**.

См. также

- 📖 Устранение спектральных помех – окно Ред. спектр / Спектр. коррекции [▶ 86]

3.2.4.2 Поправка на матричные эффекты

Поправка на матричные эффекты позволяет корректировать прямые наложения линий. Условие для этого – дополнительная, без помех, длина волны мешающего компонента.

Раствор из единичного элемента (раствор для анализа с использованием метода поправки на межэлементное влияние) позволяет определить соотношение обеих линий мешающего компонента (наложенная линия и линия без помех). Коэффициент поправки на межэлементное влияние используется при последующих измерениях проб для вычитания мнимой интенсивности или концентрации мешающего компонента на линии аналита.

Окно назначить элементы IEC

назначить элементы IEC						
	Аналитич. линия	Помех.	раствор IEC	хол. IEC	Фактор IEC	вручную
1	S180.672	Sn181.062	раствор IEC1	хол. IEC1		<input type="checkbox"/>
<p>Добавить Вставка Удалить растворы IEC...</p> <p>Межэлементная коррекция основана на</p> <p><input checked="" type="radio"/> Помехи <input type="radio"/> apparent концентрации Извлечь фактор из данных результатов</p> <p style="text-align: right;">OK Отмена</p>						

Элемент управления	Значение
[растворы IEC]	Ввод наименования, концентрации, единицы и позиции авто-сAMPLера используемых для поправки на матричные эффекты IEC-растворов и бланков
[Добавить]	Прикрепление новой строки в конец списка
[Вставка]	Вставка новой строки в выделенную позицию списка.
[Удал. знач. на-стройке]	Удаление выделенной строки
Межэлементная коррекция основана на	<p>Помехи Коррекция осуществляется путем вычитания интенсивностей.</p> <p>Концентрация Коррекция осуществляется путем вычитания мнимых концентраций.</p>
[Извлечь фактор из данных результатов]	Извлечение расчетных коэффициентов поправки на межэлементное влияние из загруженного файла результатов

Столбец таблицы	Описание
Специфицировать р-ры IEC	Наименование мешающей аналитической линии
Помех.	Наименование мешающей линии
раствор IEC	Наименование раствора из единичного элемента, который содержит мешающий компонент. Спецификация IEC-растворов (растворов для анализа с использованием метода поправки на межэлементное влияние) задается кнопкой [раствор IEC] .
хол. IEC	Наименование раствора бланка, вычитаемого из интенсивности или концентрации мешающего компонента. Спецификация растворов бланка задается кнопкой [раствор IEC] .
Фактор IEC	Коэффициент IEC (коэффициент поправки на межэлементное влияние) Расчетные коэффициенты отображаются серым цветом.
вручную	При установленном флажке коэффициент поправки на межэлементное влияние можно ввести вручную. Измерительные растворы не требуются.

Назначение поправки на матричные эффекты

- ▶ В окне **Метод / Обработка** выберите **[Факторы ИЕС]**.
Откроется окно **назначить элементы ИЕС**.
- ▶ Задайте спецификацию растворов для анализа с использованием метода поправки на межэлементное влияние. Вам нужен бланк и раствор для анализа с использованием метода поправки на межэлементное влияние (раствор из единичного элемента) для каждого мешающего компонента.
- ▶ Нажмите кнопку **[растворы ИЕС]**.
Откроется окно **Аналитич. линия**

Специфицировать р-ры ИЕС

Тип	Назв.	Конц.	Един.	Поз.
хол. ИЕС1	Sn IEC blank	0	mg/L	1
раствор ИЕС1	Sn IEC solutions	10	mg/L	2

- ▶ В таблице для каждого мешающего компонента вставьте бланк и ИЕС-раствор (раствор для анализа с использованием метода поправки на межэлементное влияние), щелкнув по кнопке **[Lj,fdbnm ,kfyg]** и **[Добавить раствор ИЕС]** .
- ▶ В соответствующие ячейки таблицы введите имя для каждого соответствующего раствора.
- ▶ Для растворов для анализа с использованием метода поправки на межэлементное влияние в столбце **Концентрация** введите концентрацию мешающего компонента в растворе для анализа с использованием метода поправки на межэлементное влияние.
- ▶ Подтвердите введенные значения, нажав кнопку **[OK]**.
- ▶ Перейдите в окно **назначить элементы ИЕС** и выберите в столбце таблицы **Специфицировать р-ры ИЕС** линию анализа с помехами.
- ▶ В столбце **Помех.** выберите линию мешающего вещества без помех.
- ▶ В столбцах **раствор ИЕС** и **хол. ИЕС** задайте соответствующий раствор из единичного элемента и раствор бланка.
- ▶ Выберите тип поправки на матричные эффекты на основании **Помехи** или **аррагент концентрации**.
- ▶ Подтвердите введенные значения, нажав кнопку **[OK]**.
 - ✓ Линии, которым назначена поправка на матричные эффекты, обозначены в таблице линий окна **Метод / Обработка** в столбце **Коррекц.** как ИЕС.

Измерение растворов для анализа с использованием метода поправки на межэлементное влияние должно осуществляться в последовательности после измерения калибровочных стандартов/ расчета калибровки.

Ввод коэффициентов вручную

Вместо того, чтобы определять коэффициенты поправки на матричные эффекты путем измерения раствора из единичного элемента, известные коэффициенты можно ввести непосредственно в таблицу:

- ▶ После ввода **Специфицировать р-ры ИЕС** и **Помех.** установите флажок в поле **вручную**.
- ▶ Введите уже определенный коэффициент в столбец **Фактор ИЕС** .

3.2.5 Ввод параметров калибровки – окно Метод / Калибровка

В окне **Метод / Калибровка** задайте вид калибровки и коррекции бланка. Обычно для калибровки используются многоэлементные стандартные растворы, которые можно ввести как исходные растворы.

Окно Метод / Калибровка

Выбор метода калибровки

В списке **Режим калибр-ки** выберите метод:

Метод калибровки	Описание
Без калибр-ки	Результаты пробы отображаются исключительно как интенсивность. Для таких измерений калибровка не требуется.
Стандартн. калибр-ка	Калибровка осуществляется с пробами, которые содержат анализируемое вещество в известной концентрации (стандартные растворы). Пробы неизвестной концентрации измеряются по этому стандарту калибровки.
Метод добавок	К неизвестной пробе добавляются различные концентрации стандартного раствора, и затем эта смесь измеряется. Результатом уравнивания является концентрация аналита в пробе.
Метод доб. калибр-ки.	Калибровочная кривая, которая может быть использована для определения дальнейших концентраций, генерируется стандартной добавкой. Одновременно определяется концентрация первой пробы.

Настройка коррекции бланка

Метод стандартных добавок и добавочной калибровки требуют коррекции бланка. В списке **Корр. по холост.** выберите метод:

Коррекция	Описание
Корр. по интен-ти	При каждой стандартной добавке измеряется также бланк, и измеренное значение интенсивности вычитается из всех измеренных значений до расчета прямой выравнивания. Этот метод использовался долгое время, но приводит к некорректным результатам со многими реальными пробами.

Коррекция	Описание
Корр. по концентрации	При использовании раствора бланка сначала выполняется отдельная стандартная добавка с добавлением той же концентрации, что и для пробы. Полученная концентрация автоматически вычитается из всех остальных концентраций, определенных методом стандартной добавки (конц. 2).

Подготовка стандартов

Опция	Описание
вручную	Растворы калибровочных стандартов предоставляются вручную.
приг. самплером	Только при использовании автосамплера Cetac SDXHPLD с автоматической функцией разбавления Изготовление стандартных растворов осуществляется путем разбавления исходного раствора в вихревом смесителе автосамплера.

Специфические для линии параметры калибровки

Специфические для линии параметры выставляются в таблице:

Столбец таблицы	Описание
№	Последовательность выбранных линий в таблице
Линия	Наименование аналитической линии
Калибр. функ.	Только для калибровки по стандартной технологии линейн. Линейный ход функции калибровки $y = a + bx$ нелинейн. отнош. Нелинейный ход функции калибровки, описанный дробно-рациональной функцией $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$ нелинейн. квадр. Нелинейный ход функции калибровки, описанный квадратической функцией $y = a + bx + cx^2$ автоматич. Для калибровки рассчитываются соответственно линейная и нелинейная функции. Суммы квадратов остатка сравниваются (тест Манделя). Если сумма для нелинейной функции значительно меньше, чем для линейной, то выбирается нелинейный ход калибровочной кривой, в противном случае – линейный ход калибровочной кривой. Нелинейная функция выбирается в окне Опции / Пост-ть анализ . По умолчанию здесь установлена дробно-рациональная функция. Примечание: Для метода стандартной добавки и добавочной калибровки допустимы только линейные траектории кривой.
Пересечение	Уст. нуля Калибровочная кривая проходит точно через измеренную нулевую точку. Вычисл. Нулевое значение включено в расчет, как и любая другая точка калибровки.

Столбец таблицы	Описание
Навеска	<p>нет Все калибровочные точки учитываются одинаково.</p> <p>1/конец Калибровочные точки, имеющие более низкие концентрации, учитываются в большей степени.</p> <p>1/CO Точки с меньшим отклонением в пределах нескольких повторных измерений стандартного раствора принимаются в расчет в большей степени (необходимое условие: активирована опция статистики среднего значения).</p> <p>1/(CO*конец) Сочетание методов расчета 1/конец и 1/CO</p>
Контроль	<p>ASpect PQ позволяет проводить автоматическую проверку полученных калибровочных кривых посредством прогнозируемого диапазона, который вычисляется на основе выбранной вручную статистической достоверности.</p> <p>нет Для расчета кривой используются все измеренные и не удаленные калибровочные точки. Калибровочные точки никак не отмечаются и не удаляются.</p> <p>Удал. выбросы Если калибровочные точки находятся за пределами полученного прогнозируемого диапазона, выбросы будут устранены путем F-теста (проверить, приводит ли игнорирование точки к значительному улучшению остаточного рассеяния):</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ F-тест выполняется с точкой калибровки, которая находится дальше всего за пределом прогнозируемого диапазона. Если исключение этой точки не ведет к существенному улучшению остаточного рассеяния, точка будет включена и дальнейшая оптимизация калибровочной кривой больше не выполняется. ■ Если исключение этой точки ведет к существенному улучшению, эта точка калибровки будет определена как выброс (обозначена в таблице значком «!», а на графике обозначена красным цветом), и калибровка пересчитывается без этой точки. ■ Затем для калибровочной точки с самым большим отклонением от прогнозируемого диапазона выполняется другой F-тест. Эта процедура повторяется до тех пор, пока не будут устранены все выбросы. ■ Все калибровочные точки, лежащие за пределами прогнозируемого диапазона, которые не могут быть устранены как выбросы, отмечаются в таблице знаком «?» в таблице и синим цветом на графике.
Един.	Отдельный ввод единиц измерения концентрации для каждого элемента.

При щелчке по значку  значение активной ячейки будет применено ко всем последующим ячейкам в столбце таблицы. Кнопка **[Таблица калибр-ки]** открывает таблицу ввода стандартной концентрации.

См. также

 Опции для процесса анализа  136]

3.2.5.1 Установка параметров маточных стандартных растворов

Если вы используете маточные стандартные растворы, то вместо концентраций можно вводить коэффициенты разбавления для отдельных стандартных растворов. Для этого нужно установить параметры маточных стандартных растворов до заполнения таблицы калибровки, при этом можно использовать несколько исходных растворов с различными элементами и концентрациями.

- ▶ В окне **Метод / Калибровка** выберите **[Исходные]**.
Откроется окно **Исходн. стандарт**.
- ▶ Вставьте новую строку в список исходных растворов, нажав кнопку **[Нов.]** или **[Вставка]**.
Макс. число маточных стандартных растворов: 20
- ▶ Для опции **Из исходн. базы данн.** выберите из списка наименование исходного раствора. Управление базой данных исходных растворов осуществляется в окне **Данные / Исходн. std./Пробы КК**.
- ▶ Если исходный раствор из базы данных не используется, выберите опцию **Ручной ввод**.
- ▶ Перейдите в окно **Исходн. стандарт** и введите данные исходного раствора непосредственно в таблицу:

Столбец таблицы	Описание
Имя	Имя стандартного раствора
Элементы и концентрации	Элементы соответствующих концентраций стандартного раствора При нажатии кнопки [Концентрации] откроется список для ввода концентраций. Или можно ввести значения в следующем формате непосредственно в строку <i>Символ элемента-пробел-концентрация</i> , например, никель с концентрацией 0,5 мг/л: Ni 0.5 Другие элементы и их концентрации просто добавляются через точку с запятой. Пример формата ввода приведен внизу базового списка.
Един.	Единицы концентрации элементов в стандартном растворе.

См. также

- 📖 Управление базами данных для исходных растворов и проб КК [▶ 130]

3.2.5.2 Ввод таблицы калибровки

Данные стандартных растворов вводятся в таблицу калибровки.

Окно Таблица калибр-ки

Таблица калибр-ки

Кол-во стандартов: 1

Стандарты для кал. нуля: 5

Назв.	Един.	Кал-ноль1	Кал-Станд.1	Кал-Станд.2	Кал-Станд.3	Кал-Станд.4	Кал-Станд.5
Поз.		101	102	103	104	105	106
Исходн.							
Факт.разб.							
Recal.							
Al396.152	µg/L	0	1	5	10	50	200
As188.979	µg/L	0	1	5	10	50	
As193.698	µg/L	0	1	5	10	50	
Cd214.441	µg/L	0	1	5	10	50	
Cd226.502	µg/L	0	1	5	10	50	
Cr267.716	µg/L	0	1	5	10	50	
Cu324.754	µg/L	0	1	5	10	50	200
Fe259.940	µg/L	0	1	5	10	50	200

Сместить выбранн. столбец

inc.

OK

- ▶ В окне **Метод / Калибровка** выберите [**Таблица калибр-ки**].
- ▶ Сначала укажите в полях ввода число стандартных растворов. В зависимости от выбранного метода калибровки выбираются различные стандартные растворы.

Для стандартной технологии вводятся число **Кал. стандарты** и **Стандарты для кал. нуля**. При этом можно ввести несколько **Стандарты для кал. нуля**, например, если анализируемые элементы присутствуют в разных растворителях. В этом случае концентрация для соответствующих элементных линий устанавливается на «0», остальные столбцы остаются пустыми.

Для **Метод добавок** и **Метод доб. калибр-ки** вводится соответственно число **Доб. стандарты**.

- ▶ Для изготовления стандартных растворов через подключенную систему разбавления необходимо для каждого калибровочного стандарта в строке **Исходн.** выбрать используемый маточный стандартный раствор, а в строке **Факт.разб.** – коэффициенты разбавления.
Для разбавления можно выбрать следующие коэффициенты: 1, 2, 5, 10, 15, 20, 25, 50, 75, 100, 200, 250, 500, 1000, 1500, 2000, 2500, 5000. Число коэффициентов разбавления ограничивается согласно настройкам диапазона в окне **Автосамплер / Разбавление**. Для коэффициентов разбавления 1 ... 100 разбавление осуществляется в один этап, для более высоких значений – в два этапа.
- ▶ При изготовлении калибровочных стандартных растворов вручную их концентрации также можно рассчитать, выбрав маточный стандартный раствор и введя коэффициент разбавления.
Или введите для каждого стандартного раствора в таблице концентрацию отдельных элементов для каждой аналитической линии.
- ▶ Для стандартных растворов, изготавливаемых вручную, в строке **Поз.** можно задать позицию стандартного раствора в автосамплере.
Если автосамплер не используется, записи в этой строке не учитываются.
Для автосамплера с функцией разбавления применяется позиция исходного

раствора из базы данных исходных растворов.
 Распределение позиций автосамплера можно ввести и изменить в последовательности.

- ▶ Для рекалибровок, которые специфицированы как действие последовательности или как ряд КК-действий, необходимо выбрать как минимум **Стандарты для кал. нуля** и **Кал. стандарты** или не менее двух **Кал. стандарты** в строке **Рекал.** . Если для одной линии выбрано более двух стандартов повторной калибровки, используется соответственно самый низкий и самый высокий стандарт повторной калибровки.

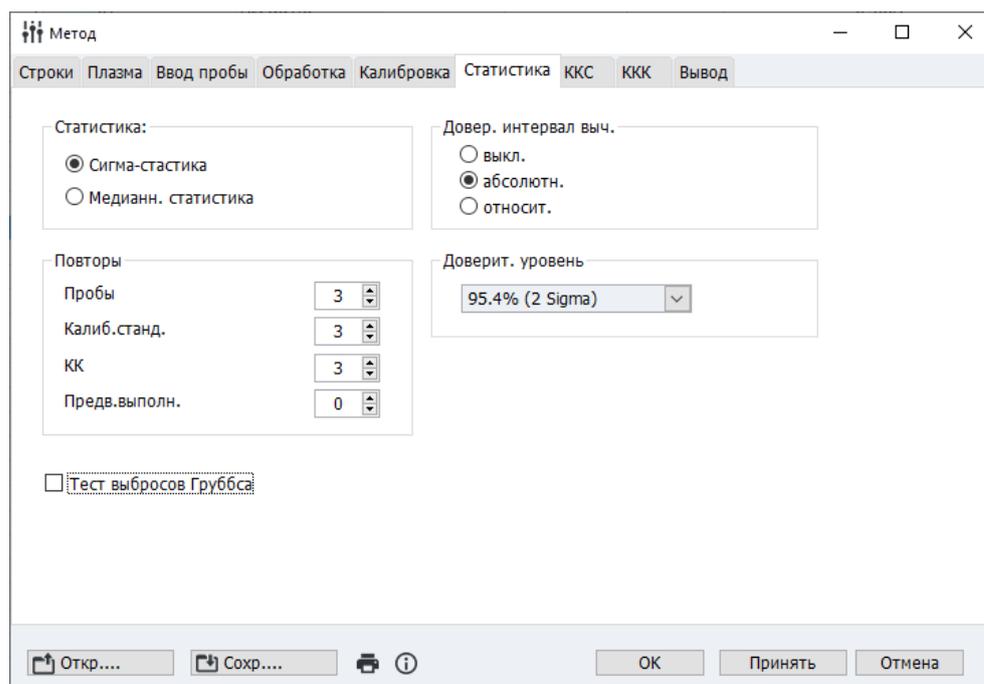
См. также

- 📖 Установка параметров маточных стандартных растворов [▶ 42]
- 📖 Функция разбавления [▶ 114]

3.2.6 Установка параметров статистических оценок – окно **Метод / Статистика**

В окне **Метод / Статистика** выберите статистический метод, который будет использоваться для калибровки и для измерения пробы. Настройки не зависят от выбранного метода калибровки и сохраняются при каждом изменении метода.

Окно **Метод / Статистика**



Тип статистики

Опция	Описание
Сигма-статистика	Расчет среднего значения и стандартного отклонения. Статистика ошибок согласно среднему арифметическому: проба измеряется несколько раз после холостых циклов. Среднее арифметическое, среднеквадратическое и относительное среднеквадратическое отклонения рассчитываются по результатам измерения.
Медианн. статистика	Расчет медианы и диапазона (R). Статистика ошибок согласно медианному методу: проба измеряется несколько раз после пустых измерений, измеренные значения сортируются по величине. Отображенное значение медианы это:

Опция	Описание
	<ul style="list-style-type: none"> Значение из середины списка сортировки, если число циклов измерений нечетное. Значение среднего из двух измеренных значений в середине отсортированного списка, если число циклов измерения четное. <p>Так как наименьшее и наибольшее отдельные измеренные значения не влияют на результат измерения, медианная статистика подходит для устранения выбросов.</p>

Количество повторов измерений

Опция	Описание
Пробы	Количество повторов измерений для каждой пробы
Калиб.станд.	Количество повторов измерений для калибровочной пробы
КК	Число повторов измерений для измерения КК
Предв.выполн.	Число повторов пустых измерений
	Пустые измерения – это измерения с пробой, предшествующие началу статистической серии и не учитывающиеся при расчете результатов измерения.

Тест выбросов Граббса

Для статистики среднего значения с как минимум тремя измерениями каждой пробы.

Статус	Описание
Деактивир.	Включение всех значений статистической серии в расчет среднего значения.
Активирован	Выбросы устраняются и исключаются из расчета статистических величин. Рассчитанные таким образом средние значения отмечаются значком в таблице результатов значком «!».

Расчет доверительного интервала

Вычисление доверительного интервала основано на выбранной статистической достоверности (см. ниже). Кроме ошибки при измерении пробы, доверительный интервал в основном включает в себя ошибку калибровки, так что значение выдается и при выключенной функции статистики.

Настройка	Описание
выкл.	Не вычислять доверительный интервал.
абсолютн.	Отображение доверительного интервала в абсолютных значениях (в единицах измерения концентрации)
относит.	Отображение доверительного интервала в относительных значениях (в процентах от значения концентрации)

Вероятность

Доверит. уровень (диапазон 68,3 ... 99,9%) используется для расчета доверительного интервала проб и прогнозируемого диапазона калибровочных кривых.

См. также

- Установка параметров проб для контроля качества для вкладок КК – окно Метод / ККС [► 46]

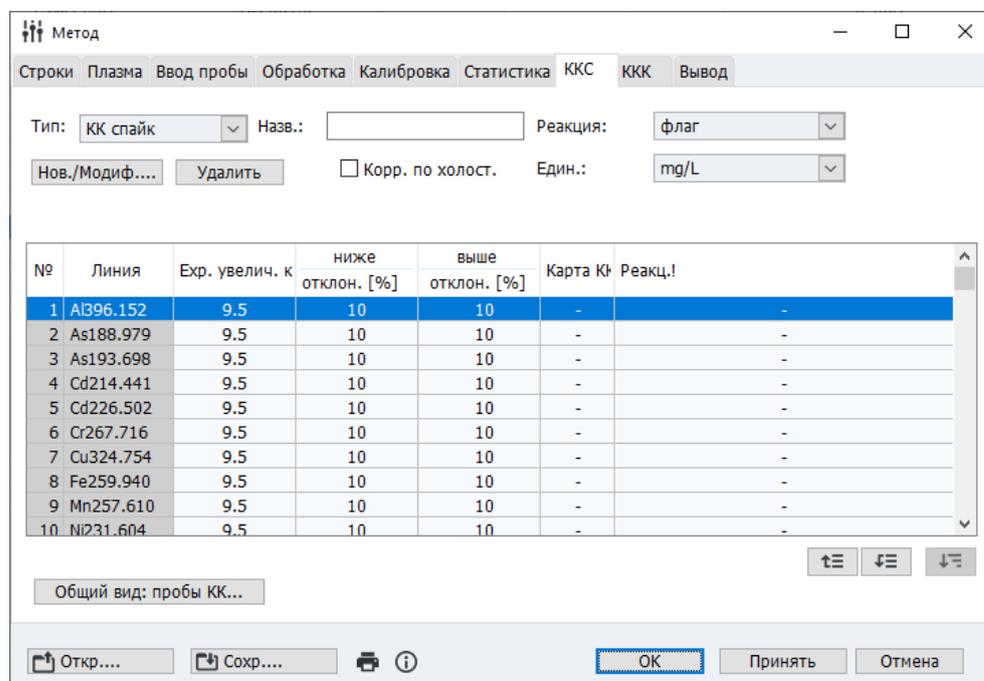
3.2.7 Установка параметров проб для контроля качества для вкладок КК – окно Метод / ККС

В окне **Метод / ККС** задайте параметры проб для контроля качества для вкладок КК. Система вкладок контроля качества используется для контроля качества в течение длительного периода времени. В процессе измерения контрольные измерения проводятся в заранее определенных точках с пробами, которые должны дать известные результаты измерения. При этом известны либо абсолютное значение (интенсивность или концентрация), либо разница концентраций с предыдущей пробой.

Результаты контрольных измерений автоматически записываются в так называемые вкладки КК (также вкладки с правилами или контрольные вкладки). Вкладки сохраняются в методе и выполняются для других измерений по этому методу.

В одном анализе можно задать различные пробы для контроля качества (КК). Указание концентраций этих проб и допусков производится в окне **Метод / ККС**.

Элементы вкладки ККС



Элементы	Описание
Тип	Выбор типа пробы КК, параметры которой (пределы погрешности и процедуры) отображаются в списке линий. В списке можно вызвать одну из согласованных проб КК для просмотра и редактирования.
Назв.	Имя отображенной пробы КК
Реакция	Процедура, которой необходимо следовать, если результаты пробы КК превышают или опускаются ниже установленных пределов погрешности.
[Нов./Модиф.]	Определение новой пробы КК или изменение существующей пробы КК.
[Удалить]	Удаление отображенной пробы КК.
Един.	Указание единицы концентрации
[Общий вид: пробы КК]	Открытие списка со специфическими для линии параметрами всех проб КК.

Элементы	Описание
Таблица	В таблице отображаются параметры пробы КК, выбранной в поле списка Тип.

Ввод проб КК

- ▶ С помощью кнопки **[Нов./Модиф.]** создайте новый набор параметров для типа пробы КК или измените отображаемый в данный момент набор параметров. Откроется окно **Доб./модиф. тип пробы КК**.
- ▶ В списке **Тип** выберите тип пробы и, если указываете несколько проб КК одного типа, присвойте номер в поле списка рядом с ним (например, «**КК станд. 2**»). В распоряжении есть следующие типы проб:

Опция	Описание
КК проба	<p>Определение пробы как пробы КК.</p> <p>Концентрации пробы КК можно либо загрузить из базы данных, либо ввести их.</p> <p>Чтобы вызвать из базы данных сохраненную запись для пробы КК, активируйте опцию из базы данных и выберите в находящемся рядом поле списка соответствующую пробу КК</p> <p>Или можно ввести концентрации пробы КК непосредственно в таблицу в окне Метод / ККС. В этом случае необходимо активировать опцию ввести вручную.</p> <p>Макс. количество проб КК: 50</p>
КК станд.	<p>Определение стандартного раствора как пробы КК.</p> <p>В качестве стандартного раствора КК можно использовать любой стандартный раствор, указанный в калибровочной таблице (окно Метод / Калибровка). Позиции автосамплера применяются из Таблица калибр-ки.</p> <p>Присвоенный номер также одновременно определяет используемый стандарт калибровки, например, «КК станд. 2» – в качестве пробы КК используется второй калибровочный стандарт.</p> <p>Возм. количество стандартов КК = количество стандартов в калибровочной таблице (макс. 65)</p>
КК холост.	Определение холостой пробы как пробы КК.
КК спайк	<p>Определение пробы с добавленным объемом как пробы КК.</p> <p>В случае обнаружения / увеличения проверяются результаты измерения определенной добавки концентрации к одной или нескольким пробам. Для этого проба КК должна быть определена после любой пробы в таблице проб (базовая проба КК = проба + увеличение с раствором известной концентрации). После измерения разность концентраций (конц1 пробы и проба исходного раствора КК) сравнивается с «ожидаемым повышением концентрации», указанным здесь, и рассчитывается скорость обнаружения.</p>

При отсутствии сертифицированных контрольных проб, контроль качества также можно выполнить с помощью дублирующих определений:

Опция	Описание
КК тренд	Измеренное значение концентрации сохраняется при первом появлении контрольной пробы в процессе анализа. При следующем появлении образует-ся и оценивается разница концентраций. Измерение этих контрольных проб рекомендуется выполнять в начале и в конце серии проб.
КК матрица	Перед подготовкой пробы анализируемая проба разделяется. Обе части проходят отдельно через все этапы подготовки и помещаются на автосамплер отдельно в виде тренда КК и матрицы КК. Выполняется оценка разницы между концентрациями.

Процедура при превышении пределов погрешности

- ▶ В списке **Реакция** выберите следующую процедуру при превышении предела погрешности.

Для КК проба , КК станд. и КК спайк:

Опция	Описание
флаг	Измеренное значение отмечается в таблице проб, программа измерений продолжается со следующей пробой.
рекал. + продолж.	Выполняется рекалибровка. После этого выполняется повторное измерение пробы КК. Если проба КК теперь находится в пределах диапазона, измерение продолжается со следующей пробой, в противном случае программа измерения прерывается.
кал. + продолж.	Выполняется новая калибровка. После этого выполняется повторное измерение пробы КК. Если проба КК теперь находится в пределах диапазона, измерение продолжается со следующей пробой, в противном случае программа измерения прерывается.
рекал. + новое выполн.	Выполняется рекалибровка. После этого выполняется повторное измерение пробы КК. Если проба КК находится за пределами диапазона, программа измерения прерывается. Если она находится в пределах диапазона, все пробы измеряются снова после последней пробы КК или после последней (ре)калибровки. Если в этом случае проба КК снова выходит за пределы погрешности, выполнение программы измерений прерывается.
кал. + новое выполн.	Выполняется новая калибровка. После этого выполняется повторное измерение пробы КК. Если проба КК находится за пределами диапазона, программа измерения прерывается. Если она находится в пределах диапазона, все пробы измеряются снова после последней пробы КК или после последней (ре)калибровки. Если в этом случае проба КК снова выходит за пределы погрешности, выполнение программы измерений прерывается.
след. метод	Текущая программа измерений прерывается, и запускается программа измерений следующего метода (если последовательность содержит дополнительный метод).
Стоп	Текущая программа измерений прерывается.

Для КК холост. на выбор доступны следующие реакции:

- **флаг**
- **след. метод**
- **Стоп**

Для КК спайк на выбор доступны следующие реакции:

- **флаг**
- **рекал. + продолж.**
- **кал. + продолж.**
- **след. метод**
- **Стоп**

Для **КК тренд** и **КК матрица** реакции не предусмотрено.

Активация коррекции бланка

- ▶ Для **КК тренд** и **КК матрица** опционально предусмотрена коррекция бланка. Для этой цели установите флажок в поле **Холост.**

Установка зависимых от линии параметров

- ▶ В зависимости от типа пробы КК в таблице для каждой элементной линии указываются специфические для нее параметры:

Опция	Описание
Линия	Имя элементной линии
Ехр. конц.	Для КК проба и КК станд. Ожидаемая концентрация в КК проба

Опция	Описание
Ехр. увелич. конц.	Для КК спайк Ожидаемое повышение концентрации от пробы до пробы с добавленным объемом Ввод значения, соответствующего добавленному объему и концентрации спайк-раствора.
Ехр. интенс.	Для КК холост. Ожидаемая интенсивность в значении бланка КК.
нижн. пред.	Нижняя область предела погрешности в процентах
верх. пред.	Верхняя область предела погрешности в процентах.
Карта КК	Если отмечено значком "+", результат контроля качества для этой строки будет представлен во вкладке КК списка результатов.
Реакц.	Если предел погрешности превышен, будет применена выбранная процедура из списка Реакция. Если значком "+" отмечено несколько линий, то для срабатывания реакции (логики ИЛИ) достаточно превышения предела погрешности для одной из этих линий.
Един.	Для КК станд. Единица ожидаемой концентрации

См. также

 Управление базами данных для исходных растворов и проб КК [[▶ 130](#)]

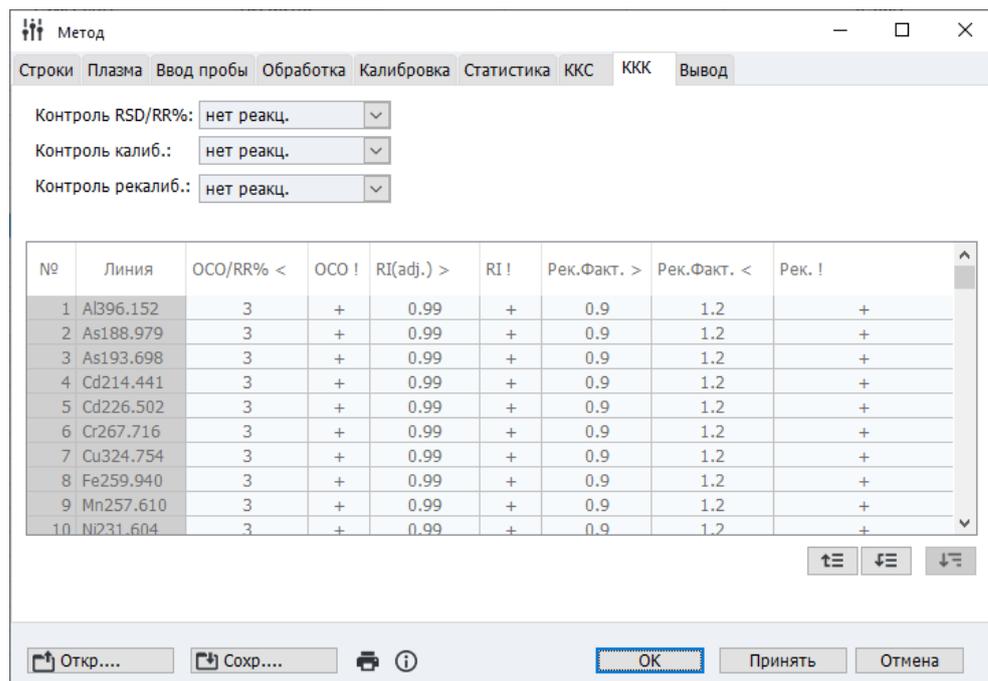
3.2.8 Установка параметров контроля качества в последовательности – окно **Метод / ККК**

В окне **Метод / ККК** задаются параметры контроля качества при выполнении последовательности:

- Относительное стандартное отклонение (статистика среднего значения) или относительный диапазон (медианная статистика)
- Контроль калибровки и контроль рекалибровки
- Процедура при превышении пределов погрешности

Одновременно с различными реакциями можно выбрать различные варианты контроля.

Окно Метод / ККК



Варианты контроля качества

Контрольный тип	Описание
Контроль RSD/RR%	Контроль относительного стандартного отклонения или относительного диапазона
Контроль калиб.	Контроль меры определенности калибровки
Контроль рекалиб.	Проверка фактора рекалибровки

Действия при превышении пределов погрешности

Реакция	Описание
нет	Соответствующая проверка не проводится.
флаг	При превышении пределов погрешности отметить соответствующую пробу, калибровку или рекалибровку в таблице проб.
повтор + продолж.	Только контроль RSD/RR% При превышении серийного предела точности повторяет измерение соответствующей пробы до измерения следующей пробы.
кал. + продолж.	Только для контроля калибровки и контроля рекалибровки При превышении пределов погрешности калибровки или коэффициента рекалибровки выполнение новой калибровки, а затем продолжение измерения со следующей пробой.
след. метод	Только для контроля калибровки и контроля рекалибровки Текущая программа измерений прерывается, и запускается программа измерений следующего метода (если последовательность содержит дополнительный метод).
Стоп	Только для контроля калибровки и контроля рекалибровки При превышении пределов погрешности остановка измерения выполняемого в данный момент метода.

Специфические параметры линии для контроля качества

В таблицу вводятся специфические параметры для линии различных видов контроля качества. Для любой анализируемой линии указывается, будет ли она подвергнута процедуре контроля. Если одна или несколько контролируемых линий превышают пределы погрешности, выполняется указанное выше действие.

Контроль качества (КК)	Параметр / значение
Контроль RSD/RR%	<p>ОСО/RR% < Если относительные стандартные отклонения или диапазоны больше или равны введенному значению, применяется согласованная процедура.</p> <p>ОСО ! Если линии отмечены значком «+», будет выполнен контроль RSD% или RR%.</p>
Контроль калиб.	<p>RI(настр.) Коэффициент определения регрессии RI(настр.) должен быть больше введенного значения или равен ему. В противном случае система будет отвечать согласно выбранному действию.</p> <p>RI ! Если линии отмечены значком «+», будет выполнен контроль RI(настр.) .</p>
Контроль рекалиб.	<p>Рек.Факт. > Верхний предел коэффициента рекалибровки</p> <p>Рек.Факт. <Нижний предел коэффициента рекалибровки. Если коэффициенты калибровки находятся за пределами установленных диапазонов, будет выполнено соответствующее действие.</p> <p>Рек. ! Если линии отмечены значком «+», будет проверен коэффициент рекалибровки.</p>

См. также

 Установка параметров статистических оценок – окно Метод / Статистика [▶ 44]

3.2.9 Установка параметров форматов вывода данных для результатов – окно Метод / Вывод

В окне **Метод / Вывод** задается количество десятичных разрядов, с которыми результаты будут представлены на экране и при распечатке, дополнительные виды вывода, а также порядок линий при анализе нескольких элементов в распечатке.

В таблице отдельно для каждого элемента определяется количество десятичных разрядов для вывода и печати интенсивности и значений концентрации и порядок вывода при печати.

Элементы в окне Метод / Вывод

№	Линия	десятич. разряд Интенс.	Дес. раз. Конц.	десятич. разряд Конц.	100% норм.	Оксид-фактор	Порядок печати
1	Al396.152	9	4	4	-		3
2	As188.979	9	4	4	-		4
3	As193.698	9	4	4	-		5
4	Cd214.441	9	4	4	-		7
5	Cd226.502	9	4	4	-		8
6	Cr267.716	9	4	4	-		9
7	Cu324.754	9	4	4	-		10
8	Fe259.940	9	4	4	-		13
9	Mn257.610	9	4	4	-		19
10	Ni231.604	9	4	4	-		21

Элементы	Описание
Десятич. разрядов / (Интенс.)	Количество значащих разрядов значений интенсивности
Дес. раз. / Конц.	Количество разрядов после запятой в значениях концентрации
Десятич. разрядов / Конц.	Количество значащих разрядов значений концентрации
100% норм.	Концентрация вывода (Конц. 2) переводится в процентное содержание, соотнесенное с общей концентрацией. Общая концентрация – это сумма концентраций линий, отмеченных знаком «+».
Оксид-фактор	Если выбран оксид, концентрация вывода (Конц. 2) переводится в концентрацию/ содержание оксида. Коэффициент оксида указывается в скобках, например, Ti переводится путем умножения на 1.6681 в TiO ₂ .
Порядок печати	Последовательность, в которой линии отображаются в отчете.

4 Последовательности

Последовательность содержит пробы и действия в том порядке, в котором они должны быть выполнены в рамках измерения. Она основана на загруженном методе, который содержит информацию о типе калибровки, статистических анализах, контроле качества и т.д. Некоторые данные для описания проб, такие как наименование пробы и позиция на штативе для проб, также можно ввести непосредственным образом. Эти данные сохраняются вместе с последовательностью.

4.1 Создание, сохранение и открытие последовательностей

Также как и методы, последовательности сохраняются в общей базе данных. При сохранении и открытии последовательностей используется окно базы данных.

Окно базы данных для последовательностей

Назв.	Верс.	Дата	Время	Кат.	Оператор
multi_element_ground	1	09.06.2020	7:45	GR	User
Test_sequence	2	03.11.2020	9:29	Admin	
USP 232/233	1	09.06.2020	14:48	Analytik Jena	

Создание новой последовательности

- ▶ Чтобы открыть окно **Пос-ть**, щелкните в строке символов по значку . Или можно выбрать пункты меню **Файл | Новая послед-ть** или **Разраб. метода | Пос-ть**.
- ▶ Выполните настройки.
- ▶ Нажмите кнопку **[Принять]**, чтобы активировать последовательность для следующего измерения, или сохраните последовательность.

Сохранение последовательности

- ▶ В окне **Пос-ть** нажмите кнопку **[Сохранить]**. Или выберите пункт меню **Файл | Сохранить | Пос-ть**.
- ▶ В окне базы данных в поле **Назв.** введите имя последовательности.
- ▶ В поле **Кат.** (категория), можно опционально ввести дополнительный идентификатор, состоящий из трех символов, чтобы в дальнейшем упростить поиск последовательности в базе данных.
- ▶ В поле **Описание** можно опционально ввести информацию о последовательности.
- ▶ Сохраните последовательность, нажав кнопку **[Сохранить]**.

- ✓ Последовательность сохранится в базе данных. При использовании названия существующей последовательности эта последовательность не перезаписывается, а создается новая версия в базе данных.

Открытие последовательности

- ▶ Откройте окно базы данных. Это можно сделать следующими способами:
 - На панели инструментов щелкните по значку  рядом с полем **Посл..**
 - Выберите пункт меню **Файл | Открыть пос-ть**.
 - В окне нажмите кнопку **Пос-ть [Откр.]**.
- ▶ Выберите требуемую последовательность из списка.
- ▶ В поле **Кат.** можно установить отображение только последовательностей одной из указанных категорий. Если нужно видеть последовательности из всех категорий, удалите запись в поле **Кат..**
- ▶ Установите флажок в поле **Только текущ. версия**, если при наличии одноименных последовательностей нужно отобразить только последовательность с наибольшим номером версии.
- ▶ с помощью кнопки **[OK]**.

См. также

- 📖 Управление методами и последовательностями [▶ 123]

4.2 Диалоговые функции в окне Послед-ть

При щелчке по значку  откроется окно **Послед-ть**.

Окно Послед-ть

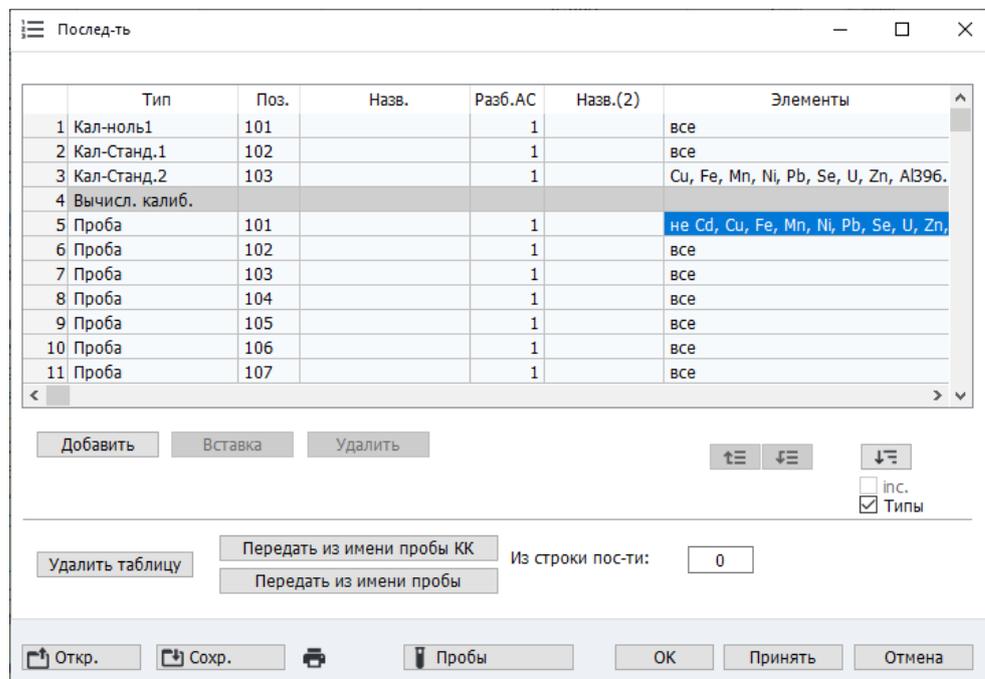


Таблица проб и последовательностей действий

В таблице отображаются выбранные последовательности проб и действий в порядке их отработки. Отображаются следующие данные:

Столбец таблицы	Значение
Тип	Тип пробы или шаг анализа
Поз.	Позиция пробы на автосамплере (если используется)
Назв.	Имя пробы Ввод является опциональным. Для калибровочных проб и проб КК имя пробы принимается из метода, если оно там было указано. Для анализируемых проб и проб КК можно перенести наименования из файла информации о пробах.
Назв. (2)	Дополнительное обозначение для идентификации пробы (опция).
Элементы	Выбор элементов, анализ которых проводится в пробе, или для которых выполняются специальные действия. <ul style="list-style-type: none"> ■ нет Текущий выбор удаляется. ■ все Определяются все заданные в методе элементы (настройка по умолчанию). ■ Значок элемента Определяются только указанные элементы, например, Cu (медь), Pb (свинец). ■ Элементная линия (значок + длина волны) Определяются только указанные линии элементов, например, Mn 257.610, Ca 315.887. ■ не Значок элемента или линия элемента Указанные элементы или линии элемента не определяются, например, не Cu, Pb, не Mn 257.610, Ca 315.887

Экранные кнопки

Экранные кнопки позволяют добавлять в список последовательностей пробы и действия и удалять их из списка или применять существующие данные с информацией о пробах.

Экранная кнопка	Значение
[Добавить]	Добавление новой строки в конец списка и открытие окна Ред. послед-ть .
[Вставка]	Вставка новой строки в позицию над выделенной позицией списка.
[Удалить]	Удалить выделенные линии.
[Удалить таблицу]	Удаление всего списка последовательностей.
[Передать из имени пробы КК]	Перенос информации о наименованиях проб КК и их позиции в автосамплере из окна Пробы / Информ. о пробе КК . Информация из таблицы ID проб КК заносится в таблицу последовательностей. Первая строка с новым идентификатором пробы задается в поле Из строки пос-ти .
[Передать из имени пробы]	Перенос информации о наименованиях проб, их позиции в автосамплере и анализируемых элементах из окна Пробы . Информация из таблицы ID проб заносится в таблицу последовательностей. Первая строка с новым идентификатором пробы задается в поле Пробы .
[Пробы]	Открывает окно Имя пробы .

См. также

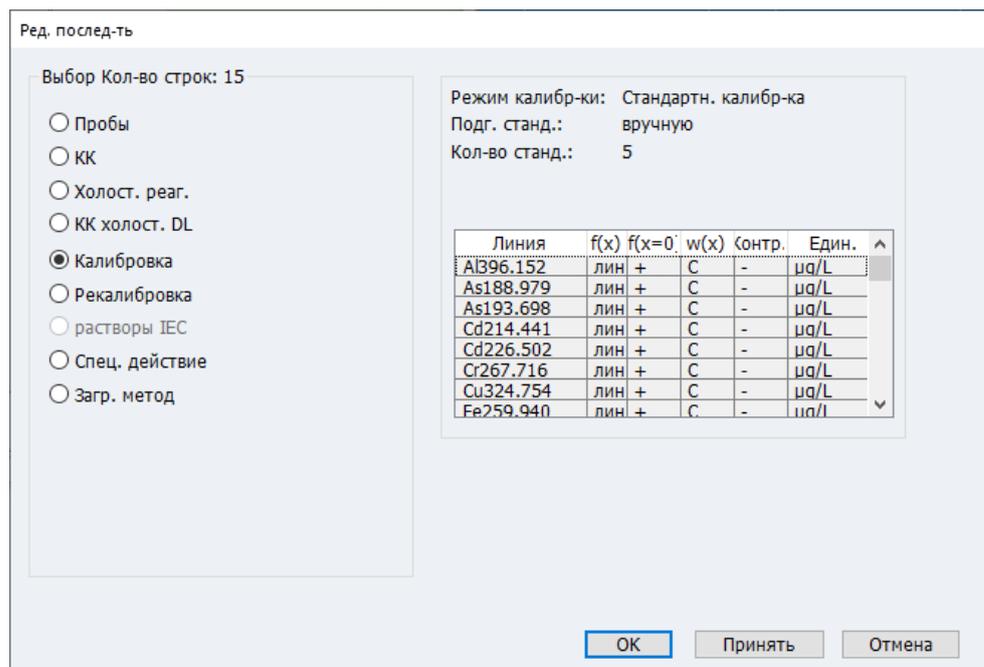
📖 Наиболее часто используемые элементы управления [▶ 14]

📄 Выбор элементов/линий для анализа проб/действия [▶ 59]

4.3 Объединение проб и порядка действий для последовательности

- ▶ Загрузите или создайте метод.
- ▶ Откройте окно **Послед-ть** щелчком по значку ☰.
- ▶ Нажмите кнопку **[Добавить]**. Откроется окно **Ред. послед-ть**.

Окно Последовательность с выбором калибровки



- ▶ Выберите поочередно опцию проб и действий и перенесите их в список последовательностей, нажав кнопку **[Принять]** :

Проба/действие	Описание
Пробы	Измерение количества проб, введенного в поле Число .
Пробы КК	Измерение пробы КК и ее оценка в соответствии со спецификацией в методе. Выберите из списка одну из проб КК, указанных в окне Метод. Параметры пробы КК отображаются в расположенном рядом поле.
Холост. реаг.	Измерение бланка.
КК холост. DL	Измерение бланка с помощью метода значений бланка для определения пределов детектирования и количественного определения.
Калибровка	Измерение калибровочных проб и выполнение калибровки в соответствии со спецификацией метода.
Рекалибровка	Измерение калибровочной пробы, предназначенной для рекалибровки, и проведение рекалибровки.
растворы ИЕС	Только для коррекций пиков по методу поправки на межэлементное влияние (ИЕС) Измерение растворов для анализа с использованием метода поправки на межэлементное влияние.
Спец. действие	Выполнение действий, которые не влияют непосредственно на измерение проб.

Проба/действие	Описание
Загр. метод	Загрузка сохраненного метода, например, чтобы запустить другой анализ элемента в последовательности. Значок ••• позволяет открыть окно базы данных с сохраненными методами. Выберите один из сохраненных методов.

- ▶ После выбора последней пробы/действий последовательности примените их, нажав кнопку **[ОК]**, и вернитесь тем самым в окно **Послед-ть**.
- ▶ В качестве настройки по умолчанию анализируемых элементов выбрана таблица последовательностей для каждой пробы/действия, опция **все**. Щелчок по ячейке таблицы **Элементы** соответствующей пробы/действия позволяет изменить в окне эту настройку.
- ▶ При использовании автосамплера:
Задайте позицию (Поз.) проб в автосамплере. Позиции калибровочных и проб КК автоматически принимаются из метода. Однако здесь можно изменить позиции. Позиции, установленные в последовательности, всегда имеют приоритетное значение.



ПРИМЕЧАНИЕ

Лучше всего ввести данные анализируемых проб в окно **Имя пробы**, а затем перенести их в список последовательностей.

См. также

- 📖 Объединение проб и порядка действий для последовательности [▶ 56]
- 📖 Вставка специальных действий в последовательность [▶ 57]

4.4 Вставка специальных действий в последовательность

Специальные действия в последовательности – это действия, которые не влияют непосредственно на измерение. Специальные действия можно выбрать в окне **Ред. послед-ть**.

Доступные специальные действия в окне Ред. послед-ть

Ред. послед-ть

Выбор Кол-во строк: 15

- Пробы
- КК
- Холост. реэг.
- КК холост. DL
- Калибровка
- Рекалибровка
- растворы IЕС
- Спец. действие
- Загр. метод

Спец. действие

- Плазма выкл.
- Измер. темн. тока

- Время ожид.
- Пауза
- Звук. сигнал

- Повтор. **автом.**
- Пока: Циклы <

- Показ. калибр. диагр.
- Очистка системы

Действие	Описание
Погасить плазму	Гашение плазмы.
Измер. темн. тока	<p>Выполнение дополнительного измерения затемненности. При этом измерении темного тока сигнал определяется с закрытой заслонкой.</p> <p>Измерение затемненности всегда также производится автоматически, даже если оно не было добавлено в последовательность.</p>
Время ожид.	Указанное в поле время ожидания (в минутах), после завершения которого будет продолжен анализ. При использовании автосамплера канюля остается в позиции для промывки, продолжает всасываться промывочная жидкость.
Пауза	Остановка выполнения анализа. Затем последовательность можно будет продолжить, щелкнув по значку , или в пункте меню Процедура Продолжить .
Звук. сигнал	Генерация компьютером звукового сигнала, например, об окончании калибровки. (Требуется звуковая карта и динамики.)
Повтор. / Пока	<p>Указание цикла (повторения) в последовательности.</p> <p>Часть последовательности между стартовой точкой Повтор. и конечной точкой Пока будет повторяться до выполнения критерия отмены. В качестве условия отмены можно указать количество проходов петель или время в минутах.</p> <p>При измерении онлайн (в рамках дистанционного обслуживания) необходимо активировать опцию автом.. В ручном режиме это позволит предотвратить необходимость дозирования пробы.</p>
Показ. калибр. диагр.	Отображение калибровочной кривой во время выполнения последовательности. В этом случае измерение будет продолжено только после подтверждения калибровки кнопкой [OK] .
Очистка системы	Промывка путей подачи проб до горелки промывочным раствором на стандартном ходу. Ввод в поле ввода продолжительности промывки.

4.5 Выбор элементов/линий для анализа проб/действия

В последовательности в настройках по умолчанию активированы все элементы для анализа проб или выполнения действий. Если нужно исключить элементы для анализа пробы или действие, сделайте следующее:

- ▶ В окне **Послед-ть** щелкните по табличной ячейке соответствующей пробы или действия. Откроется окно **Выбрать элементы и линии**. По умолчанию активированы все установленные в методе элементы/линии. В списке **Элементы** все элементы выделены синим цветом.
- ▶ Чтобы полностью исключить элемент, щелчком по соответствующему элементу снимите выделение. Чтобы активировать элемент, снова щелкните по нему.
- ▶ Если в методе для элемента задано несколько линий, а вы хотите использовать только выбранные, выделите нужную линию щелчком мыши в списке **Линия**.
- ▶ Кнопки **[все]** и **[нет]** позволяют соответственно активировать все элементы для анализа/действия или полностью исключить все элементы.
- ▶ Опция **Не (обратить выбор)** позволяет исключить все выделенные элементы/линии из анализа/действия. При этом анализируются только невыделенные элементы/линии. Перед списком элементов/линий появляется слово «не».

В окне вывода приводятся все выбранные элементы/линии. Элементы/линии после возвращения в окно последовательности можно редактировать непосредственно в ячейке таблицы.

Окно Выбрать элементы и линии

Выбрать элементы и линии

Элементы	Строки
Al	Cd214.441
As	Cd226.502
Cd	Cr267.716
Cr	Cu324.754
Cu	Fe259.940
Fe	Mn257.610

Не (обратить выбор)

Show elements/lines of the currently loaded method

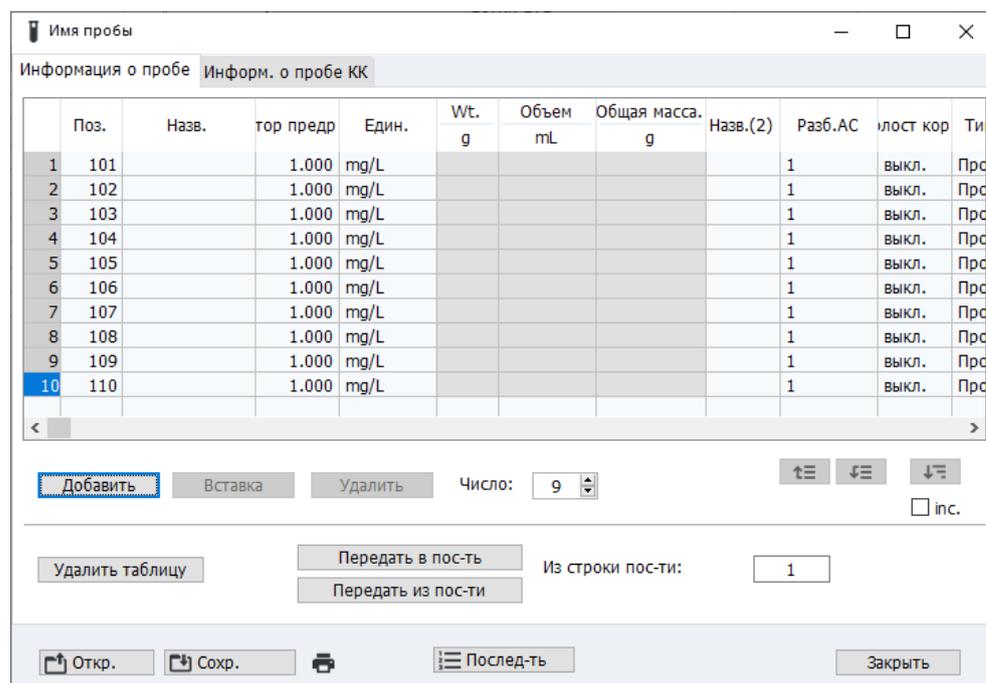
Al, Cu, As188.979, Cd226.502

Например: (1) Cu123.56, 55, Cu, Fe123.34 (2) не Fe (3) все

5 Данные с информацией о пробах (ID проб)

Данные с информацией о пробах (ID проб) содержат специальные данные для текущих анализируемых проб и контрольных проб, например, наименование пробы, позиция на автосамплере, масса, разбавление или единица концентрации. Наименования проб и позиции можно щелчком мыши переносить в таблицу последовательности. Данные с информацией о пробах сохраняются в таблице в формате CSV, их можно также редактировать в редакторе электронных таблиц, например, в Excel. Можно сделать и наоборот – импортировать созданные с помощью сторонних программ таблицы проб в ASpect PQ.

Открыть окно **Назв. пробы** мощно щелчком по  в строке символов.



5.1 Создание, сохранение и открытие данных с информацией о пробах

Создание новой записи ID пробы

- ▶ Чтобы открыть окно **Имя пробы**, щелкните в строке символов по значку . Или откройте окно **Имя пробы** командами меню **Разраб. метода | Имя пробы** или **Файл | Новый файл инф. о пробе**.
- ▶ Произведите настройки для проб и контрольных проб.
- ▶ Сохраните блок данных.

Сохранение ID пробы

- ▶ В окне **Имя пробы** нажмите кнопку **[Сохранить]**. Или выберите команду меню **Файл | Сохранить | Информация о пробе**. Откроется стандартное окно **Сохранить как**.
- ▶ В поле **Имя файла** введите наименование для информации о пробе.
- ▶ Сохраните информацию о пробе, нажав кнопку **[Сохранить]**.

Открытие файлов информации о пробе

- ▶ Откройте файл информации о пробе. Это можно сделать следующими способами:

- На панели инструментов щелкните по значку  рядом с полем **Пробы**.
 - Выберите пункт меню **Файл | Открыть файл инф. о пробе**.
 - В окне нажмите кнопку **Имя пробы [Откр.]**.
Откроется стандартное окно **Открыть**.
- Выберите нужный файл из списка и откройте его с помощью кнопки **Открыть**.

См. также

-  Настройка параметров информации о пробах [▶ 62]

5.2 Информация для проб – окно Имя пробы / Информация о пробе

Окно **Имя пробы / Информация о пробе** содержит список проб и их свойств.

Столбец таблицы	Описание
Поз.	Позиция пробы в дозаторе
Назв.	Наименование пробы Этот ввод является опциональным. Макс. кол-во символов: 20
Фактор предразб.	Для типа единицы жидк. и тверд. Коэффициент предварительного разбавления пробы – это коэффициент, с которым была разбавлена исходная проба перед ее помещением в автосамплер или ее подачей к плазме при работе без автосамплера. Коэффициент необходим для расчета концентрации исходной пробы (конц. 2).
Един.	Единица измерения концентрации пробы
Wt.	Навеска в граммах (только для типа единицы тверд.) Навеска исходной пробы, которая была растворена при подготовке пробы. Навеска необходима для расчета концентрации исходной пробы (конц.2).
Объем	Общий объем или объем заполнения в мл (только для типа единицы тверд.)
Общая масса.	Общая навеска пробы и растворителя в граммах (только для типа единицы жидк. грав. , например, для масел).
Назв.(2)	Следующее наименование пробы Ввод является опциональным. Макс. кол-во символов: 20
Холост корр.	Коррекция бланка (только для типа пробы Проба) выкл. Коррекция бланка не проводится. вкл. Для расчета концентрации исходной пробы вычитается последнее измеренное в последовательности значение бланка.
Тип пробы	Выбор между Проба и Холост .
Элементы	Анализируемые в пробе элементы или линии При щелчке по ячейке таблицы открывается окно Выбрать элементы и линии , в котором выполняются эти настройки.
Экранные кнопки	Описание
[Добавить]	Вставка количества новых строк в конце списка.
[Вставка]	Вставка количества новых строк перед отмеченной позицией списка.

Экранные кнопки	Описание
[Удалить]	Удаление выделенной строки.
Число	Поле ввода количества вставляемых строк.
[Удалить таблицу]	Удаление всего списка информации о пробах.
[Передать в пост-ть]	Перенос наименований проб, их позиций в автосамплере и анализируемых элементов в список последовательности. Первая строка в списке последовательности, начиная с которой необходимо перенести данные о пробах, задается в поле ввода Из строки пос-ти .
[Передать из пос-ти]	Перенос наименований проб, их позиций в автосамплере и анализируемых элементов в из списка последовательности в таблицу ID проб. Первая строка в списке последовательности, начиная с которой необходимо перенести данные о пробах, задается в поле ввода Из строки пос-ти .

См. также

-  Выбор элементов/линий для анализа проб/действия [▶ 59]
-  Установка единиц измерения [▶ 130]

5.3 Информация для контрольных проб – окно **Имя пробы / Информ. о пробе КК**

В окне **Имя пробы / Информ. о пробе КК** приведены контрольные пробы.

Таблица имеет структуру, аналогичную таблице во вкладке **Информация о пробе**. Дополнительно в столбце **Тип** содержится информация о типе КК. Столбец **Единица** не включается, так как единица измерения уже определена в методе. Коррекция бланка для контрольных проб задается в методе и отображается в столбце **Холост корр.** для информации (**вкл./выкл.**).

Кнопка **[Передать в пост-ть]** позволяет перенести данные в список последовательности.

См. также

-  Информация для проб – окно **Имя пробы / Информ. о пробе** [▶ 61]

5.4 Настройка параметров информации о пробах

- ▶ Щелкните по значку , чтобы открыть окно **Имя пробы**.
- ▶ В поле **Число** укажите количество подлежащих анализу проб. Затем нажмите кнопку **[Добавить]**, чтобы добавить соответствующие строки в список.
- ▶ Введите требуемую информацию в таблицу для каждой пробы.
 - Если записи в столбце совпадают, щелкнув по значку , можно скопировать запись выделенной ячейки во все последующие ячейки столбца.
 - При установке флажка в поле **inc.** (означает инкремент, приращение) при переносе информации в следующую ячейку значение каждый раз будет увеличиваться на 1. Таким образом, можно легко заполнить идущие подряд места в автосамплере или, например, по порядку пронумеровать имена проб.

- Тексты из текстовых полей можно скопировать в буфер обмена Windows и снова вставить при помощи пунктов меню **Ред. | Копия и Ред. | Вставка** или сочетанием клавиш [Strg+C] и [Strg+V]. Вы также можете выделить текст, после чего правой кнопкой мыши открыть контекстное меню для копирования и вставки.
- ▶ После ввода всех данных укажите в поле **Из строки пос-ти** строку в последовательности, начиная с которой информацию о пробе нужно перенести в последовательность. Перенесите данные, выбрав **[Передать в пос-ть]**.

6 Проведение анализа и расчет результатов

6.1 Обзор команд меню и кнопок для начала анализа в главном окне

Выполнение последовательности запускается значками на панели инструментов или через меню **Процедура** .

Значок	Пункт меню	Функция
	Процедура Вы-полн. пос-ть	Начать процесс анализа.
	Процедура Старт выдел. строки пос-ти... F6	Выполнить выделенную(ые) строку(и) в последовательности... С помощью кнопки мыши и нажатой клавиши Ctrl или клавиши переключения можно выделить несколько строк.
	Процедура Стоп	Остановить процесс анализа.
	Процедура Про-должить	Продолжение выполнения остановленной последовательности.

6.2 Розжиг и гашение плазмы

Розжиг плазмы

- ▶ Кнопкой питания включите ИСП-ОЭС.
- ▶ Кнопкой питания включите ПК и запустите операционную систему.
- ▶ Откройте подачу газа. Следите, чтобы давление на входе было 6 бар.
- ▶ Включите вытяжную установку.
- ▶ Кнопкой питания включите рециркуляционный охладитель.
- ▶ Убедитесь, что горелка находится в исходном положении. При этом наконечник инжектора должен находиться примерно на 1-2 мм ниже нижнего края индуктора.
- ▶ Закройте дверцу отсека для плазмы.
- ▶ Проверьте насосные трубки. Замените трубки, если они потеряли эластичность или имеют следы сильного износа.
- ▶ Натяните трубки насоса между стопорами в насосе на ИСП-ОЭС.

Уложите направляющие трубок поверх трубок и закрепите трубки фиксирующими рычагами. Убедитесь, что фиксирующие рычаги защелкнулись!

Внимание!

При этом проверьте направление нагнетания. Вал насоса вращается против часовой стрелки.

- ▶ Убедитесь, что в емкости достаточно промывочного раствора для проведения анализа.

Примечание:

Промывочный раствор должен иметь одинаковую с пробами и стандартами кислотность. Если не определено иное, используйте 2-процентную азотную кислоту.

- ▶ Проверьте уровень заполнения сливной бутылки. Слейте бутылку, если емкости недостаточно для анализа.

- ▶ Для работы без автосамплера погрузите трубку для всасывания пробы в промывочный раствор. Во время зажигания плазмы воздух не должен поступать внутрь.
- ▶ Запустите программу ASpect PQ.
- ▶ Если система длительное время не эксплуатировалась или была демонтирована камера распылителя, промойте камеру распылителя и горелку газом распылителя, чтобы удалить воздух из системы:
 - Щелкнув по значку , откройте окно **Плазма / Контроль** и выберите [**Продуть распылит. камеру**].
- ▶ Разожгите плазму.
 - Щелкнув по значку , откройте окно **Плазма / Контроль** и выберите [**Зажечь плазму**].
- ▶ Следует начальный этап, в котором горелка промывается аргоном и проверяются контуры безопасности ИСП-ОЭС. Начальный этап длится ок. 1 мин. Если все в порядке, разжигается плазма. Понаблюдайте, правильно ли формируется плазма – она должна конусообразно проходить над индуктором и сужаться кверху.
- ▶ Если формируется кольцевая плазма (плазма образуется только внутри индуктора) или слышен треск, нажмите красный выключатель плазмы на левой стороне устройства. Перед следующей попыткой розжига убедитесь, что трубка подачи пробы погружена в промывочный раствор, а подача газа и рециркуляционное охлаждение в норме.
 - ✓ Плазма зажигается, запускается перистальтический насос и система охлаждения детектора. ИСП-ОЭС будет готов к измерению через короткое время горения плазмы.



ПРИМЕЧАНИЕ

Перед розжигом плазмы посредством внутренних контуров безопасности проверяются поток газа, система охлаждения и вытяжки, а также контролируется, находится ли горелка в рабочем положении (зафиксирована в механизме регулировки по высоте) и закрыта ли дверца отсека для проб. При выявлении ошибки на одном из компонентов плазма не зажжется.

Гашение плазмы и выключение ИСП-ОЭС

- ▶ По окончании анализа в течение прибл. 3 мин. прокачайте через систему промывочный раствор, а затем еще 1 мин. – воду. После этого дайте устройству поработать всухую. Если трубки понадобится заменить, в них не будет кислоты.
- ▶ Погасите плазму в программе ASpect ICP щелчком по значку  на панели инструментов.
Или, щелкнув по значку , откройте окно **Плазма** и нажмите кнопку [**Погасить плазму**].
- ▶ Завершите работу программы ASpect PQ. Для этого выберите **Файл | Выход**.
- ▶ Квитируйте контрольный вопрос о выключении продувочного газа для детектора, нажав кнопку [**Да**], если вы хотите отключить продувочный газ. При остановке работы лишь на короткое время (до 30 мин.) или при работе в УФ-диапазоне не отключайте продувочный газ. Это сэкономит время в процессе розжига, пока детектор достаточно не очистится.
- ▶ Подождите, пока не появится сообщение о том, что устройство и систему охлаждения можно выключить.

- ▶ Выключите ИСП-ОЭС и при необходимости автосамплер соответствующим выключателем.
- ▶ Ослабьте трубки насоса на ИСП-ОЭС.
 - Ослабьте фиксирующие рычаги, чтобы направляющие трубок больше не давили на трубки.
 - Вытащите стопор трубок на одной стороне насоса из фиксатора.
- ▶ При использовании автосамплера ослабьте трубку насоса аналогичным образом, как для перистальтического насоса ИСП-ОЭС.
- ▶ После выключения устройства перекройте систему подачи газа.
- ▶ Кнопкой питания выключите рециркуляционный охладитель.
- ▶ Выключите вентиляционную установку.
- ▶ Завершите работу системы Windows и выключите компьютер.
 - ✓ Анализатор выключен.



ПРИМЕЧАНИЕ

Перед выключением ИСП-ОЭС дождитесь остывания!

Прежде, чем выключить устройство, нажав кнопку питания, после гашения плазмы подождите еще хотя бы 30 с.

См. также

- 📖 Запуск ASpect PQ [▶ 7]

6.3 Запуск анализа

После выбора метода, последовательности и, при необходимости, файлов информации о пробе, в распоряжении есть вся необходимая информация для начала процесса анализа.

Устройство должно быть подготовлено для проведения анализа:

- Плазма зажжена и горит в течение времени приработки, который необходим для метода.
- При использовании автосамплера: Пробы подготовлены и находятся на автосамплере.

Сохранение данных результатов во время проведения анализа

Результаты анализа сохраняются в базе данных непосредственно во время измерения по заданному по умолчанию пути или в самоопределяемых подпапках. При этом их можно по желанию сохранить в новой базе данных или добавить к существующей базе данных. Однако невозможно перезаписать базу данных результатов, выбрав одно и то же имя.

Окно Старт

При запуске процедуры измерения автоматически запрашивается цель результатов. Откроется окно **Старт** со следующими опциями для файла результатов:

Опция	
Назв.	Ввести имена файла для базы данных результатов. Нов. файл/список Если активировано, нужно ввести новое имя файла. Проверяется, существует ли уже такое имя файла. Существующие файлы не могут быть перезаписаны. Добавить к файлу/списку Новые результаты добавляются к существующему файлу результатов. Щелчок по значку ... открывает окно выбора, из списка которого можно выбрать существующий файл результатов.
Папка	Выбрать путь сохранения файла результатов.
Описание	Ввести дополнительный комментарий, который будет сохранен вместе с результатами анализа. Ввод является опциональным.
Погасить плазму при ошибке	Гашение плазмы при прерывании измерения в результате сообщения об ошибке.

Файл содержит результаты измерения и оценки, а также информацию об ID пробы. Кроме того, параметры метода сохраняются в базе данных результатов.

База данных результатов сохраняется с расширениями .tps (параметры метода, интенсивности и концентрации) и .sprk (исходные данные спектра).

Начало измерения

- ▶ Запустите процедуру измерения щелчком по значку  или с помощью пункта меню **Процедура | Выполн. пост-ть**.
- ▶ В окне **Старт** выберите имя файла результатов. Опционально можно сохранить результат в новом файле или добавить его в уже существующий файл. Перезаписать уже существующий файл невозможно. После выбора имени файла начинается процедура измерения в соответствии с настройками метода и последовательности.
- ▶ Если подача пробы осуществляется вручную без автосамплера, следуйте инструкциям по подготовке пробы на экране. При использовании автосамплера измерение выполняется автоматически.

Отображение в процессе анализа

Во время измерения результаты отображаются в реальном времени в главном окне. Ход измерения документируется в списке последовательностей в главном окне. Строки с последовательными действиями отмечены в столбце таблицы следующими символами

Значок	Значение
-	Еще не измерено / не отработано.
0	Измеряется в настоящий момент.
+	Уже измерено / не отработано.

Отображение окон результатов

Дополнительно в качестве опции вместе с текущим результатом можно показывать окна **Диagr. спектра**, **Диagr. сигнала**, **Бар-график**, **Окно отчета** и **Конц. пробы на кал.кривой**. Выбрать эти отображаемые окна можно в окне **Опции / Пос-ть анализов**. Окна результатов во время анализа можно показать или скрыть.

- ▶ Показать окна можно командой меню **Вид | Открыть окно рез-тов F7** или функциональной клавишей F7.
- ▶ Скрыть окна можно командой меню **Вид | Закр-ть окно рез-тов F8** или функциональной клавишей F8.
- ▶ Значок  позволяет открывать окна даже во время анализа.

Кнопки строки символов

Во время измерения в строке символов отображаются следующие кнопки:

Экранная кнопка	Описание
	Открывает окно Окна рез-тов , в котором отдельные окна результатов можно активировать независимо от записей в окне Опции / Пос-ть анализов . Активируйте опции окон результатов и активируйте окна щелчком по кнопке [Окна рез-тов] .
	Показать окно метода. Метод доступен только для чтения, но не для редактирования.
	Показать окно последовательности. Последовательность можно расширить в ходе текущего анализа. Окно последовательности содержит кнопку [Пробы] , которая позволяет открыть окно Имя пробы для дополнения данных о пробах.

См. также

- 📖 Опции для процесса анализа [▶ 136]

6.4 Прерывание и продолжение процесса анализа

Процесс анализа можно прервать, а затем снова продолжить.

- ▶ Пункт меню **Процедура | Стоп** или щелчок по значку  немедленно прерывает процесс анализа.
- ▶ Продолжить прерванную процедуру можно кнопкой **Процедура | Продолжить** или .

Откроется окно **Продолж. пос-ть**, в котором указан статус действия до прерывания процедуры.

При изменении метода активируйте опцию **Продолжить с измененн. методом**. В результате в файл результатов записывается новый метод, и сохраняется другая версия метода.

Измерение можно продолжить следующим образом:

Опция	Описание
Продолжить	Продолжение с текущей пробой, текущей линией и текущим статистическим измерением.
Перв. статистич. вып.	Продолжение с текущей пробой, текущей строкой и первым статистическим измерением.
Первый элемент	Продолжение с текущей пробой, первой строкой и первым статистическим измерением.
Из строки таблицы ->	Продолжение последовательности от близлежащей строки таблицы.

6.5 Повтор действий последовательности

Отдельные действия в последовательности можно повторить.

- ▶ В главном окне во вкладке **Послед-ть** или **Послед-ть/Рез-ты** выделите строку или строки с действием, которое нужно повторить.
Множественное выделение можно выполнить, выделив соответствующие строки мышью при нажатой кнопке Ctrl или Shift.
- ▶ Запустите процедуру измерения щелчком по значку или с помощью пункта меню **Процедура | Старт выдел. строки пос-ти... F6**.
- ▶ В окне **Старт** выберите имя файла, в который будет сохранен результат повторного измерения.
Опционально можно сохранить результат в новом файле или добавить его в уже существующий файл. Перезапись существующих результатов под тем же именем невозможна.
 - ✓ После этого запустится процедура повторения выбранного действия.



ПРИМЕЧАНИЕ

Если между тем в методе были произведены изменения, при повторе последовательности или отдельных строк будет использован измененный метод, который будет сохранен как новая версия с результатами.

6.6 Пересчет результатов анализа

Пересчет результатов анализа предназначен для того, чтобы изменения параметров анализа, таких как изменение калибровочной функции или метода в анализе вступили в силу. Изменение данных с информацией о пробах, таких как наименование пробы, коэффициенты разбавления также требует пересчета, чтобы учесть его при выводе результатов анализа.

Пересчитанные данные можно опционально добавить к текущему файлу результатов или сохранить их в новом файле. Изменение оригинальных данных невозможно. Если в файле результатов пересчет с различными параметрами повторяется несколько раз, при каждом пересчете система будет обращаться к исходным данным файла результатов.



Параметры ввода в окне
Пересчет результатов анализа

ПРИМЕЧАНИЕ

При каждом пересчете сохраняется новая версия метода.

Параметр/поле	Описание
Старт данных	Выбор входных данных Назв. Имя файла результатов, данные которого пересчитываются Модифицир. информ. о пробе Активируется, если данные в файле информации о пробе, например, коэффициент разбавления, были изменены Обновление диагр. рез-тов Окна результатов, например, Показать спектр , обновляются, как при измерении. Примечание: В результате пересчет занимает больше времени.
Файл рез-тов Заданн.	Выбор папки, в которой будут сохраняться пересчитанные данные результатов. Нов. файл/список Сохранение данных результатов в новом файле Для файла результатов выберите в Папка и Назв. место для сохранения расчетных данных. Комментарий, введенный в поле Описание , сохраняется с данными результатов.

Параметр/поле	Описание
	Добавить к файлу/списку Пересчитанные данные добавляются к существующему файлу результатов.
Повторн. обработ. вводы	Выбор строк, для которых необходимо выполнить пересчет. все Пересчет всех записей в списке результатов. Выбрать вводы Пересчет только выбранных строк последовательности. Щелкнуть по значку  и в окне Выбрать вводы выделить все строки последовательности, для которых необходим пересчет. Линии текущего выбранного метода Выделить в списке все линии, для которых необходим пересчет. Кнопка [Выделить все] позволяет выделить все линии. Кнопка [Отменен.выдел.] позволяет снять все выделения в списке линий.
[Временн. изменен.]	Сохранение временных изменений для пересчета (смещения длин волн, метки гашения) (расширение файла .ger). Данные будут автоматически загружаться с соответствующим (одноименным) файлом результатов.
добавить к карте КК	Если активировано, результаты типов проб КК при пересчете вносятся во вкладку КК.

Пересчет данных

- ▶ Внесите изменения в параметрах метода или в окне **Имя пробы** .
- ▶ Щелкните по значку  или выберите пункт меню **Процед. | Повт. обработк..** Откроется окно **Переделать рез-ты**.
- ▶ Задайте параметры входных данных (имя, измененная информация о пробе, измененная индикация результатов), место хранения и имя конечного файла.
Примечание: Если пересчет выполняется на основании изменений в информации о пробах, активируйте опцию **Модифицир. информ. о пробе**. Иначе эти изменения не будут учтены.
- ▶ Выберите строки/линии для пересчета.
- ▶ Запустите пересчет кнопкой **[ОК]**. Для конечного файла без указанных параметров появится контрольный вопрос «Переделать данные без сохранения в пост. файл??».

Замена стандарта калибровки

- Существующий стандарт калибровки можно заменить на стандарт, измеренный позднее. Для этого:
- ▶ В главном окне во вкладке **Послед-ть** или **Послед-ть/Рез-ты** выделите строку подлежащего замене стандарта калибровки.
 - ▶ Запустите измерение строки последовательности, щелкнув по значку .
 - ▶ В окне **Старт** укажите, что результат будет добавлен к уже существующему файлу.
После этого запускается процедура измерения стандарта калибровки.
 - ▶ Откройте окно **Переделать рез-ты** щелчком по значку .
 - ▶ Активируйте опцию **Выбрать вводы** и, щелкнув по значку , откройте одноименное окно.
 - ▶ Выделите последний измеренный стандарт и кнопками со стрелками переместите его на позицию стандарта, который необходимо заменить.

Замена отдельных линий стандарта калибровки

- ▶ Выделите все строки, для которых необходим пересчет. При этом деактивируйте старый стандарт, который больше не нужно включать в расчет.
- ▶ Нажав **[OK]**, вернитесь в окно **Переделать рез-ты** и задайте параметры входных данных, место хранения и имя конечного файла.
- ▶ Запустите процедуру пересчета кнопкой **[OK]**.
 - ✓ Данные будут пересчитаны для выбранных строк.

Стандарт можно также заменить следующим образом:

- ▶ В главном окне во вкладке **Пос-ть** или **Послед-ть/Рез-ты** выделите строку подлежащего замене стандарта калибровки.
- ▶ Запустите измерение строки последовательности, щелкнув по значку .
- ▶ В окне **Старт** укажите, что результат будет добавлен к уже существующему файлу. После этого запускается процедура измерения стандарта калибровки.
- ▶ В списке результатов правой кнопкой мыши щелкните по стандарту (линии), который необходимо заменить. В контекстном меню выберите пункт **Детальн. рез-ты**.
- ▶ В окне **Детальн. рез-ты** установите флажок в поле **Переместить с номером ввода** и введите в текстовом поле номер строки подлежащего замене стандарта.
- ▶ Запустите пересчет, как описано выше.
 - ✓ Данные будут пересчитаны для выбранных строк.

См. также

- 📖 Установка параметров проб для контроля качества для вкладок КК – окно Метод / ККС [▶ 46]

6.7 Обработка измерений параллельно с выполнением анализа (режим офлайн)

Во время проведения измерения дальнейшая обработка результатов невозможна. Однако, если приложение уже запущено, можно открыть другие программы того приложения в режиме офлайн. В этом режиме отсутствует соединение с прибором. Несмотря на это все другие функции, такие как создание методов или загрузка и оценка результатов, можно использовать параллельно с выполнением измерений в основном режиме программы.

- ▶ Запустите ASpect PQ во втором окне программы с помощью пункта меню **Файл | Старт Оффлайн Ступень программы**.
- ▶ Откройте файл результатов текущего измерения при помощи пункта меню **Файл | Открыть рез-ты**. Полученные ранее результаты будут загружены в окно результатов.
- ▶ Другие результаты из текущего измерения можно загрузить щелчком по значку  на панели инструментов или при помощи пункта меню **Вид | Обнов. список рез-тов**.

Можно продолжить дальнейшую обработку результатов.



ПРИМЕЧАНИЕ

При пересчете новые полученные результаты сохраняются в новой базе данных. Доступ к исходному файлу невозможен.

6.8 Отображение результатов и процесса анализа в главном окне

Результаты измерений и последовательность подробно представлены в фоновом окне рабочего интерфейса.

Отображение данных на различных вкладках в главном окне позволяет получить хорошее представление о результатах измерений и статистических оценках.

Можно выбрать следующие вкладки:

- **Послед-ть/Рез-ты** (содержание вкладок **Послед-ть** и **Рез-ты** во вкладке)
- **Послед-ть** (отображение текущей последовательности)
- **Рез-ты** (представление результатов измерений)
- **Обзор** (обобщенные результаты измерений)

В строке состояния в окне результатов показано имя текущего файла результатов.

Главное окно ASpect PQ с отображением результатов

№	Тип пробы	Назв.	Разб.	№	Назв.	Линия	Конц.2	CO2	Един.	Конц.1	Един.	Интенс.
1	Кал-ноль1			1	Cal-Zero1	AB96.152				0	µg/L	215557
2	Кал-Станд.1			2		As188.979				0	µg/L	219486
3	Кал-Станд.2			3		As193.698				0	µg/L	208355
4	Кал-Станд.3			4		Cd214.441				0	µg/L	216319
5	Вкладыш, калиб.			5		Cd226.502				0	µg/L	210135
6	Проба			6		Cd267.716				0	µg/L	209810
7	Проба			7		Cu324.754				0	µg/L	209197
8	Проба			8		Fe259.940				0	µg/L	216567
9	Проба			9		Mn257.610				0	µg/L	212689
10	Проба			10		Ni231.604				0	µg/L	212572
11	Проба			11		Pb220.353				0	µg/L	216761
12	Проба			12		Se196.028				0	µg/L	207222
13	Проба			13		U885.957				0	µg/L	209833
14	Проба			14		Zn206.200				0	mg/L	216193
15	Проба			15	Cal-Std1	AB96.152				1	µg/L	223487
16				16		As188.979				1	µg/L	254390
17				17		As193.698				1	µg/L	248640
18				18		Cd214.441				1	µg/L	257250
19				19		Cd226.502				1	µg/L	254547
20				20		Cd267.716				1	µg/L	257546
21				21		Cu324.754				1	µg/L	224367
22				22		Fe259.940				1	µg/L	221675
23				23		Mn257.610				1	µg/L	254642
24				24		Ni231.604				1	µg/L	256301
25				25		Pb220.353				1	µg/L	257318
26				26		Se196.028				1	µg/L	251222
27				27		U885.957				1	µg/L	254408
28				28		Zn206.200				1	mg/L	219181

6.8.1 Вкладка Послед-ть/Рез-ты

Вкладка **Послед-ть/Рез-ты** содержит данные обеих таблиц **Послед-ть** и **Результаты**.

См. также

- 📄 Вкладка Послед-ть [▶ 73]
- 📄 Вкладка Результаты [▶ 74]

6.8.2 Вкладка Послед-ть

Во вкладке **Послед-ть** представлена активная последовательность.

В этой вкладке можно следить за процессом выполнения анализа. Различные пробы и специальные функции отмечены в первом столбце таблицы следующим образом:

Значок	Значение
-	Еще не измерено / не отработано.
0	Измеряется в настоящий момент.
+	Уже измерено / не отработано.



ПРИМЕЧАНИЕ

После измерения можно снова измерить выбранную пробу. Для этого необходимо выбрать строку пробы в последовательности и затем подтвердить действие на панели инструментов.

6.8.3 Вкладка Результаты

Вкладка **Результаты** содержит все результаты измерений и статический анализ. Для лучшего обзора значения распределены в дополнительных таблицах. Закладки для этих таблиц расположены в нижней части окна.

Значения располагаются в порядке измерения проб. Для каждой пробы приведены проанализированные элементы.

Таблица Абс./Время

Таблица содержит интенсивность и статический анализ в соответствии с настройками метода (окно **Метод / ККК**).

Столбец	Описание
№	Номер в последовательности анализа
Назв.	Наименование пробы, стандартного раствора или пробы КК/стандартного раствора КК
Линия	Элементная линия
Тип	Внутренний стандартный раствор или аналит
Интенс.	Среднее значение измеренных отдельных интенсивностей пробы
СО(Интенс.)	Стандартное отклонение (статистика среднего значения)
СКО%	Относительное стандартное отклонение (статистика среднего значения)
Дата / Время	Время проведения измерения
Единичн. знач. (Интенс.)	Отдельные значения измерений интенсивности

Таблица Конц.1

Таблица **Конц.1** показывает концентрацию анализируемой пробы при подаче в ИСП-ОЭС. В качестве единицы измерения в методе используется установленная единица калибровки.

Столбец	Описание
№	Номер в последовательности анализа
Назв.	Наименование пробы, стандартного раствора или пробы КК/стандартного раствора КК
Линия	Элементная линия
Тип	Внутренний стандартный раствор или аналит

Столбец	Описание
Един.	Единица измерения концентрации
Конц.1	Концентрация аналита в пробе/ концентрация аналита в стандартном растворе
CO1	Стандартное отклонение конц. 1 (статистика среднего значения)
СКО%	Относительное стандартное отклонение конц. 1 (статистика среднего значения)
R	Диапазон конц. 1 (медианная статистика)
R%	Относительный диапазон конц. 1 (медианная статистика)
Sf	Доверительный интервал
ФР	Коэффициент разбавления пробы Коэффициент, обозначающий разбавление исходной пробы перед ее помещением в автосамплер или ее подачей к плазме при работе без автосамплера.
Рем.	Особенности при определении значений
Интенс.	Среднее значение измеренных отдельных интенсивностей повторов измерений
CO(Интенс.)	Стандартное отклонение значений интенсивности (статистика среднего значения)
Дата / Время	Дата и время измерения
Единичн. знач. (Интенс.)	Отдельные значения интенсивности повторов измерений

Таблица Конц.2

В таблице **Конц.2** показана концентрация исходной пробы. При расчете конц.2 учитываются данные с информацией о пробах:

- Предварительное разбавление
- Масса оригинальной пробы в твердых пробах и объемах растворов
- Факторы пересчета для других единиц измерения

Столбец	Описание
№	Номер в последовательности анализа
Назв.	Наименование пробы, стандартного раствора или пробы КК/стандартного раствора КК
Линия	Элементная линия
Тип	Внутренний стандартный раствор или аналит
Един.	Единица измерения концентрации
Конц.	Концентрация оригинальной пробы с учетом данных пробы
CO2	Стандартное отклонение конц. 2 (статистика среднего значения)
СКО%	Относительное стандартное отклонение конц. 2 (статистика среднего значения)
Sf	Доверительный интервал конц. 2
100% норм.	Стандартизированная конц. на основе процентного содержания 2
Интенс.	Среднее значение из полученных отдельных интенсивностей
CO(Интенс.)	Стандартное отклонение значений интенсивности (статистика среднего значения)
R(Интенс.)	Диапазон значений интенсивности (медианная статистика)
Дата / Время	Дата и время измерения
Единичн. знач. (Интенс.)	Отдельные значения измерений интенсивности

Таблица Рез. КК

В таблице **Рез. КК** показаны результаты для проб КК:

- Заданное и фактическое значение концентрации
- Скорости возврата (все типы кроме бланка)
- Реакции на возможные отклонения (все типы, кроме бланка).

Столбец	Описание
№	Номер в последовательности анализа
Назв.	Наименование пробы, стандартного раствора или пробы КК/стандартного раствора КК
Линия	Элементная линия
Тип	Внутренний стандартный раствор или аналит
КК (для функций калибровки)	RI(настр.) или R Наклон БЕК (BEC) Фоновая эквивалентная концентрация
КК(для проб КК, не для бланка КК)	Конц.1 Заданное значение Восстановление Скорость возврата Для проб КК и стандартов КК определяется скорость возврата концентрации. Для базового списка КК, тренда КК и матрицы КК скорость возврата концентрации рассчитывается путем вызванного добавками повышения концентрации.
КК (для предела детектирования бланка)	СО Стандартное отклонение измерения бланка LOD Предел детектирования LOQ Предел количественного определения
Рем.	Примечания к результатам КК (например, >кал.)
Интенс.	Среднее значение измеренных отдельных интенсивностей
СО	Стандартное отклонение значений интенсивности (статистика среднего значения)
Дата / Время	Дата и время измерения
Единичн. знач. (Интенс.)	Отдельные значения измерений интенсивности

Таблица Ошибка

Если при измерениях возникли ошибки соответствующие измерения отмечаются в таблице красным цветом. В таблице **Ошибка** погрешности измерения документируются в письменном виде.

Таблица Единичн. знач.

Таблица **Единичн. знач.** содержит измеренные отдельные значения интенсивности и соответствующую интенсивность фона.

Таблица Имя пробы

Таблица **Имя пробы** содержит данные с информацией о пробах.

Столбец	Описание
№	Номер в последовательности анализа
Назв.	Наименование пробы, стандартного раствора или пробы КК/стандартного раствора КК
Линия	Элементная линия

Столбец	Описание
Поз.	Позиция пробы в автосамплере
Фактор пред-разб.	Коэффициент предварительного разбавления Фактор, на который исходная проба была разбавлена, перед помещением в автосамплер или добавлением в спектрометр при работе без автосамплера. Фактор необходим для расчета концентрации исходной пробы.
Wt.	Навеска в граммах Навеска исходной пробы, которая была растворена при подготовке пробы (в граммах). Масса требуется для расчета концентрации исходной пробы (Конц.2).
Объем	Объем растворителя, в котором была растворена соответствующая масса оригинальной пробы (в мл). Значение необходимо для расчета концентрации исходной пробы (Конц.2).
Общая масса.	Общая навеска, включает пробу и разбавитель (только для типа единиц измерения жидк., жидк. грав.)
Назв.(2)	Дополнительное обозначение пробы из таблицы данных проб
Разб.АС	Фактор разбавления автосамплера:
Холост корр.	Коррекция бланка выкл. Коррекция бланка не проводилась. вкл. Для расчета концентрации исходной пробы было вычтено последнее измеренное в последовательности значение для бланка.

Таблица Опред. польз.

В таблице **Опред. польз.** можно самостоятельно выбрать параметры вывода результатов и их порядок в таблице.

- ▶ Нажмите кнопку **[Выбрать столбцы]** в правом углу таблицы.
- ▶ В окне **Выбрать столбцы** выделите мышью необходимые параметры.
- ▶ Для изменения порядка отображения на дисплее выберите параметр, позицию которого вы хотите изменить, и переместите его в списке кнопками  и .
- ▶ После возврата в главное окно результаты отображаются. Вы можете изменить ширину столбцов таблицы, поместив курсор мыши на строку таблицы в заголовке таблицы (курсор превратится в двойную стрелку) и, удерживая кнопку мыши нажатой, изменить столбец таблицы на нужную ширину.

Примечание:

Ширина столбца сохраняется в этом виде. Для других таблиц в главном окне изменения ширины столбца сбрасываются при выходе из окна.

См. также

-  Опции для процесса анализа [▶ 136]
-  Обзор обозначений, используемых при отображении значений [▶ 140]
-  Данные с информацией о пробах (ID проб) [▶ 60]

6.8.4 Вкладка Обзор

Во вкладке **Обзор** приведен обзор результатов анализа. Вы можете выбрать различные варианты вывода:

- **Конц.1** – концентрация 1

- **Конц. (СКО%)** – концентрация 1 (относительное стандартное отклонение)
- **Конц.2** – концентрация 2

Значение	Описание
Конц.2(СКО%)	Концентрация 2 (относительное стандартное отклонение)
Интенс.	Интенсивность
Интенс. (СКО%)	Интенсивность (относительное стандартное отклонение)
Интенс. (СО)	Интенсивность (стандартное отклонение)
LOD	Предел детектирования
LOQ	Предел количественного определения
Восстановление(Номинальн. знач.)	Уровень воспроизводимости (заданное значение)
R ²	Коэффициент определения
100% норм.	Стандартизированная конц. на основе процентного содержания 2

При активации соответствующих флажков можно отобразить следующие типы проб:

- Проба
- КК проба
- Кал-Станд.
- Другое

Щелчок по значку  открывает окно **Печать Обзор**, из которого можно вывести на печать отображаемые в данный момент данные.

См. также

- 📄 [Функции печати в ASpect PQ \[▶ 116\]](#)

6.9 Отображение и редактирование отдельных значений проб

Вы можете вывести на экран отдельные значения пробы и исключить отдельные значения из расчета концентрации пробы.

- ▶ Правой кнопкой мыши щелкните по строке в таблице результатов и выберите в контекстном меню пункт **Детальн. рез-ты**.
Или выделите строку пробы и выберите команду меню **Вид | Детальн. рез-ты**.

Окно Детальн. рез-ты

Детальн. рез-ты - [Sample 1]

Cd214.441

№	Интенс.	Конц.1 µg/L	Рем.
1	525841	7.770	
2	527141	7.803	
3	537109	8.053	

№: 92
 Тип: Проба
 Назв.: Sample 1
 Дата/Время: 09.06.2020 8:05
 Интенс.(Ср): 530031
 СО: 6165
 СКО: 1.2

Удалить

◀◀ ◀ ▶ ▶▶ [Ред. спектр](#) Закреть

Отображение отдельных значений (таблица)

Отдельные значения проб приведены в таблице.

Столбец таблицы	Описание
№	Номер отдельного значения в пределах измерения пробы
Интенс.	Интенсивность отдельного значения
Конц.1	Концентрация аналита в анализируемой пробе
Рем.	<p>нет Отдельное значение включается в расчет среднего значения пробы.</p> <p>#ВРУЧН. Значение было исключено вручную из расчета значения пробы.</p> <p>#КОР. Значение было автоматически исключено из расчета значения пробы в соответствии с тестом выброса Грabbса.</p>

Данные пробы

Поле	Описание
№	Номер измерения в таблице результатов
Тип	Тип пробы (проба, стандартный раствор или тип пробы КК)
Назв.	Имя пробы
Дата / Время	Дата и время измерения, выделенного в таблице
Интенс.(Средн)	Интенсивность, усредненная по всем отдельным значениям
СО	Стандартное отклонение (статистика среднего значения) Отображение не зависит от выбранного для измерения статистического метода (среднее значение/медиана).
СКО	Относительное стандартное отклонение (статистика среднего значения) Отображение не зависит от выбранного для измерения статистического метода (среднее значение/медиана).

Другие кнопки и опции в окне
Детальн. рез-ты

Опция/кнопка	Описание
[Удалить] / [Ре-акц.]	Исключение отдельного значения пробы из расчета среднего значения и повторное включение его в расчет.
[Ред. спектр]	Отображение зависимых от длины волны линейных спектров
Переместить с номером ввода	Для стандартов калибровки При пересчете текущая проба будет заменена пробой позиции Обог. таблицы результатов.
	Переключение между линиями отдельных проб и с одной пробы на следующую в таблице результатов.

Исключение отдельных значений проб

По желанию можно вручную исключить отдельные значения из расчета среднего значения пробы.

- ▶ Отметьте в таблице отдельное значение, которое нужно исключить.
- ▶ Кнопкой [Удалить] исключите значение из расчета среднего значения пробы при пересчете результатов.
- ▶ Чтобы снова включить выделенное отдельное значение в расчет, нажмите [Ре-акц.] .



ПРИМЕЧАНИЕ

При активной опции теста выбросов Граббса можно автоматически определить и устранить выбросы из числа отдельных значений во время анализа.

См. также

- Отображение и редактирование спектров интенсивности [▶ 80]

6.10 Отображение и редактирование спектров интенсивности

Спектры интенсивности в окне **Ред. спектр** используются для следующих задач:

- Определение основного пика аналитической линии и ее сохранение в файле линий
- Вычисление коррекции фона с учетом матрицы пробы и ее сохранение в методе
- Создание спектральных коррекций
- Идентификация линий рядом с аналитической линией

Для каждого измерения в окне результатов можно отображать и редактировать спектры интенсивности.

- ▶ Двойным щелчком по соответствующей строке пробы и таблице результатов откройте окно **Ред. спектр** .
Или правой кнопкой мыши щелкните по строке в таблице результатов и выберите в контекстном меню **Ред. спектр** . Вы можете также выделить строку пробы и выбрать команду меню **Вид | Ред. спектр** .

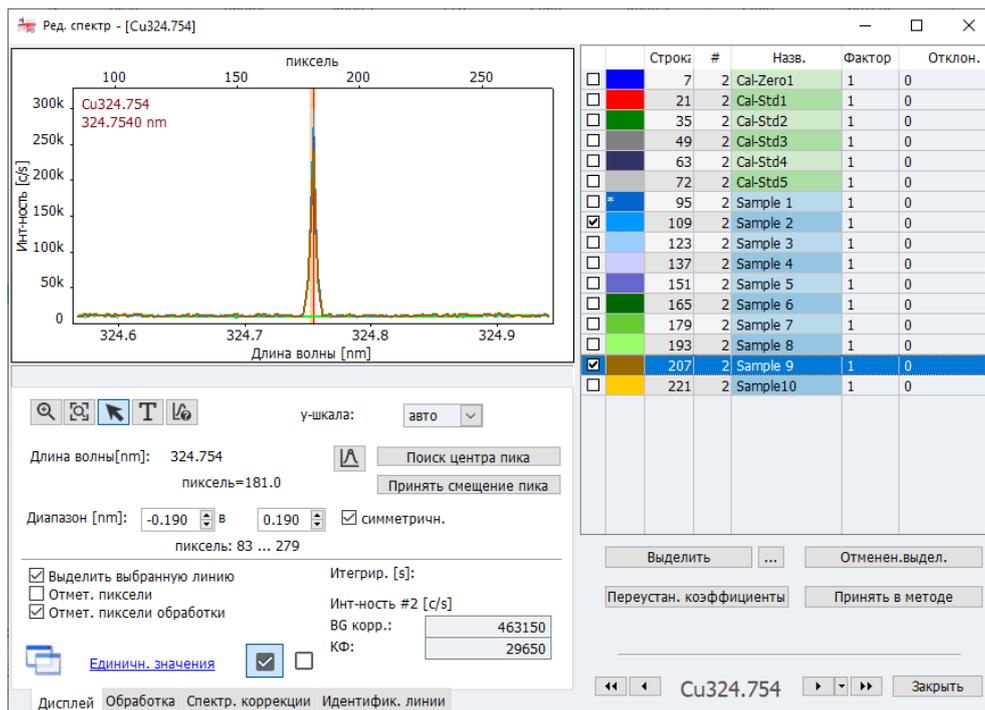
В окне **Ред. спектр** приведены все измеренные пробы со всеми отдельными значениями для соответствующей аналитической линии. Можно переключаться между отдельными аналитическими линиями.

С левой стороны окна **Ред. спектр** находится графическое представление спектра интенсивности выбранной пробы или проб и четыре вкладки для оценки и редактирования спектра. С правой стороны в обзоре можно выбрать для отображения отдельные значения проб.

6.10.1 Отображение спектров – окно Ред. спектр / Дисплей

В окне **Ред. спектр / Дисплей** представлен обзор спектров проб. Вы можете определить положение пика и применить найденные параметры к линиям/файлу длин волн и методу.

Окно Ред. спектр / Дисплей



Выбор спектров/ список проб

В списке проб с правой стороны приведены все отдельные значения проб аналитической линии.

- ▶ Установите флажок для отдельных значений, которые нужно показать в графике. Спектры отдельных значений проб отображаются с наложением. При этом отдельным спектрам назначен цвет поля впереди в таблице.
- ▶ Если активирована опция **Выделить выбранную линию** в левом нижнем углу окна, выделенная мышью отдельная проба (синяя заливка в таблице) будет выделена жирным в графике.
- ▶ Применить фильтр к отображаемым пробам/повторным измерениям в списке проб и выбранным для графического отображения спектрам (установка флажка в поле в списке проб) можно кнопками внизу таблицы:
 - Щелкните рядом с **[Выделить]** по значку **...**.
 - В окне **Выбор** выполните следующие настройки:

Опция	Описание
все	Выбор всех строк списка результатов в главном окне для графического отображения (установить флажок для графического отображения).

Опция	Описание
из/в	Выбор из списка результатов только спектров в установленном диапазоне строк с/по.
Повтор	Выбор отдельных значений пробы: все Выбор всех отдельных значений пробы. Порядковое число, например, 2-й. Выбор выбранного отдельного значения пробы
Показать только выбранные повторы	Если активно, в списке проб будут отображаться только записи для выбранного повторного измерения. Если неактивно, будут отображаться все отдельные спектры и загружаться выбранные выше записи (все или с/по) главного окна.

- При щелчке по кнопке **[Выделить]** отобразятся/будут выбраны спектры с установленными параметрами.
- Щелчок по **[Отменен.выдел.]** снимает все флажки для отображения отдельных значений.

Ввод коэффициента и смещения

- ▶ Вы можете ввести коэффициент и/или смещение для каждого спектра в таблице проб. Обработанный таким образом спектр перемещается растягивается/сжимается и перемещается вдоль y-оси.
- ▶ Щелчок по кнопке **[Переустан. коэффициенты]** позволяет снова сбросить коэффициент и смещение и показать спектр в его исходном состоянии.

Отображение линейных спектров

С левой стороны отображаются выбранные спектры. При этом интенсивность наносится в импульсах в секунду относительно длины волны в Нм. Вверху графика отображается привязка к пикселям. Спектрометр отъюстирован таким образом, что на анализируемом пикселе, например, 180, отображен основной пик. Отклонения основного пика следует корректировать для каждой аналитической линии, см. ниже.

Кнопки для просмотра спектров имеют следующие функции:

Опция / Кнопка	Описание
	Активация функции масштабирования графика. Щелчок по значку при нажатой левой кнопке мыши позволяет выделить фрагмент спектра для увеличения.
	Восстановление исходных координат после масштабирования.
	Активирует режим выделения в окнах кривой сигнала или спектров. Левой кнопкой мыши можно выбрать точки измерения. Значения выбранной точки измерения отображаются в поле вывода под кнопками.
	Активация текстового режима. При нажатой левой кнопке мыши можно выбрать область окна, куда будет добавлен текст для графика. Двойной щелчок по существующему тексту открывает окно, в котором текст можно отредактировать или удалить. Сочетание клавиш Ctrl + правая кнопка мыши позволяет переместить существующий текст.
	Активация режима идентификации линий. Щелчок кнопкой мыши или перетаскивание мышью запускает поиск в базе данных линий элемента при выбранной позиции длины волны. Найденная линия отображается внизу графика.
у-шкала	Выбор масштабирования графика:

Опция / Кнопка	Описание
	<p>авто. Автомасштабирование: спектр отображается с оптимальным расширением ординаты.</p> <p>Значение Ручное масштабирование. Верхний предел ординаты выбирается в списке.</p>
Длина волны	Отображение длины волны аналитической линии.
	Ручная установка основной пиковой точки.
[Поиск центра пика]	Автоматический поиск пика и коррекция отклонения.
[Принять смещение пика]	Сохранение отклонения пика в библиотеке линий. С этого момента отклонение будет использоваться для каждого измерения этой элементной линии.
Диапаз. (нм)	<p>Выбор спектральной области под и над аналитической линией. Эта спектральная область доступна для анализа спектров, например, для коррекции фона.</p> <p>Если установлена галочка в поле симметричн., спектральная область под и над длиной волны будет одинаковой.</p> <p>Под полями ввода отображается соответствующий диапазон пикселей.</p> <p>Щелчком по кнопке [Принять в методе] настройки по спектральной области выбранной линии переносятся в текущий метод измерения. Эта область используется в расчете для динамического регулирования фона (автоматическая коррекция фона). Данные изменяются также в окне метода во вкладке Обработка</p>
[Выделить выделенную линию]	Выделенный в правой обзорной области отдельный спектр выделяется в графике жирной линией.
[Отмет. пиксели]	Пиксели выделяются в графике кругом.
[Отмет. пиксели обработки]	Центральный анализируемый пиксель основного пика выделяется красной линией. Если в оценку включается несколько пикселей, их область выделяется светло-красным цветом.
Интенсивность	<p>BG корр. Интенсивность с коррекцией фона</p> <p>КФ Интенсивность фона</p>
Детальн. рез-ты	Ссылка на окно Детальн. рез-ты
	<p>Если значок выделен таким образом, линия будет использоваться в методе.</p> <p>Так можно в окне Ред. спектр выделять подходящие линии во время разработки метода.</p>
	Не использовать линию в методе.

Автоматическая установка основного пика

Во время разработки метода необходимо корректировать зависящие от устройства отклонения пика и отклонения, вызванные взаимным наложением линий, например, дублиеты.

- ▶ Нажмите кнопку **[Поиск центра пика]**. Автоматическое определение основного пика позволяет очень хорошо определять большую часть пиков. Или щелкните по значку  и вручную выделите основную пиковую точку в спектре.

- ▶ Опционально можно пересчитать результаты, чтобы оценить новое отклонение пика.
Перейдите в окно результатов и щелчком по значку  запустите пересчет.
Продолжайте, как описано в разделе «Пересчет результатов анализа».
- ▶ Кнопкой [Принять смещение пика] сохраните найденное отклонение пика в файл линий/длин волн устройства.
 - ✓ Теперь данные доступны для каждой последующей оценки аналитической линии.

См. также

- 📄 Выбор аналитической линии – Вкладка Линии [▶ 25]
- 📄 Пересчет результатов анализа [▶ 69]
- 📄 Поиск линий – окно Ред. спектр / Идентифик. линии [▶ 88]

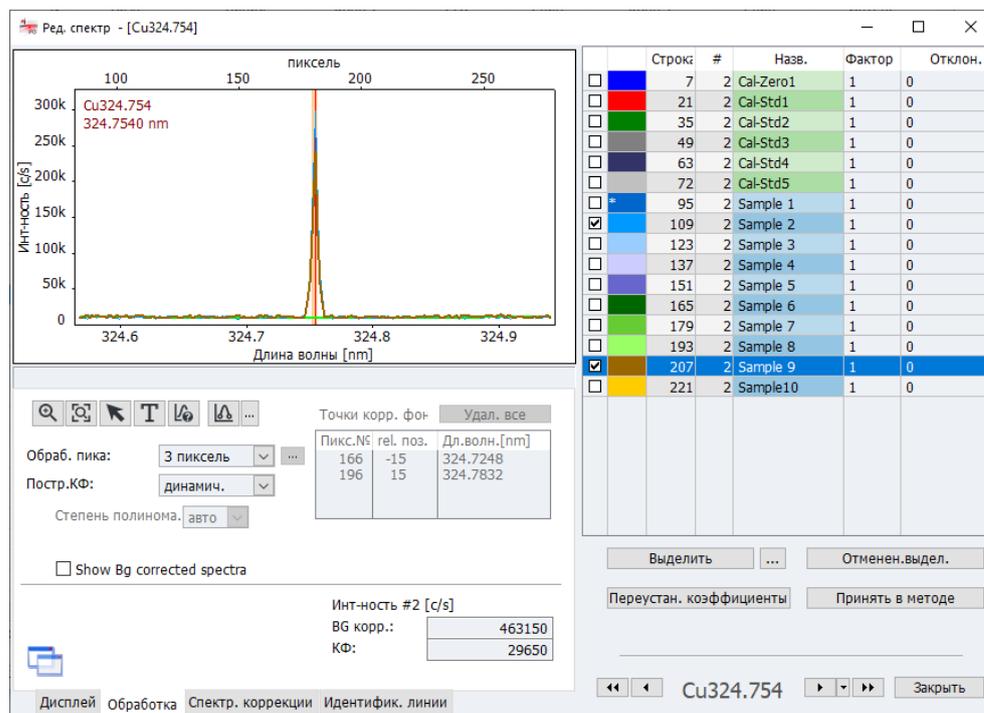
6.10.2 Оценка пика и определение коррекции фона – окно Ред. спектр / Обработка

Постоянные эмиссии фона, вызывающие колебания интенсивности в широкой спектральной области вокруг аналитической линии, можно компенсировать коррекцией фона. При этом выбираются пиксели (точки коррекции фона) по обеим сторонам аналитической линии, рассчитывается регрессия от точек и используется кривая регрессии для коррекции фона.

В статическом методе выбора точек коррекции фона точки устанавливаются вручную, а степень многочлена кривой регрессии определяется автоматически. В динамическом методе кривая регрессии рассчитывается автоматически по алгоритму коррекции базовой линии.

Периодическую фоновую помеху, например, в результате наложения линий с элементом матрицы, можно минимизировать с помощью корректирующих спектров.

Окно Ред. спектр / Обработка



Строчка	#	Назв.	Фактор	Отклон.
<input type="checkbox"/>	7	2 Cal-Zero1	1	0
<input type="checkbox"/>	21	2 Cal-Std1	1	0
<input type="checkbox"/>	35	2 Cal-Std2	1	0
<input type="checkbox"/>	49	2 Cal-Std3	1	0
<input type="checkbox"/>	63	2 Cal-Std4	1	0
<input type="checkbox"/>	72	2 Cal-Std5	1	0
<input type="checkbox"/>	95	2 Sample 1	1	0
<input checked="" type="checkbox"/>	109	2 Sample 2	1	0
<input type="checkbox"/>	123	2 Sample 3	1	0
<input type="checkbox"/>	137	2 Sample 4	1	0
<input type="checkbox"/>	151	2 Sample 5	1	0
<input type="checkbox"/>	165	2 Sample 6	1	0
<input type="checkbox"/>	179	2 Sample 7	1	0
<input type="checkbox"/>	193	2 Sample 8	1	0
<input checked="" type="checkbox"/>	207	2 Sample 9	1	0
<input type="checkbox"/>	221	2 Sample 10	1	0

Пикс.№	rel. поз.	Дл.волн.[nm]
166	-15	324.7248
196	15	324.7832

Инт-ность #2 [c/s]: 463150
КФ: 29650

Обзор элементов для оценки пика и коррекции фона

Экранные кнопки для просмотра спектров, некоторые выводимые значения, а также доступные отдельные значения проб описаны в разделе об окне **Ред. спектр / Дисплей**.

Опция/ кнопка	Описание
Обраб. пика	<p>Выставка числа пикселей для оценки пика.</p> <p>1 Сигнал измерения определяется только по пикселю, на котором расположен основной пик.</p> <p>Значение > 1 Число пикселей, свыше которых определяется сигнал измерения Отдельные сигналы пикселей суммируются. Поэтому результат превышает максимальный пик. Пиксель с основной пиковой точкой расположен в середине области.</p> <p>Высота В оценке учитывается высота пика.</p> <p>Опред. поль-лем Область оценки задается пользователем. Эта опция предпочтительно используется для оценки дублетов.</p> <p>Щелчком по значку ... активирует в списке все пиксели, включаемые в оценку.</p>
Постр.КФ	<p>Выбор типа коррекции фона:</p> <p>динамич. Коррекция фона рассчитывается автоматически по математическому алгоритму. Других настроек при выборе этой опции не требуется.</p> <p>статич. Точки коррекции фона задаются вручную щелчком мыши в спектре. Для функции коррекции дополнительно нужно выбрать степень многочлена.</p>
	<p>Установка или удаление точек коррекции фона при статической настройке.</p> <p>При перемещении мыши по графику спектра отображается крест.</p> <p>Щелчок по значку ... открывает список функций:</p> <p>Задать точки коррекции фона Щелчком мыши установите точки коррекции на желаемую длину волны в спектре. Перемещая нажатую кнопку мыши по области, можно выделить всю область.</p> <p>Удалить точки коррекции фона Щелчок по уже выбранной точке удаляет соответствующую точку коррекции фона. Перетаскивание мышью позволяет удалять области.</p> <p>Удалить все точки коррекции фона Удаление всех выбранных точек.</p>
Точки корр. фона [Удал. все]	Удаление всех установленных вручную точек коррекции фона.
Таблица	Отображение установленных вручную точек коррекции фона.
Степень полинома.	<p>Выбор степени многочлена для регрессии кривой коррекции фона.</p> <p>При выборе опции авто регрессия выбирается автоматически.</p>
Show Bg corrected spectra	<p>Отображение спектров с коррекцией фона.</p> <p>Настроенный фон (зеленая линия) вычитается из спектра пробы. Тем самым фон соответствует нулевой линии.</p>

Применение данных к методу **Настройки по оценке пикового значения и по коррекции фона** выбранной линии можно перенести в текущий метод измерения щелчком по кнопке **[Принять в методе]**. Данные изменяются также в окне метода во вкладке **Оценка**.

См. также

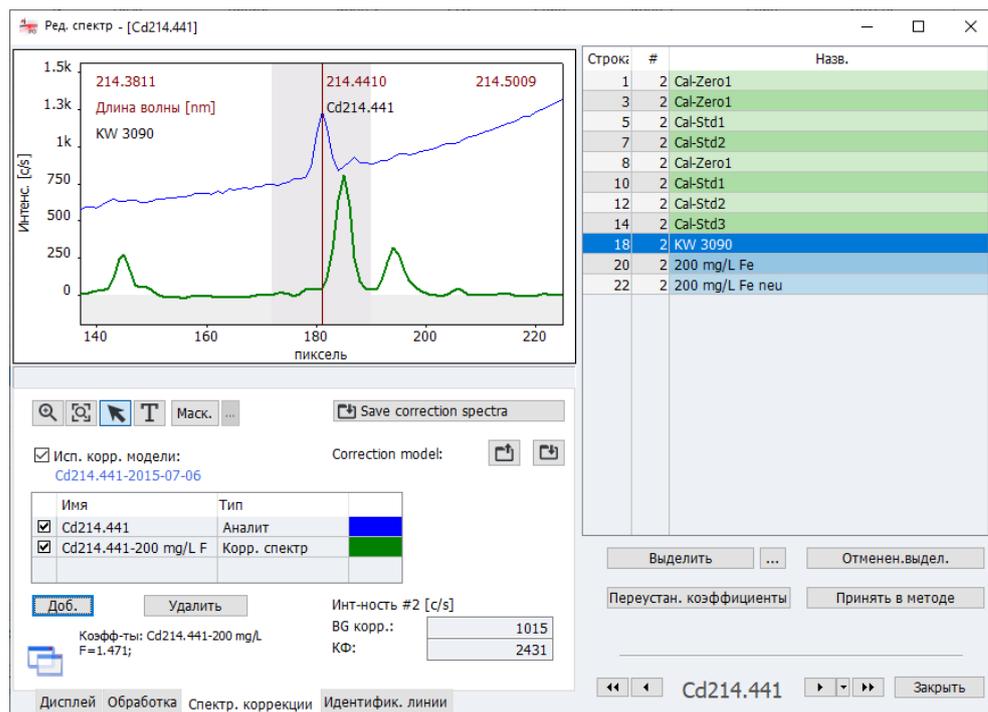
- ☰ Устранение спектральных помех – окно **Ред. спектр / Спектр. коррекции** [▶ 86]
- ☰ Отображение спектров – окно **Ред. спектр / Дисплей** [▶ 81]

6.10.3 Устранение спектральных помех – окно **Ред. спектр / Спектр. коррекции**

В процедуре осуществляется попытка по возможности выбирать для анализа линии, которые не содержат помех и/или обладают фоном, который можно легко откорректировать. Если это невозможно, корректирующие спектры позволяют устранить периодические помехи, например, вызванные наложением линий с одним или несколькими элементами матрицы. Корректирующие спектры матрицы объединяются в одной модели, и их можно привязать к линии в методе.

Функции для сохранения отдельных корректирующих спектров и для объединения модели коррекции находятся в окне **Ред. спектр / Спектр. коррекции**.

Окно **Ред. спектр / Спектр. коррекции**



Опция/кнопка	Описание
[Save correction spectra]	Сохранение спектров чистых компонентов матрицы как корректирующие спектры.
Исп. корр. модели	Если опция активирована, модели коррекции применяется к анализу.
Корр. модель	 Сохранение текущей модели коррекции.  Загрузка существующей модели коррекции.

В таблице линий приведены аналит и используемые в модели корректирующие спектры. Установка флажка позволяет отобразить отдельные спектры в графике. При выборе кнопки **[Доб.]** в модель коррекции будут добавлены дополнительные спектры. При нажатии кнопки **[Удалить]** выделенный мышью спектр удаляется из модели.

Примечание:

Все корректирующие спектры в таблице линий в модели включаются в расчет, независимо от того, было активировано поле для просмотра или нет. Если корректирующий спектр не нужно учитывать, его необходимо удалить.

6.10.3.1 Создание модели для спектральных коррекций

Для создания и использования модели коррекции для аналитической линии необходимо выполнить следующее:

- ▶ Идентифицируйте возможные интерференции.
- ▶ Создайте и сохраните корректирующие спектры.
- ▶ Создайте модель коррекции.
- ▶ Примените параметры аналитической линии с моделью коррекции к методу.

Шаг 1: идентификация интерференций

- ▶ Создайте метод с аналитической линией.
- ▶ Измерьте аналит в матрице и загрузите спектр в окно **Ред. спектр** (двойной щелчок по строке пробы в главном окне).
- ▶ В окне **Ред. спектр / Идентифик. линии** идентифицируйте возможные мешающие линии.

Шаг 2: измерение и сохранение корректирующих спектров

- ▶ Добавьте к последовательности измерение мешающих компонентов матрицы, которые вызывают спектральное наложение, и измерьте эти компоненты в одноэлементных растворах.

Примечание:

Концентрации компонентов матрицы не должны совпадать с концентрациями в пробах. Они должны быть лишь настолько высокими, чтобы спектры показывали четкие значения интенсивности. Для правильной коррекции спектров измерьте как чистую субстанцию только один компонент.

- ▶ Загрузите спектр компонента матрицы в окно **Ред. спектр / Спектр. коррекции**.
- ▶ Нажмите кнопку **[Save correction spectra]**.

Откроется окно базы данных для сохранения корректирующих спектров.

- ▶ Задайте имя и завершите процедуру, нажав кнопку **[Сохран.]**.
- ▶ Таким же образом сохраните спектры других компонентов матрицы.

Шаг 3: создание модели коррекции

- ▶ Снова загрузите спектр аналита в матрицу.
- ▶ Активируйте флажок в поле **Исп. корр. модели**.
- ▶ Нажав кнопку **[Доб.]**, откройте список уже сохраненных корректирующих спектров.
- ▶ Выделите корректирующий спектр в списке и нажмите кнопку **[Загр.]**.
- ▶ Аналогичным образом добавьте все корректирующие спектры.
- ▶ В окне просмотра спектров убедитесь, что полученный спектр пробы не содержит наложений.

- ▶ Кнопкой **[Маск.]** с удерживаемой нажатой кнопкой мыши можно выделить области, которые не следует включать в расчет модели коррекции. По умолчанию область аналитической линии (± 9 пикселей) маскируется. Маскирование других областей может понадобиться, если для записи не было чистых субстанций, и эти загрязнения могут встречаться в непостоянных процентах.
- ▶ Чтобы сохранить модель коррекции, щелкните по значку  и задайте имя модели. Завершите процедуру, нажав кнопку **[Сохран.]**.

Шаг 4: применение аналитической линии с моделью коррекции к методу

- ▶ Нажав кнопку **[Принять в методе]**, перенесите параметры аналитической линии с моделью коррекции в текущий метод.
 - ✓ В окне **Метод / Обработка** аналитическая линия в столбце **Коррекц.** обозначена аббревиатурой **LSM** (Least Square Model, модель наименьших квадратов).

После сохранения метода будущие измерения проводятся по этому методу с созданной моделью коррекции. Уже проведенные измерения можно пересчитать с новой версией метода, так что повторять измерение не требуется.

Спектральные модели коррекции сохраняются с данными результатов. При переносе данных результатов на другой компьютер, на котором не сохранены модели коррекции, модели импортируются после контрольного вопроса.

6.10.3.2 Поиск линий – окно Ред. спектр / Идентифик. линии

В окне **Ред. спектр / Идентифик. линии** линии в измеренных спектрах можно идентифицировать по базе данных линий.

Окно Ред. спектр / Идентифик. линии

Скриншот окна "Ред. спектр / Идентифик. линии". В центре — график спектра с осями "Интенсивность [c/s]" и "Длина волны [nm]". Выделен пик при 206.1580 нм. Внизу — таблица найденных линий:

№	Элемент	Тип	Дл.волн. [nm]	БЕК (ВЕС)(акс.) [мкг/л]
1	Ag	I	206.1170	
2	Si	I	206.1190	
3	Cr	II	206.1490	
4	Cr	II	206.1580	0.01
5	I	I	206.1630	13
6	Sc	I	206.1637	
7	Os	I	206.1690	
8	Ri	I	206.1700	1.39

В правой части — таблица параметров калибровки:

Строка	#	Назв.	Фактор	Отклон.
14	2	Kal.-Null1	1	0
28	2	Kal.-Std.1	1	0
42	2	Kal.-Std.2	1	0
56	2	Kal.-Std.3	1	0
70	2	Kal.-Std.4	1	0
74	2	Kal.-Std.5	1	0
102	2	blank	1	0
116	2	TW Jena	1	0
130	2	TW Jena +	1	0
144	2	NWG	1	0
158	2	NWG	1	0

В нижней части окна — панель управления с кнопками: "Выделить", "Отменен.выдел.", "Переустан. коэффициенты", "Принять в методе".

В таблице под спектром отображаются все идентифицированные в участке спектра линии.

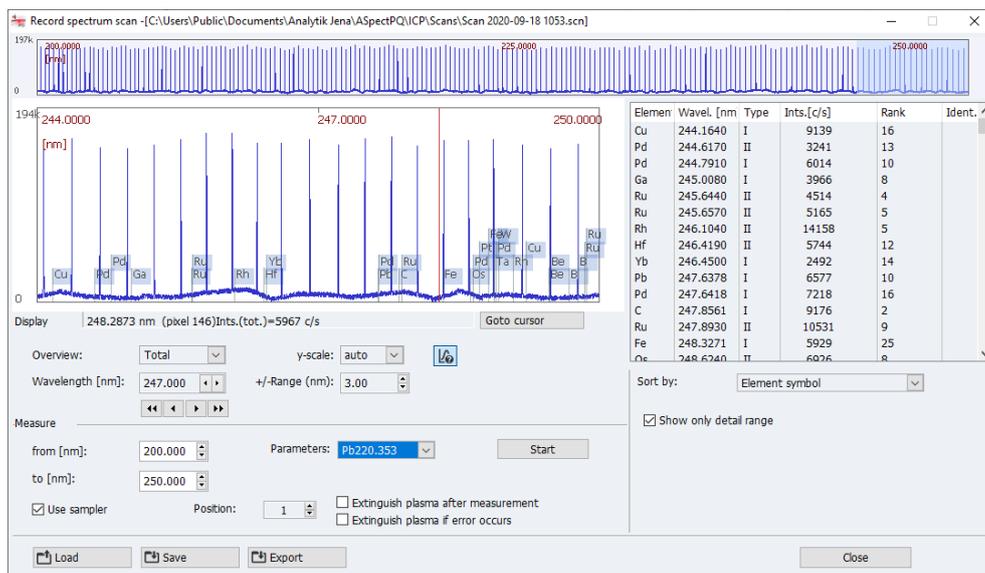
- ▶ Активируйте кнопку .

- ▶ Щелкните по интересующему вас пику в спектре. Следующая подходящая линия будет показана под спектром и будет выделена в таблице.
- ▶ И наоборот: вы можете выбрать линию в таблице, которая после этого будет отображена в спектре.

6.11 Запись обзорного спектра

Пункт меню **Разраб. метода | Запись сканир. спектра** позволяет записать обзорный спектр в заданной спектральной области.

Окно Запись сканир. спектра



- ▶ Выберите пункт меню **Разраб. метода | Запись сканир. спектра**.
- ▶ В области **Измер.** введите нужную спектральную область (**из / в**).
- ▶ Если вы активировали метод, вы можете выбрать параметры линии метода для сканирования спектров. Если метод не загружен, используются параметры по умолчанию.
- ▶ Приготовьте пробу. Если вы хотите работать с автосамплером, активируйте опцию **Использ. самплер** и выберите позицию пробы на автосамплере.
- ▶ Запустите сканирование кнопкой **[Старт]**. После завершения сканирования обзорный спектр отобразится в верхней области окна.
- ▶ При щелчке по участку обзорного спектра отобразится область данных с выбранной линией в графике. Ширина области данных настраивается в списке **+/- Диапазон**.
- ▶ Найденные линии выводятся в таблице с правой стороны. Ограничить отображаемые данные показанной спектральной областью позволяет опция **Показ. только детальн. диапазон**.

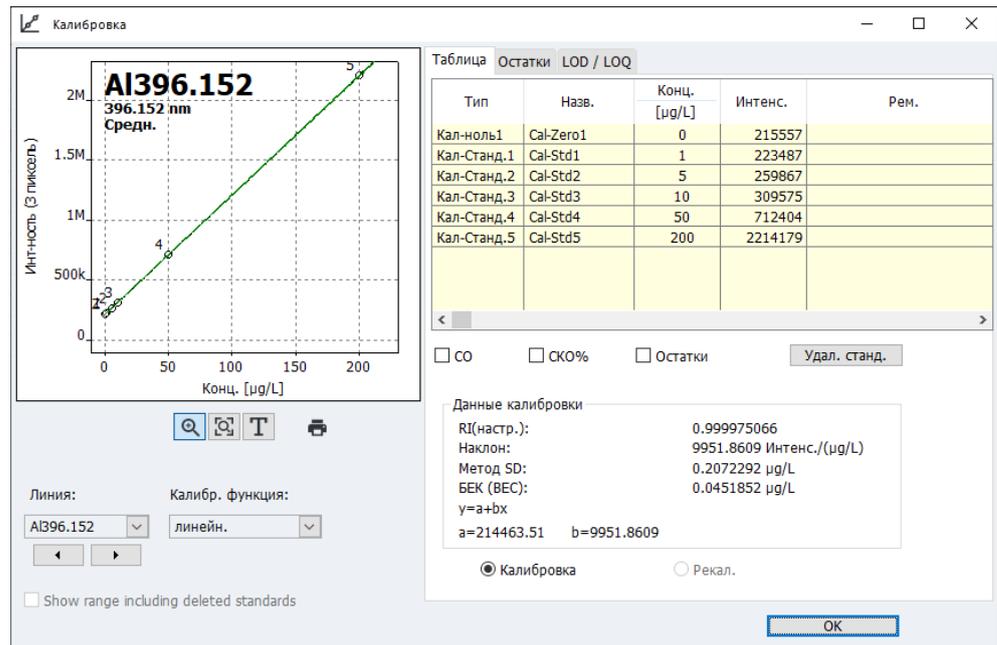
7 Калибровка

Калибровка проводится во время измерения в соответствии с опциями, выбранными в последовательности. Калибровочные кривые и функции можно отобразить и отредактировать после измерения.

- ▶ Откройте окно **Калибровка** щелчком по значку  в строке символов. Или дважды щелкните по одной из строк последовательности **Вычисл. калиб.** или выберите пункт меню **Разраб. метода | Калибровка**.

Окно Калибровка

Окно **Калибровка** показывает вычисленную с учетом параметров кривой калибровочную кривую.



Для каждой оговоренной в последовательности аналитической линии окно содержит

- Графическое отображение калибровочной кривой
- Калибровочная таблица
- Параметр
- Отклонения
- Предел детектирования и предел количественного определения.

Выбор линии

В списке **Линия** выберите аналитическую линию для отображения калибровки. Кнопки со стрелками под списком позволяют переключаться между отображениями отдельных линий.

Выбор функции калибровки

В списке **Калибр. функция** можно выбрать возможные регрессионные расчеты калибровочной кривой:

Опция калибровки	Описание
линейн.	Линейный ход функции калибровки $y = a + bx$
нелинейн. отнош.	Нелинейный ход функции калибровки, описанный дробно-рациональной функцией

Опция калибровки	Описание
	$y = \frac{a + bx}{1 + cx}$
нелинейн. квадр.	Нелинейный ход функции калибровки, описанный квадратической функцией $y = a + bx + cx^2$
автоматич.	Для калибровки рассчитываются соответственно линейная и нелинейная функции. В заключение проводится тест Манделя, при котором сравниваются суммы квадратов остатка. Если сумма для нелинейной функции значительно меньше, чем для линейной, то выбирается нелинейный ход калибровочной кривой, в противном случае используется линейный ход калибровочной кривой. Нелинейная функция выбирается в окне Опции / Пост-ть анализ . По умолчанию здесь установлена дробно-рациональная функция.

См. также

📖 Опции для процесса анализа [▶ 136]

7.1 Графическое представление калибровочной кривой

На графике отображаются точки измерения, рассчитанная калибровочная кривая и отклонения. Номера точек измерения соответствуют точкам, указанным во вкладке **Таблица**. Точка калибровки отмечена буквой Z (Zero, ноль).

Цветовая маркировка

Точки измерения промаркированы следующим образом:

Цвет	Значение
Черный	Обычная точка измерения
Светло-серый	Удаленная/выброс (не учитывается при расчете)
Синий	Подозрительный выброс (включен в вычисление)

Кривые также промаркированы цветом:

Цвет кривой	Значение
Черный	Калибровочная кривая в пределах действующего калибровочного интервала
Синий	Калибровочная кривая за пределами действующего калибровочного интервала
Зеленый	Нижний и верхний предел прогнозируемого диапазона в пределах действующего калибровочного диапазона
Светло-серый	Нижний и верхний предел прогнозируемого диапазона за пределами действующего калибровочного диапазона

Примечание по прогнозируемой/ доверительной области

Положение прогнозируемой области зависит от выбранной статистической достоверности и является мерой «качества» калибровки, от которой в конечном итоге зависит и статистическая достоверность аналитических измерений пробы. Кроме того, прогнозируемая область используется для определения точек калибровки «с

подозрением выброса». Статическую достоверность можно выбрать в окне **Метод / Статистика**. В окне Опции / Пос-ть анализов можно выбрать, какая область будет отображаться: прогнозируемая или доверительная.

Увеличение калибровочной кривой

Щелчок по значку  при нажатой кнопке мыши позволяет увеличить графическую область. Выбор значка  возвращает графическую область к исходным размерам.

Вставка комментария

В график можно добавить текстовое поле для ввода комментария.

- ▶ Выберите **T**.
- ▶ При нажатой левой кнопке мыши перетащите рамку текстового поля на график.
- ▶ В открывшемся окне ввода в **[Шрифт !Kurz]** выберите шрифт.
- ▶ Введите текст и нажмите кнопку **[OK]**.
 - ✓ Текст отобразится в графике.

Печать калибровочной кривой

При щелчке по значку  калибровочная кривая и данные калибровки выводятся на печать.

См. также

-  Установка параметров статистических оценок – окно Метод / Статистика [▶ 44]
-  Опции для процесса анализа [▶ 136]
-  Печать данных результатов [▶ 116]

7.2 Отображение результатов градуировки

7.2.1 Калибровка – вкладка Таблица

В окне **Калибровка** во вкладке **Таблица** выводятся пары значений стандартов (расчетная концентрация/ значение измерения).

Если стандарты были измерены несколько раз и в методе задана опция статистической оценки, активация соответствующих контрольных полей позволяет активировать отображение стандартного отклонения (CO) и относительного стандартного отклонения (СКО%) и/или диапазона (R) и относительного диапазона (R%).

Для исключения отдельных калибровочных стандартов из расчета выделите в таблице кнопкой мыши стандарт и нажмите кнопку **[Удал. станд.]**.

При этом измеренное значение не удаляется навсегда и может быть снова активировано в любой момент.

Под таблицей значений измерения представлены данные калибровки, если возможен их достоверный расчет:

Параметр	Значение
RI(настр.)	Коэффициент определения
Наклон	Наклон калибровочной кривой
Метод SD	Стандартное отклонение метода
БЕК (BEC)	Значение ФЭК (фоновая эквивалентная концентрация) – концентрация анализируемого вещества, порождающая сигнал, эквивалентный фоновому. Тем самым меньшее значение соответствует более высокой чувствительности.

7.2.2 Калибровка – вкладка Остатки

В окне **Калибровка** на графике во вкладке **Остатки** показаны отклонения точек калибровки от вычисленной калибровочной кривой, а также пределы прогнозируемой области.

7.2.3 Калибровка – вкладка LOD/ LOQ

В окне **Калибровка** во вкладке **LOD/ LOQ** отображаются пределы детектирования и количественного определения ИСП-ОЭС. Они рассчитываются по текущим результатам калибровки. Значения для метода значений бланка и метода калибровочной кривой отображаются в этой области только в том случае, если калибровка устройства уже выполнена.

Параметр	Значение
Предел обнар.	Масса (концентрация) анализируемого элемента, которая еще может быть определена с заданной статистической достоверностью.
Предел определения	Наименьшая масса (концентрация) анализируемого элемента, которая еще может быть определена с заданной статистической достоверностью.
Холост SD (DL)	Только для метода значений бланка Измеренное стандартное отклонение бланка (проба IDL)

Кнопка **[Вычисл.]** запускает расчет пределов детектирования и количественного определения.

Метод калибровочной кривой

Для вычисления пределов детектирования и количественного определения по методу калибровочной кривой требуется линейная калибровочная кривая. Калибровка должна проводиться в нижнем калибровочном диапазоне. Для результата вычисления основными параметрами калибровки являются:

- Количество и положение калибровочных точек
- Количество повторов измерений на стандарт
- Качество уравнивания
- Наклон калибровочной кривой
- Относительная статистическая достоверность (уровень вероятности)

Значения, полученные методом калибровочной кривой, могут считаться целесообразными только в том случае, если калибровка была выполнена в нижнем калибровочном диапазоне.

Метод бланка

Стандартное отклонение бланка определяется в пределах измерения. Для этой цели измерение бланка (**КК холост. DL**) включается в последовательность.

Для метода бланка применяется следующая инструкция по вычислению:

- Бланк измеряется 11 раз.
- Из полученных значений выводится абсолютное стандартное отклонение **CO** бланка.
- Для предела детектирования и предела количественного определения применяются следующие формулы:

Предел детектирования (**LOD**)

$$LOD = 3 * CO / (\text{подъем калибровочной кривой})$$

Предел количественного определения (**LOQ**)

$$LOQ = 9 * CO / (\text{подъем калибровочной кривой})$$

См. также

📄 Объединение проб и порядка действий для последовательности [► 56]

7.2.4 Калибровка – вкладка LOD/ LOQ

В окне **Калибровка** во вкладке **LOD/ LOQ** отображаются пределы детектирования и количественного определения ИСП-ОЭС. Они рассчитываются по текущим результатам калибровки. Значения для метода значений бланка и метода калибровочной кривой отображаются в этой области только в том случае, если калибровка устройства уже выполнена.

Параметр	Значение
Предел обнар.	Масса (концентрация) анализируемого элемента, которая еще может быть определена с заданной статистической достоверностью.
Предел определения	Наименьшая масса (концентрация) анализируемого элемента, которая еще может быть определена с заданной статистической достоверностью.
Холост SD (DL)	Только для метода значений бланка Измеренное стандартное отклонение бланка (проба IDL)

Кнопка **[Вычисл.]** запускает расчет пределов детектирования и количественного определения.

Метод калибровочной кривой

Для вычисления пределов детектирования и количественного определения по методу калибровочной кривой требуется линейная калибровочная кривая. Калибровка должна проводиться в нижнем калибровочном диапазоне. Для результата вычисления основными параметрами калибровки являются:

- Количество и положение калибровочных точек
- Количество повторов измерений на стандарт
- Качество уравнивания
- Наклон калибровочной кривой
- Относительная статистическая достоверность (уровень вероятности)

Значения, полученные методом калибровочной кривой, могут считаться целесообразными только в том случае, если калибровка была выполнена в нижнем калибровочном диапазоне.

Метод бланка

Стандартное отклонение бланка определяется в пределах измерения. Для этой цели измерение бланка (**КК холост. DL**) включается в последовательность.

Для метода бланка применяется следующая инструкция по вычислению:

- Бланк измеряется 11 раз.
- Из полученных значений выводится абсолютное стандартное отклонение **CO** бланка.
- Для предела детектирования и предела количественного определения применяются следующие формулы:

Предел детектирования (**LOD**)

$$LOD = 3 * CO / (\text{подъем калибровочной кривой})$$

Предел количественного определения (**LOQ**)

$$LOQ = 9 * CO / (\text{подъем калибровочной кривой})$$

См. также

📄 Объединение проб и порядка действий для последовательности [► 56]

7.3 Редактирование калибровочной кривой

Существующую калибровочную кривую можно отредактировать в окне **Калибровка** следующим образом:

- Изменить используемую функцию калибровки
- Активировать/деактивировать стандартные растворы
- Заменить измеренный стандартный раствор
- ▶ Для изменения функции калибровки выберите из списка **Калибр. функция** новую модель.
- ▶ Для исключения стандарта из вычисления отметьте его во вкладке **Таблица** и нажмите кнопку **[Удал. станд.]**. При этом измеренное значение не удаляется навсегда и может быть снова активировано в любой момент.
- ▶ Измененные параметры калибровки будут применены к результатам при их пересчете. Для этого выберите пункт меню **Процедура | Переделать рез-ты** или на панели инструментов щелкните по значку .
- ▶ Также можно повторно измерить стандартный раствор и пересчитать результаты.

См. также

-  Пересчет результатов анализа [▶ 69]

8 Контроль качества (КК)

Функция контроля качества служит для отслеживания результатов измерения по методу в течение длительного периода времени. Для этой цели в методе задаются специальные пробы КК разных типов, которые включаются в последовательность.

Процесс анализа представлен на вкладках контроля качества (вкладки КК) и сохраняется вместе с методом. Вкладки КК доступны при каждой загрузке метода и обновляются при запуске следующего измерения.

Выберите тип проб КК и их параметры в окне **Метод / ККС** и в последовательности определите интегрирование пробы КК.

Вкладки КК загруженного (активного) метода отображены в окне **КК**. В нем также задаются параметры содержания и конфигурации вкладок КК.

- ▶ Откройте окно **КК** щелчком по значку  в строке символов или выберите пункт меню **Разраб. метода | КК**.

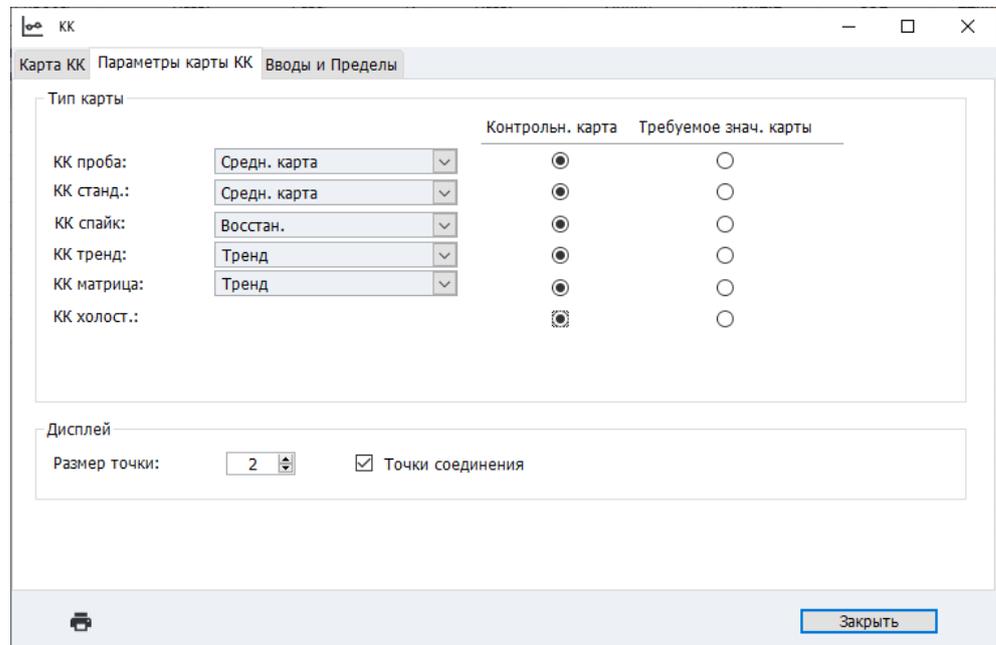
См. также

- 📖 Установка параметров проб для контроля качества для вкладок КК – окно **Метод / ККС** [▶ 46]
- 📖 Объединение проб и порядка действий для последовательности [▶ 56]

8.1 Параметры вкладок КК

Тип и отображение вкладок КК задается в окне **КК / Параметры карты КК**.

Окно КК / Параметры карты КК



Типы проб КК и оценки

Для различных типов проб КК можно выбрать следующие оценки:

Тип пробы КК	Вид оценки КК
КК проба	Средн. карта
КК станд.	Средн. карта (норм.) – не для вкладки целевого значения

Тип пробы КК	Вид оценки КК
	Восстан.
КК спайк	Восстан.
КК тренд	Тренд
КК матрица	Диапазоны – не для вкладки целевого значения Точности – не для вкладки целевого значения
Холост.	Выбор не предусмотрен. Отображается интенсивность бланка.

Для типа вкладки **Контрольн. карта** (вкладки с правилами) целевые параметры, контрольные пределы (K) и пределы предупреждения (W) вычисляются на основе среднего значения и рассеяния значений за предыдущий период. Для типа **Требуемое знач. карты** целевые величины и пределы исключения вычисляются на основе специфических ожидаемых значений и пределов проб КК.

Цвет выделения

Для графического представления можно запрограммировать размер точек, а также соединение точек с помощью полигональной линии.

Опция	Описание
Размер точки	Отдельные точки отображаются в виде кругов. При возрастании значения круг увеличивается.
Точки соединения	Соединение точек графика полигональной линией.

8.2 Вводы и пределы вкладок КК

Содержание вкладок КК задается в окне **КК / Вводы и Пределы** и может быть откорректировано согласно требованиям соответствующей лаборатории в отношении частоты вводов.

Опция	Описание
Схема ввода	Все значения Ввод каждого выполненного контроля качества. 1 знач./день Ввод только последнего контроля качества за день.

Опция	Описание
	2 знач./день Ввод только первого и последнего контроля качества за день. Примечание «День» соответствует одному дню по часам ПК, т.е. в течение дня любые предшествующие вводы во вкладке КК перезаписываются новыми значениями КК, в то время как с началом нового дня создается новая запись.
Номер периода подг.	Для Контрольн. карта: Период подготовки – это количество записей во вкладке КК, которые используются для вычисления пределов контроля (К) и предупреждения (W). Период подготовки всегда содержит старые вводы вкладок. При значении 0 (без периода подготовки) все введенные данные КК будут включены в вычисление контрольного предела и предела погрешности.
Превышение пределов для карты задан. знач.	Только Требуемое знач. карты: Пределы исключения вычисляются из пределов, установленных для проб КК, умноженных на Фактор (по умолчанию 1).

Обновление карт

Определите порядок действий с (почти) полными вкладками. Для этого выберите одну из опций из списка:

Опция	Описание
Принять период подгот., удал. остаток	Для Контрольн. карта: Применение периода подготовки и образование нового периода подготовки для новой вкладки.
Посл. значения -> нов. период подг-ки	Для Контрольн. карта: Последние значения измерения старой вкладки образуют период подготовки новой вкладки, все остальные значения удаляются из вкладки. Оценка новых значений измерения выполняется с учетом заново образованного периода подготовки.
Удалить все, нов. период подг-ки	Все значения удаляются. Для Контрольн. карта: Новые значения измерения заполняют сначала период подготовки.

Щелчок по кнопке **[Процесс]** позволяет обновить вкладки КК согласно вышелевбранной опции.

8.3 Отображение вкладок КК

Вкладки КК отображаются в окне **КК / Карта КК**. Для каждого типа пробы КК, согласованного в методе, и для каждой строки элемента, учитываемой в методе, есть отдельная вкладка.

Опции/Отображение

Опции/Отображение	Описание
Тип	Выбор типа пробы КК для отображения.
Линия	Выбор элементной линии для отображения.
Показанные значения	Количество отображаемых значений и дата первого и последнего отображаемого значения.
Сохраненн. значения	Общее количество вводов на текущей вкладке КК и дата первого и последнего значения.
x(макс)	Установка количества вводов для отображения на графике.

Опции/Отображение	Описание
у-шкала	Записи Максимальное значение у-оси масштабируется по наибольшей записи. Контрольные пределы Максимальное значение у-оси масштабируется по контрольному пределу или пределу исключения.
	Печать графиков контроля качества, включая буквенно-цифровые данные и измеренные значения.

Область графика

Цвет/маркировка	Значение
Желтое поле	Только контрольная вкладка: Период подготовки
Светло-серая горизонтальная линия	Только контрольная вкладка: Среднее значение, рассчитанное за период подготовки Только вкладка целевого значения: Целевое значение
Красные горизонтальные линии	Только контрольная вкладка: Верхний и нижний контрольный предел (К), рассчитанный за период подготовки (3 Sigma). Только вкладка целевого значения: верхний и нижний предел исключения (ВПИ, НПИ) согласно пределам пробы контроля качества
Зеленые горизонтальные линии	Только контрольная вкладка: Рассчитанные пределы предупреждений (W; 2 Sigma)
Маленькие кружки	Точки измерения (черная: активная точка измерения; серая: неактивная точка измерения)

При нажатии на значение измерения на графике открывается окно со следующими данными об этом значении.

Опция	Описание
Number	Номер значения измерения в серии КК
Значение	Значение измерения (пересчитано в соответствии с видом отображения вкладки КК)ю
Дата / Время	Дата и время измерения
Оператор	Пользователь, зарегистрированный в системе на момент измерения.
Версия	Версия используемого метода
Удалить ввод / Активир. ввод	Выделение значения измерения как удаленного или его повторная активация.
Доб. коммент	Ввод комментария для точки измерения, например, причина удаления.

9 Управление и мониторинг прибора и аксессуаров

9.1 Спектрометр

Окно **Спектрометр** предназначено для проверки функций спектрометра и настройки параметров спектрометра.

Можно установить или вызвать для показа следующие данные:

- Данные устройства
- Отображение параметров считывания детектора
- Запуск измерений для оптимизации устройства
- ▶ Откройте окно **Спектрометр** щелчком по значку  или выберите пункт меню **Разраб. метода | Спектрометр**.

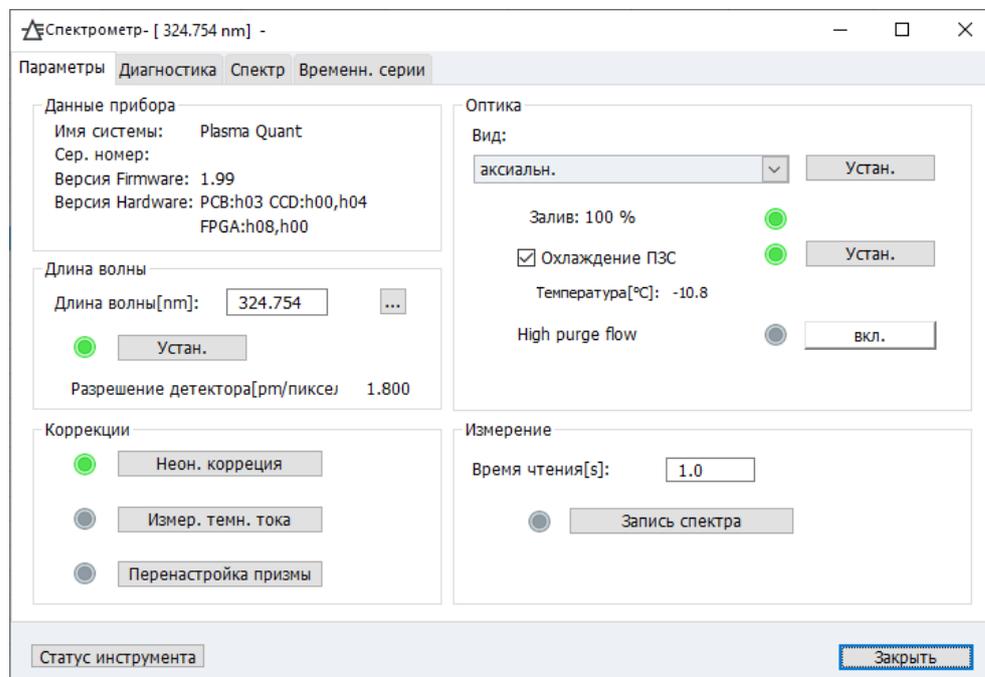
[Статус инструмента] позволяет показать график устройства, на котором отображаются сообщения датчиков безопасности. При возникновении проблем с плазмой здесь можно просматривать сообщения об ошибках датчиков.

9.1.1 Настройка параметров спектрометра и тестирование функций

Окно **Спектрометр / Параметры** содержит следующие функции:

- Контроль основных функций устройства
- Запуск автоматических коррекций на оптической системе
- Запуск тестового измерения на выбранной длине волны

Элементы окна Спектрометр /
Параметры



Параметр	Описание
Данные прибора	В группе Данные устройства отображаются различные сервисные номера и номера версий, необходимые для обслуживания устройства.
Длина волны	В поле Длина волны отображается выбранная длина волны. Настроить длину волны можно после щелчка по значку ... в окне Выбрать элемент/линию .

Параметр	Описание
	При нажатии кнопки [Устан.] спектрометр переключается на выбранную длину волны.
[Неон. коррекция]	Выполнение калибровки длины волны детектора.
[Измер. темн. тока]	Коррекция погашенного сигнала.
[Перенастройка призмы]	Оптимизация изображения порядка дисперсии на детекторе путем юстировки призмы (юстировка до максимальной энергии).
Вид	Выбор направления обзора плазмы из списка (аксиальн. – сверху, радиальн. – сбоку).
Охлаждение ПЗС	Если поле активировано, кнопка [Устан.] позволяет запустить охлаждение CCD-детектора. При снятии флажка охлаждение останавливается. CCD-охлаждение запускается автоматически с розжигом плазмы. Ручное управление необходимо только в исключительных случаях, например, после сообщения об ошибке при автозапуске. В поле Рабочая темп. отображается текущая температура CCD-детектора.
[High purge flow]	Промывка спектрометра повышенным потоком аргона.
Измерение	Для запуска измерения на выбранной длине волны в Измерение задается общее время измерения. Нажатие кнопки [Запись спектра] запускает процесс измерения. Для измерения используются настройки по умолчанию для плазмы. Пробу необходимо подавать вручную. Автосамплер не используется.

Измерение пика спектров на выбранной аналитической линии

Запустите тестовое измерение на выбранной аналитической линии в окне **Спектрометр / Параметры**.

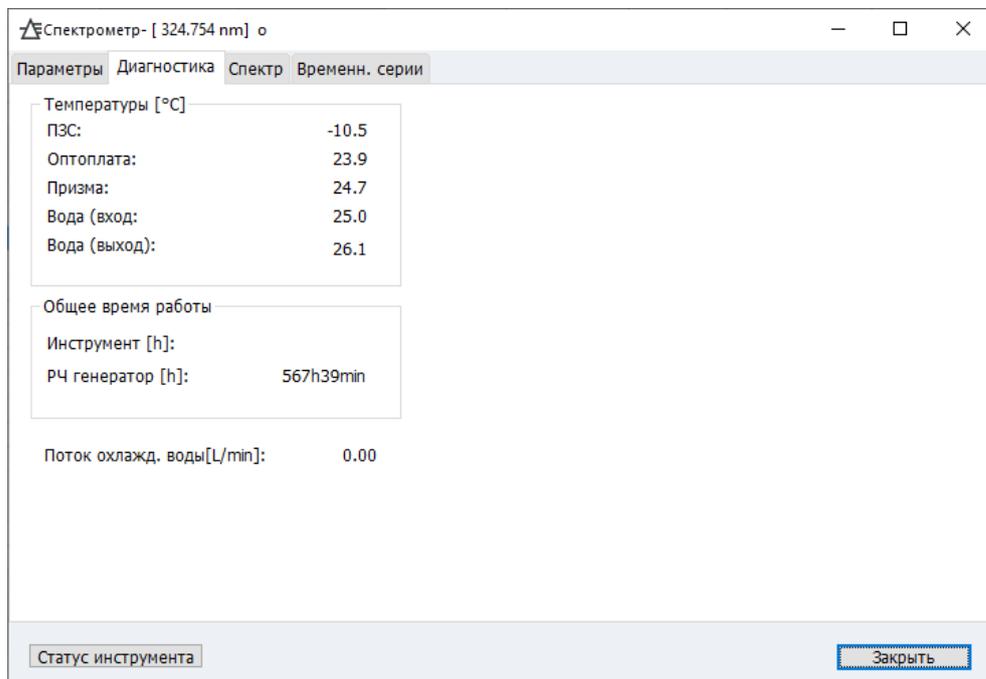
- ▶ Разожгите плазму.
- ▶ В области **Длина волны** щелчком по значку  откройте окно **Выбрать элемент/линию** и настройте нужную линию.
Или введите значение прямо в поле ввода **Длина волны**.
- ▶ Нажав кнопку **[Устан.]**, переведите спектрометр на нужную длину волны. После успешного завершения настройки рядом с настройкой появляется отметка зеленого цвета.
- ▶ Запустите измерение темного тока кнопкой **[Измер. темн. тока]**.
- ▶ Выберите направление обзора для последующего измерения: **аксиальн.** или **радиальн.**
- ▶ Выставьте **Время чтения**.
- ▶ Приготовьте пробу и погрузите всасывающую трубку в пробу.
- ▶ Подождите некоторое время до устойчивого распыления пробы. Запустите измерение кнопкой **[Запись спектра]**.
✓ Производится измерение, а результаты отображаются в окне **Ред. спектр**.

См. также

- 📖 Вставка аналитических линий в таблицу линий [▶ 27]
- 📖 Отображение и редактирование спектров интенсивности [▶ 80]

9.1.2 Диагностика параметров устройства

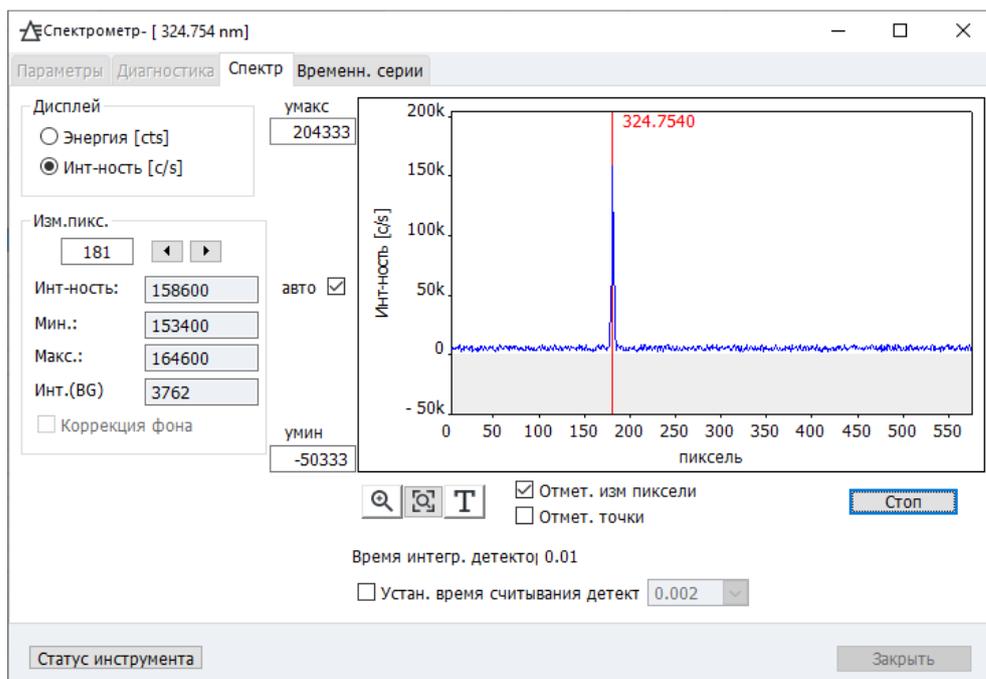
В окне **Спектрометр / Диагностика** отображаются важные для обслуживания параметры.



9.1.3 Непрерывное измерение пика

В окне **Спектрометр / Спектр** запустите непрерывное измерение на заданной длине волны. Непрерывные измерения используются в случае обслуживания для оптимизации устройства.

Графическое представление цифровой оценки в окне **Спектрометр / Спектр**



Опция	Описание
Дисплей	Опции для представления спектра:

Опция	Описание
	<p>Энергия Отображение энергетического спектра, единица измерения: импульсов в сек. Для получения по возможности результатов измерений с малым уровнем шумов время интегрирования для детектора выбирается таким образом, чтобы максимальная энергия составляла ок. 30000 импульсов в сек.</p> <p>Инт-ность Представление энергии на единицу времени, единица измерения: импульсов в сек. По интенсивности различные пики можно сравнивать независимо от времени интегрирования.</p>
Изм.пикс.	<p>Выбор пикселя, значения которого будут непрерывно отображаться в поле Энергия или Инт-ность.</p> <p>В полях Макс. и Мин. отображаются соответствующие результаты непрерывного измерения.</p>
Отмет. изм пиксели	Выделение установленного АНАЛИЗИРУЕМОГО ПИКСЕЛЯ в графике вертикальной красной линией.
Отмет. точки	Выделение точкой значений измерения для каждого пикселя в графике.
Устан. время считывания детектора вручную	<p>Выбор из списка времени считывания для CCD-детектора. Длительное время считывания приводит к более высоким значениям энергии.</p> <p>Настройка времени считывания CCD-детектора по умолчанию составляет 0,01 с.</p>
Масштабирование графика	<p>Непосредственный ввод значений начальной и конечной точки ординаты в полях ввода на осях.</p> <p>Или после активации режима масштабирования значком  выберите область просмотра при нажатой кнопке мыши.</p> <p>Отмена масштабирования осуществляется путем активации опции авто или щелчком по значку .</p>

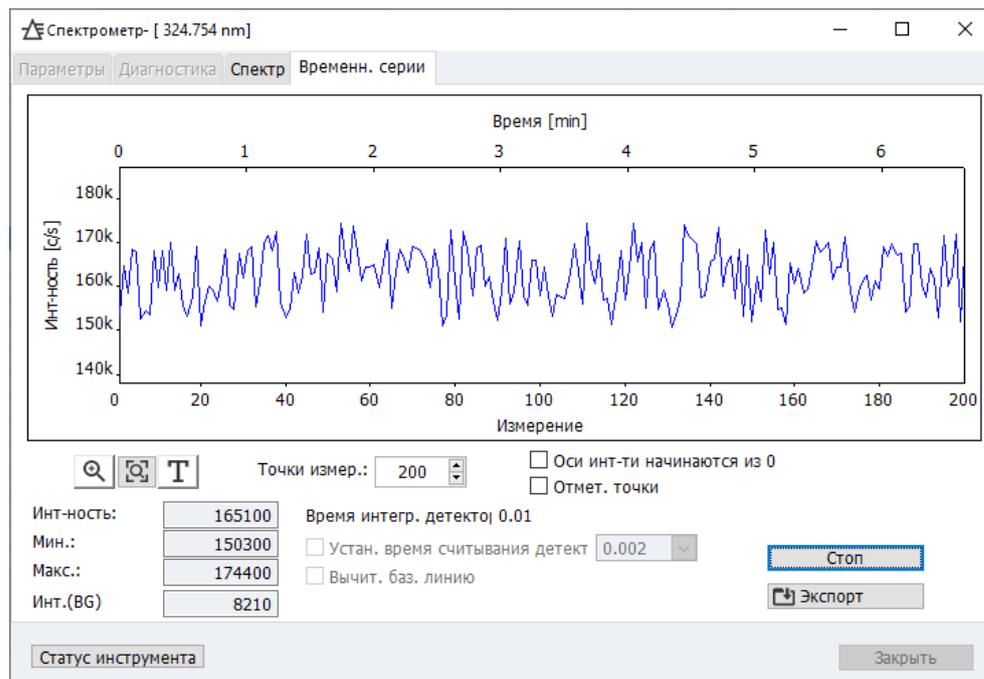
Запуск измерения пика

- ▶ В окне **Спектрометр / Параметры** выставьте длину волны и направление обзора.
- ▶ Перейдите на вкладку **Спектр**.
- ▶ Запустите непрерывное измерение кнопкой **[Старт]**.

Значения измерения записываются с установленными параметрами и непрерывно повторяются до нажатия кнопки **[Стоп]**.

9.1.4 Запись кривой сигнала

В окне **Спектрометр / Временн. серии** посредством выбранного числа точек измерения можно записать кривую сигнала интенсивности для установленной в данный момент в спектрометре длины волны.



Наряду с графическим представлением отображаются цифровые значения текущей интенсивности, достигнутый максимум и минимум интенсивности, а также интенсивность фона.

Для записи кривой сигнала доступны следующие параметры настройки:

Опция	Описание
Шкала	После активации режима масштабирования значком  выберите область просмотра при нажатой кнопке мыши. Выход из режима масштабирования осуществляется щелчком по значку  .
Оси инт-ти начинаются из 0	Не автоматическая настройка масштабирования y-оси, а установка начала на «0».
Точки измер.	Выбор количества точек измерения из списка.
Режим отметки	Точки измерения выделяются в графике точками.
Устан. время считывания детектора вручную	Выбор из списка времени считывания для CCD-детектора.
Вычит. баз. линию	Отображаются значения интенсивности с откорректированным фоном.

9.2 Плазма

Окно **Плазма** содержит следующие функции:

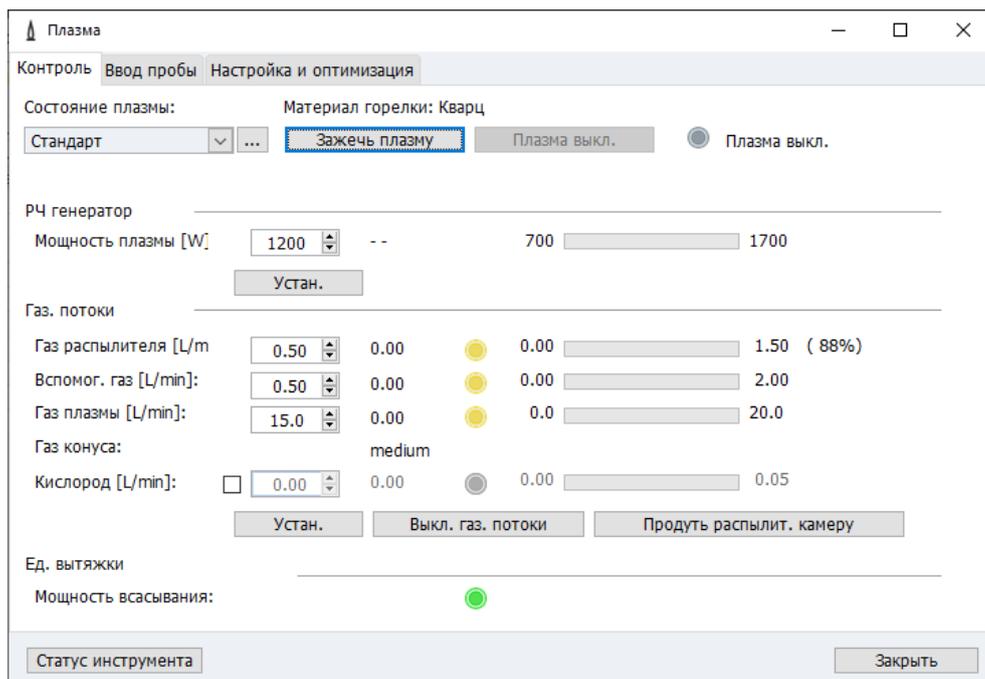
- Розжиг/ гашение плазмы
- Контроль ВЧ-генератора
- Настройка газовых потоков
- Контроль насоса анализатора
- Юстировка передающей оптики
- Автоматическая оптимизация потока газа в распылителе и мощности плазмы
- ▶ Откройте окно **Плазма** щелчком по значку  в строке символов или выберите пункт меню **Разраб. метода | Плазма**.

Нажатие кнопки **[Статус инструмента]** позволяет показать график устройства, на котором отображаются сообщения датчиков безопасности ИСП-ОЭС. При возникновении проблем с плазмой здесь можно просматривать сообщения об ошибках датчиков.

9.2.1 Розжиг плазмы и настройка условий для плазмы

В окне **Плазма / Контроль** можно разжечь и погасить плазму и настроить газовые потоки в устройстве.

Функции в окне Плазма / Контроль



Опция	Описание
Состояние плазмы	Выбор условий для плазмы (мощность плазмы и газовые потоки).
[Зажечь плазму] / [Погасить плазму]	Розжиг и гашение плазмы при подготовленном ИСП-ОЭС.
РЧ генератор	Выставка эффективной мощности плазмы. Мощность плазмы задает температуру плазмы. Встроенное ПО устройства регулирует ток генератора таким образом, чтобы достичь эффективной мощности плазмы.
Газ. потоки	Включение и выставка газовых потоков. Газ плазмы Плазмообразующий газ поступает по внешней трубке и предназначен для генерирования плазмы. Газ распылителя Газ распылителя распыляет пробу и переводит аэрозоль пробы в плазму. Патрубок подключен к распылителю. Процентное значение в строке газа распылителя позволяет увидеть, насколько проницаемым/чистым является распылитель (см. ниже) Вспомог. газ Вспомогательный газ отталкивает плазму от инжектора и протекает между внутренней трубкой и инжектором.

Опция	Описание
	<p>Газ конуса Газ конуса удаляет «холодный» шлейф плазмы, чтобы устранить интерференции на основании повторного сочетания в плазме в осевом направлении обзора. Одновременно газ конуса поддерживает охлаждение конуса.</p> <p>Кислород Кислород можно добавлять в газ распылителя как дополнительный газ для выбранных задач. Опцию потока кислорода необходимо активировать флажком перед настройкой газа, прежде, чем его можно будет изменить.</p>
[Выкл. газ. потоки]	Закрытие всех газовых клапанов.
[Продуть распылит. камеру]	Газ распылителя включается на 1 минуту, чтобы сдуть воздух из распылительной камеры. Тем самым облегчается процесс розжига плазмы после прерывания эксплуатации. В этом время на экране идет обратный отсчет.
Мощность всасывания	Контур безопасности проверяет, достаточно ли мощности подключенной вытяжки для работы ИСП-ОЭС. Если мощности достаточно, индикатор загорается зеленым цветом.

Кнопка [Устан.] позволяет настроить измененные параметры (мощность плазмы и газовые потоки) на ИСП-ОЭС.

Оценка распыляющей функции

Если распылитель забился из-за высокого содержания частиц или солей в пробе, его необходимо почистить. Признаком засорения распылителя является повышенное давление газа распылителя.

Сравните текущее процентное значение (давление) параметра **Газ распылителя** со значением, которое было достигнуто после установки нового или почищенного распылителя.

Почистите распылитель, как описано в руководстве по эксплуатации ИСП-ОЭС, если процентное значение резко возросло (более чем на половину от исходного значения), но не позднее момента, когда значение достигнет 75 %.

Выбор условий для плазмы

Список **Состояние плазмы** содержит сохраненные параметры плазмы для различных матриц пробы и, при загруженном методе, специфичные для линии параметры метода.

Щелчок по значку **...** открывает контекстное меню с функциями по управлению выбранными в списке параметрами:

Функция	Описание
Сохранить текущие параметры плазмы	Сохранение установленных условий для плазмы (мощность плазмы и газовые потоки) и добавление их в список.
Удалить ввод	Удаление выбранной записи. Настройки по умолчанию Стандарт , Керосин и Hydride technique удалить нельзя.
Установить состояние плазмы	Настройка параметров плазмы выбранной записи на ИСП-ОЭС.
Копировать в линию метода	Доступно, если в списке выбрана линия метода. Переносит условия для плазмы в параметры метода выбранной линии.
Копировать во все линии метода	Доступно, если в списке выбрана линия метода. Переносит условия для плазмы в параметры метода всех линий.

Функция	Описание
Сохранение как метод по умолчанию	Сохранение текущих условий для плазмы как предустановленных значений для новых добавляемых в метод линий (не для избранных линий).

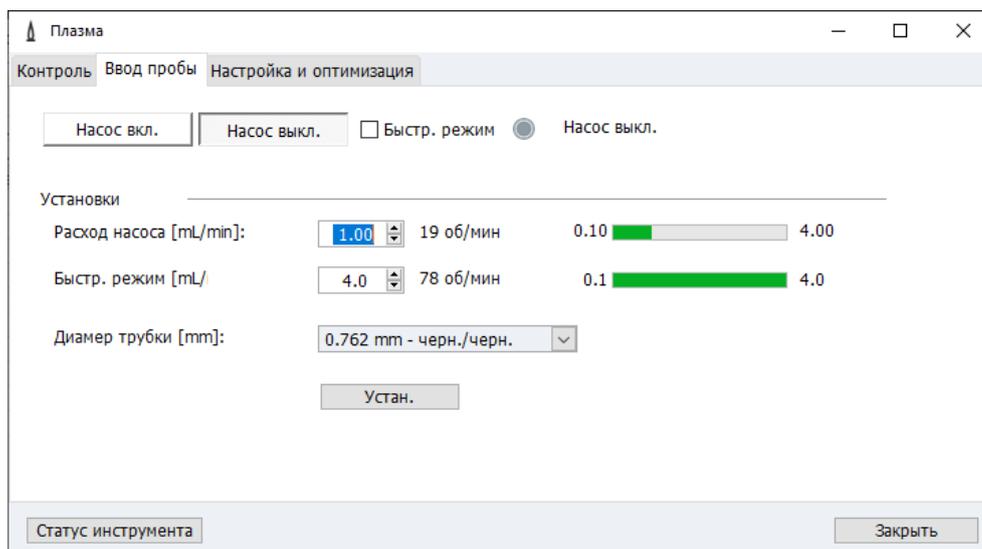
См. также

 Розжиг и гашение плазмы [▶ 64]

9.2.2 Контроль подачи проб на насос

В окне **Плазма / Ввод пробы** можно проконтролировать функцию перистальтического насоса на ИСП-ОЭС.

Функции в окне Плазма / Ввод пробы

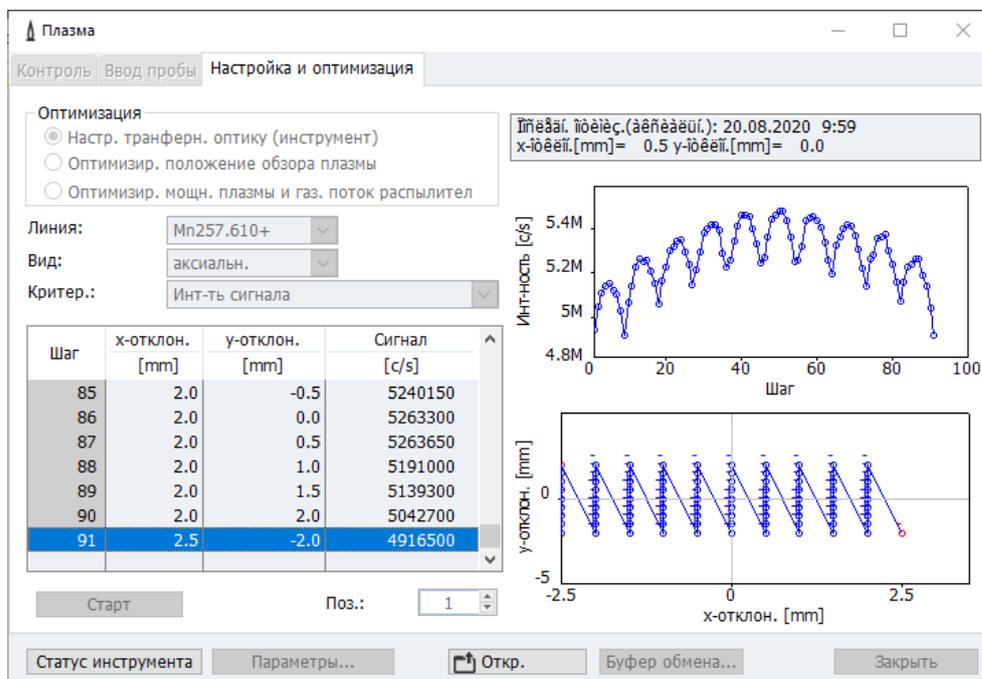


Функция/ параметр	Описание
[Насос вкл.]/ [Насос выкл.]	Включение и выключение насоса. В исходном состоянии после включения ИСП-ОЭС насос включен.
Быстр. режим	Переключение насоса вручную на ускоренный ход. Функцию можно использовать для ручной промывки системы подачи проб. После выполненной промывки флажок в контрольном поле можно снять, чтобы снова переключить насос на подачу проб.
Скорость нагнетания	Текущая скорость вращения вала насоса отображается в единице об/мин (оборотов в минуту).
Расход насоса	Настройка скорости нагнетания для транспортировки во время измерения.
Быстр. режим	Настройка скорости нагнетания для ускоренного хода. Ускоренный ход позволяет оптимизировать время транспортировки при смене пробы или время транспортировки промывочного раствора на распылитель.
Диаметр трубки	Выбор используемой трубки из списка. По информации о скорости вращения вала насоса высчитывается транспортируемое количество пробы (скорость нагнетания). Стопоры трубок имеют цветовую кодировку. Выберите из списка сочетание стопоров для используемой трубки.
[Устан.]	Применение настроек.

9.2.3 Юстировка и оптимизация плазмы

В окне **Плазма / Настройка и оптимизация** выполните следующие юстировки:

- Ориентация передающей оптики на оптические оси спектрометра
- Определение значений смещения передающей оптики для аналитической линии из метода
- Оптимизация мощности плазмы и потока газа распылителя



Для юстировки и оптимизации доступны два разных метода, которые можно выбрать щелчком по кнопке **[Параметры]** :

Способ	Описание
Поиск решетки	Область сканируется по сетке. Из числа точек измерения вычисляется число с самой высокой интенсивностью. Юстировка точная, однако из-за вычисления большого числа точек измерения занимает много времени.
Симплекс-оптимизация	Максимальная энергия определяется многократно. По стартовой точке измерения определяется точка измерения с самым высоким значением в окружности. Исходя из этой точки измерения, снова определяется точка измерения с наивысшей энергией. Процедура повторяется до нахождения максимальной энергии. Эта процедура быстрее поиска решетки, но немного менее надежна. В различных горячих зонах плазмы может возникать несколько максимумов энергии, и при неблагоприятной стартовой точке будет найден неправильный максимум энергии. Для симплексного метода необходимо задать Критерий остановки в виде процентного значения. Если 3 значения подряд не отличаются друг от друга на более чем это процентное значение, юстировка заканчивается. Если активирована опция начать с оптимизир. значениями , как стартовые значения для текущей оптимизации будут использоваться оптимизированные параметры последней юстировки/оптимизации.

Для юстировки передающей оптики (устройство) в качестве критерия используется интенсивность сигнала.

Критерий для оптимизации выставляется автоматически в зависимости от длины волны аналитической линии, однако его можно изменить вручную:

Критерий	Спектральная область аналитических линий
Инт-ть сигнала	< 200 Нм
Сигнал/фон	200 – 350 Нм
Сигнал/квадр. корень фона	> 350 Нм

Юстировка передающей оптики относительно оптических осей (средние точки плазмы)

Юстировка передающей оптики относительно оптических осей осуществляется с раствором Mn. Подготовьте для юстировки растворы Mn следующей концентрации:

Направление обзора	Раствор Mn
аксиальн.	1 мг/л
радиальн.	10 мг/л

- ▶ Активируйте опцию **Настр. трансферн. оптику (инструмент)**.

Аналитическая линия Mn выставляется в списке **Линия** автоматически.

- ▶ В **[Параметры]** выберите метод юстировки (см. выше).
- ▶ Выберите направление обзора:

Опция	Описание
аксиальн.	Обзор сверху
радиальн.	Обзор сбоку
ослаблено аксиальн.	Обзор ослабленной энергии сверху
ослаблено радиальн.	Обзор ослабленной энергии сбоку
закрыт.	Обзор при закрытой заслонке (в целях обслуживания)

- ▶ Погрузите всасывающую трубку в пробу. При использовании автосамплера выставьте позицию на штативе для проб.
- ▶ Нажмите кнопку **[Старт]**.

Юстировка передающей оптики выполняется автоматически. В конце процедуры юстировки отображаются новые данные.

- ▶ Примените новые значения юстировки щелчком по кнопке **[OK]**.

Оптимизация позиции обзора для аналитической линии активированного метода

Плазма имеет участки разной температуры нагрева. При этой оптимизации определяется точка обзора в плазме, при котором аналит показывает наибольшую интенсивность сигнала. Значения сохраняются в методе как **Отклон.**

- ▶ В списке **Линия** выберите аналитическую линию из метода.
- ▶ Активируйте опцию **Оптимизир. положение обзора плазмы**. Автоматически будет применено значение для направления обзора из метода и будет создан критерий для оптимизации (см. выше).
- ▶ В **[Параметры]** выберите метод юстировки (см. выше).
- ▶ Погрузите всасывающую трубку в пробу. При использовании автосамплера выставьте позицию на штативе для проб.
- ▶ Нажмите кнопку **[Старт]**. Юстировка позиции обзора выполняется автоматически. В конце отображаются оптимизированные значения смещения.

Оптимизация условий для плазмы для пробы

- ▶ Примените новые значения смещения к методу щелчком по кнопке **[OK]** .

После определения позиции обзора аналита в пробе вы можете оптимизировать условия для плазмы (мощность плазмы и поток газа распылителя).

- ▶ Активируйте опцию **Оптимизир. мощн. плазмы и газ. поток распылителя**.
- ▶ В списке **Линия** выберите аналитическую линию из метода.

Автоматически будут применены предыдущие условия для плазмы из метода и выставится критерий для оптимизации (см. выше).

- ▶ В **[Устан.]** выберите метод юстировки (см. выше).
- ▶ Погрузите всасывающую трубку в пробу. При использовании автосамплера выставьте позицию на штативе для проб.
- ▶ Нажмите кнопку **[Старт]**.
Оптимизация мощности плазмы и потока газа распылителя выполняется автоматически. В конце отображаются оптимизированные значения.
- ▶ Примените новые значения к методу щелчком по кнопке **[OK]** .

9.3 Автосамплер

Автосамплер является дополнительным аксессуаром. Он распознается при инициализации в окне настроек по умолчанию после запуска программы ASpect PQ.

Окно **Автосамплер** содержит следующие функции:

- Отображение типа подключенного автосамплера
- Настройка автосамплера
- Юстировка автосамплера
- Дополнительная промывка путей подачи проб
- Повторная инициализация автосамплера
- Выполнение самотестирования

Параметры, непосредственно относящиеся к анализу (распределение на штативе для проб и этапы промывки) задаются в методе, последовательности и данных, определяющих пробу.

- ▶ Откройте окно **Автосамплер** щелчком по значку  в строке символов или выберите пункт меню **Разраб. метода | Автосамплер**.

Инициализация автосамплера

Обычно инициализация автосамплера выполняется при включении кнопки питания. Повторная инициализация может потребоваться, если автосамплер утратил свою ориентацию, например, из-за механического удара. При этом устанавливается соединение между автосамплером, ИСП-ОЭС и ПК.

- ▶ Щелчок по кнопке **[Re-home ASXpress+ after disassembling for cleaning]** позволяет при необходимости выполнить повторную инициализацию автосамплера без перезапуска программы ASpect PQ.

Распознавание автосамплера

Если автосамплер был включен только после запуска ASpect PQ, необходимо зарегистрировать процедуру использования автосамплера в программе.

- ▶ Для этого нажмите кнопку **[Детект.]** , после чего кнопку **[Re-home ASXpress+ after disassembling for cleaning]**.

Примечание: При использовании Cetac ASX-560 с системой разбавления кнопка **[Детект.]** недоступна.

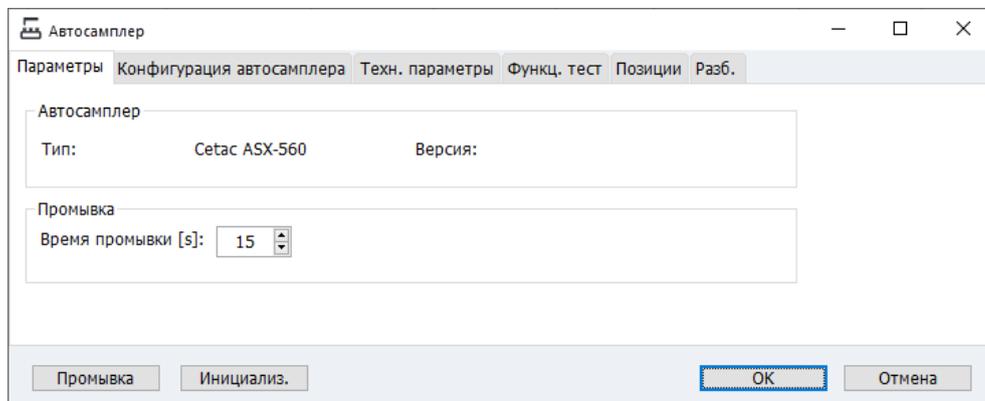
- Промывка путей подачи проб
- ▶ В окне **Автосамплер / Параметры** выставьте **Время промывки** .
Предустановка для продолжительности промывки будет применена к текущему методу.
 - ▶ Нажмите кнопку **[Промыв.]**.
Или выберите пункт меню **Процедура | Промыв..**
 - ✓ Пути подачи проб (трубки-распылитель-распылительная камера-горелка) промываются в течение заданной продолжительности промывки на ускоренном ходу насоса.

9.3.1 Отображение подключенного автосамплера

В окне **Автосамплер / Параметры** отображаются и настраиваются следующие параметры:

- Тип автосамплера
- Параметры промывки

Окно Автосамплер /параметры



Тип автосамплера

В окне **Автосамплер / Параметры** отображается распознанный в процессе инициализации тип автосамплера и версия встроенного ПО автосамплера.

Параметры промывки

Продолжительность промывки системы пути подачи пробы от сосуда для проб до горелки применяется из текущего метода. В свою очередь, изменения в окне **Автосамплер / Параметры** не влияют на записи в методе. Во время промывки системы с применением автосамплера промывочный раствор забирается при этом из промывочной емкости автосамплера.

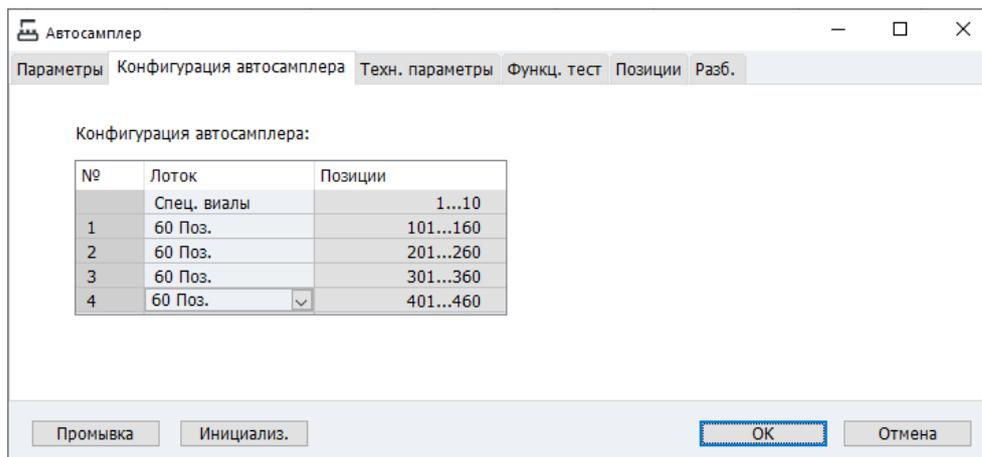
См. также

- 📄 Настройки транспортировки проб – окно Метод / Подача пробы [▶ 33]

9.3.2 Настройка штатива для проб

В окне **Автосамплер / Конфигурация автосамплера** выставьте используемые на автосамплере штативы для проб.

Окно Автосамплер/ настройка штатива



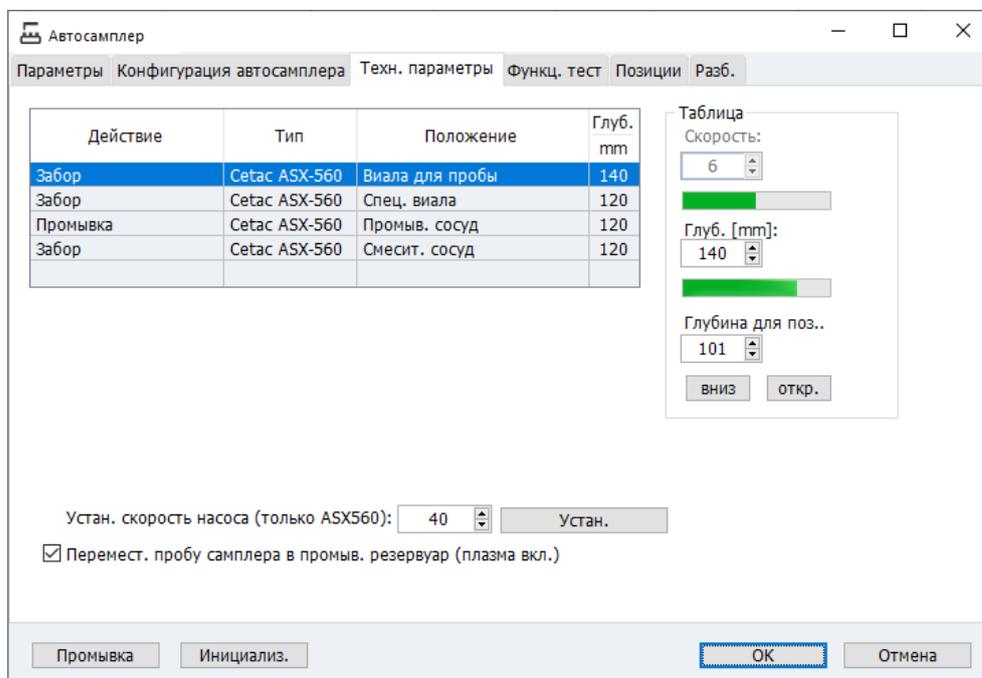
В зависимости от используемого автосамплера, можно разместить различные штативы для проб и штативы со специальными пробами.

В таблице выберите штативы для проб. Для переменных штативов для проб как номера позиций предусмотрены трехзначные числа. Первая цифра обозначает положение штатива для пробы на автосамплере, две другие – позицию на штативе для проб. Так, например, номер 113 означает позицию 13 на штативе для проб 1. Переменный штатив для проб 1 расположен на автосамплере перед промывочной емкостью, далее следуют штативы для проб 2 и 3.

9.3.3 Технические параметры автосамплера

В окне **Автосамплер / Техн. параметры** задайте параметры глубины погружения канюли в различные емкости.

Окно Автосамплер / Техн. параметры



Для отдельных типов сосудов в расчет принимаются следующие действия:

Сосуд	Действие
Виалы для пробы	Забор проб посредством перистальтического насоса.
Спец. виалы	Забор специальных проб посредством перистальтического насоса.
Промыв. сосуд	Промывка канюли и пути забора.

Элементы таблицы действий

Опция	Описание
Действие	Доступные действия: Забор Забор пробы из емкости для подачи на горелку. Промывка Забор промывочного раствора.
Тип	Подключенная модель автосамплера
Положение	Сосуд, к которому относится действие
Глуб.	Глубина погружения канюли в мм

Поле Таблица

Используя элементы управления в области **Таблица**, измените параметры выделенной строки таблицы.

Опция	Описание
Глуб.	Выставка глубины погружения канюли. Глубина погружения измеряется, начиная от самой высокой позиции рычага самплера.
Глубина для поз..	Позиция специального сосуда или сосуда для проб, с которым проверяется глубина погружения.
Устан.	Если активировано, рычаг автосамплера перемещается над сосудом, для которого необходимо изменить позиционирование. Для сосудов для проб и специальных сосудов это позиция пробы, установленная в поле Глубина для поз.. Если не активировано, глубина погружения и скорость изменяются без перемещения рычага над сосудом.

Дополнительные опции

Если активирована опция **Перемест. пробу самплера в промыв. резервуар (плазма вкл.)**, после закрытия окна канюля автоматически погружается в промывочную емкость.

Только ASX-560: выставка скорости промывочного насоса (ступени: 0...99). При нажатии кнопки **Устан.** это значение будет постоянно сохраняться в автосамплере.

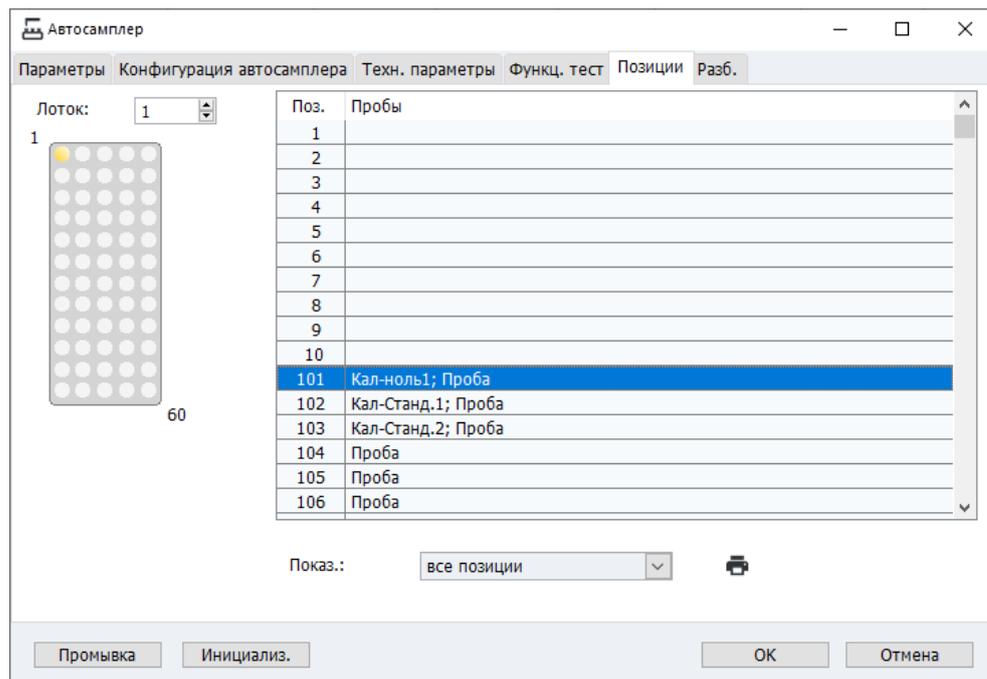
9.3.4 Отображение позиций проб на автосамплере

В окне **Автосамплер / Позиции** отображаются используемые в текущей последовательности позиции автосамплера.

Доступны три опции для просмотра: **все позиции, только позиции пробы и только спец. позиции**.

Рядом с таблицей отображается схематический вид штатива для проб с выделенной в данный момент позицией пробы. Позицию пробы можно выделить как на схеме, так и в таблице.

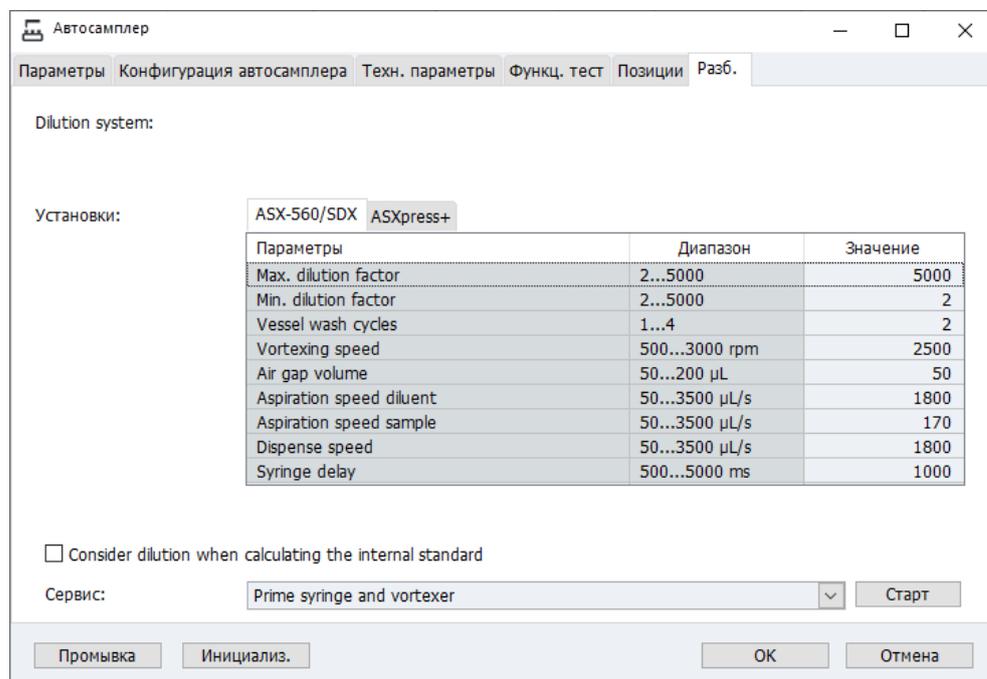
Окно Автосамплер / Позиции



9.3.5 Функция разбавления

Параметры разбавления пробы при использовании автосамплера Cetac ASX 560 с Cetac SDX_{HPLD} отображаются в окне **Автосамплер / Разб.** .

Окно Автосамплер / разбавление



Установки

Параметры в области **Установки** содержат предустановки, которые обеспечивают хорошие результаты разбавления проб. Вы можете варьировать параметры для оптимизации метода в рамках диапазонов установки.

Отдел обслуживания

В списке **Сервис** можно выбрать функции обслуживания на SDX_{HPLD} и запустить их выполнение кнопкой **[Старт]** :

Опция	Функция
Prime syringe and vortexer	Промывочная жидкость шприцевым насосом подается по системе и выводится в вихревой смеситель. Тем самым из системы удаляются пузырьки воздуха и климатизируется вихревой смеситель.
Move syringe to removal position	Если в рамках технического обслуживания шприцевой насос необходимо демонтировать, при помощи этой функции нужно заранее перевести поршень шприца в правильное положение.
Re-home ASXpress+ after disassembling for cleaning	Только при установленном ASXpress+: Инициализация ASXpress+ после установки или обслуживания.

9.4 Рециркуляционный охладитель

В охлаждающем контуре в ИСП-ОЭС работает клапан, который открывает и закрывает контур. Поэтому замена охлаждающей воды поддерживается программным мастером.



ПРИМЕЧАНИЕ

Учитывайте инструкции по обслуживанию циркуляционного охладителя и по подготовке охлаждающей воды в руководство по эксплуатации ИСП-ОЭС.

- ▶ Выберите пункт меню **Прочее | Обслуживание**.
- ▶ В окне **Обслуживание** запустите замену охлаждающей жидкости щелчком по кнопке **[Изменить]**.
- ▶ Следуйте инструкциям мастера.

10 Управление данными

В данном разделе приведена следующая информация:

- Параметры печати
- Управление методами и последовательностями
- Управление данными результатов
- Определение единиц концентраций и содержания
- Управление данными слишком часто используемых базовых растворов и проб КК

10.1 Функции печати в ASpect PQ

ASpect PQ имеет большое количество форматов вывода данных. Наряду с выводом на принтер данные можно экспортировать в форматах Excel, PDF, HTML; XML или в текстовом формате или сохранить как битовое отображение или в виде масштабируемых графиков.

Для вывода результатов анализов и содержимого окон (например, окна **Метод** или **Пос-ть**) используются шаблоны отчетов. По умолчанию установлен набор шаблонов отчетов. При необходимости шаблоны отчетов можно адаптировать согласно индивидуальным требованиям с помощью редактора отчетов "Report-/Print module List & Label".

10.1.1 Печать данных результатов

ASpect PQ предоставляет различные возможности вывода на печать результатов измерений:

- Печать всего отчета. Полный отчет анализа содержит параметры метода, результаты калибровки и анализа с индивидуальными значениями выборки (статистические измерения). Можно распечатать отчет о текущих результатах главного окна и о сохраненных данных.
- Печать текущих результатов. В эту распечатку выводятся только данные главного окна. Можно выбрать полную или компактную распечатку.
- Печать выбранных данных вкладки **Обзор**. Для этой распечатки можно выбрать в диалоговом окне аналитические линии и результаты.

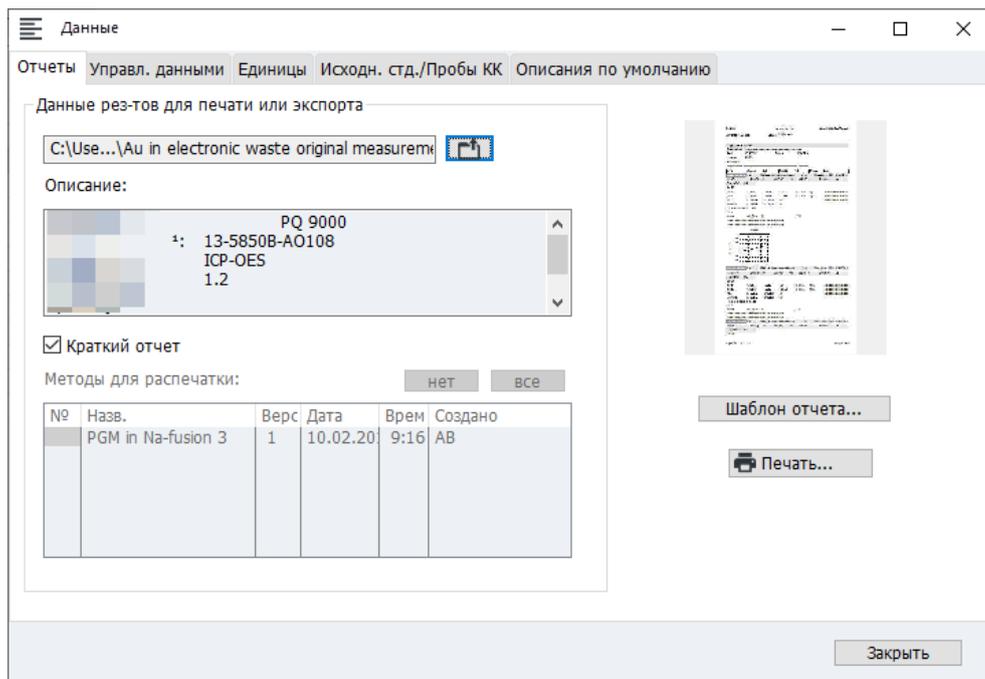
Распечатка всего отчета

Полный отчет анализа содержит параметры метода, результаты калибровки и анализа с индивидуальными значениями выборки (статистические измерения). Полный отчет можно распечатать из результатов в главном окне, а также из сохраненных файлов.

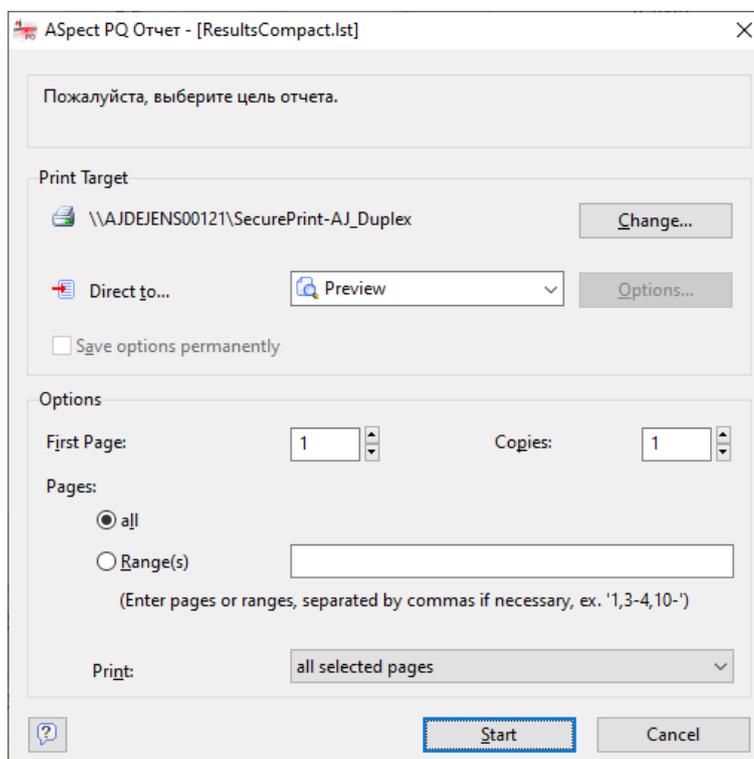
- ▶ Откройте окно **Данные / Отчеты**, щелкнув по значку . Или используйте для открытия окна команды меню **Прочее | Данные** или **Файл | Печать | Отчет**.

Отображаются имя текущего файла, информация о файле (список **Описание**), а также все версии методов, которые использовались для генерирования текущего файла результатов.

Окно Данные / Отчеты с выбором данных результатов для печати



- ▶ Если необходимо распечатать сохраненный файл, с помощью значка  откройте стандартное окно **Открыть** и выберите нужный файл.
- ▶ В таблице отметьте все версии методов, которые необходимо распечатать. Нажав и удерживая клавишу Shift или Ctrl, щелкните по версии метода, который необходимо выделить. Кнопка **[все]** позволяет выделить все версии, кнопка **[(нет)]** –снять все выделения.
- ▶ Кнопкой **[Печать]** откройте окно **ASpect PQ Отчет** с выбором форматов вывода.



- ▶ При необходимости измените в открывшемся окне в списке **Direct to** формат вывода и с помощью кнопки **[Options]** установите специальные параметры формата вывода.

- ▶ Активируйте флажок в поле ниже, если вы хотите сохранить выбранный носитель данных по умолчанию для этого шаблона для печати.
- ▶ Запустите печать кнопкой **[Start]**.



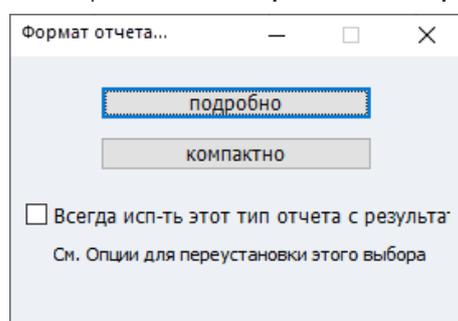
ПРИМЕЧАНИЕ

Используйте настройки печати. При нажатии кнопки **[Start]** выводимые на печать страницы сначала отображаются в окне предварительного просмотра. Так предварительно можно проверить, какие данные будут выводиться на печать: все нужные данные или также ненужные.

Печать текущих результатов

Отображаемые в главном окне результаты можно распечатать:

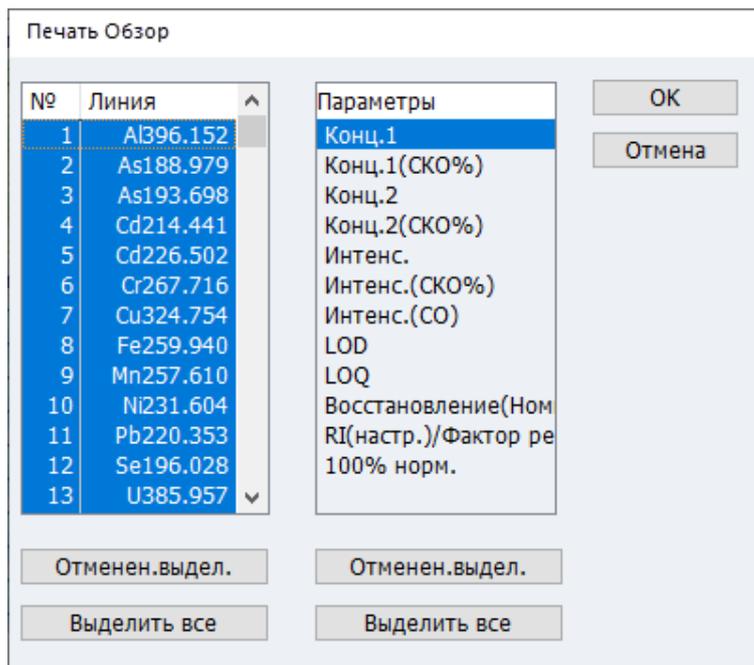
- ▶ Активируйте в главном окне вкладку результатов, содержимое которой нужно распечатать.
- ▶ Запустите печать командой меню **Файл | Печать | Активн. окно**. Откроется окно **Формат отчета с результатами**.



- ▶ Нажмите кнопку **[Полный]**, если нужно распечатать результаты с кривыми сигнала. Выберите **[компактно]** для печати результатов в виде компактного обзора. Если в окне вывода результатов установить флажок в поле **Всегда исп-ть этот тип отчета с результатами** и после этого нажать кнопку **[Полный]** или **[компактно]**, при следующей печати результатов это окно больше не будет показываться, будет автоматически использоваться последний тип отчета о результатах. Снова сбросить эту настройку можно в окне **Опции / Вид**.
- ▶ Продолжайте, как описано выше в разделе "Печать полного отчета".

Печать выбранных файлов

- ▶ В главном окне перейдите во вкладку **Обзор**.
- ▶ В нижней области этой вкладки щелкните по значку или выберите пункт меню **Файл | Печать | Активн. окно**. Откроется окно **Печать Обзор**.



- ▶ Выделите все необходимые линии и параметры для печати и подтвердите выбор кнопкой **[OK]**.
Откроется окно **ASpect PQ Отчет**.
- ▶ Продолжайте, как описано выше в разделе "Печать полного отчета".

См. также

- 📖 Возможности отображения [▶ 133]

10.1.2 Печать других параметров анализа и установок

Из соответствующего окна можно распечатать следующие параметры и настройки анализа:

- Метод
- Последовательность
- Данные результатов во вкладке **Обзор** в главном окне
- ID пробы
- КК (Вкладки КК)
- Градуировка
- Позиции автосамплера
- ▶ Активируйте окно, содержимое которого необходимо распечатать, на рабочем столе ASpect PQ.
- ▶ Начните печать параметров, нажав на символ  в окне.
Или вызовите команду меню **Файл | Печать | Активн. окно**.
Откроется окно **ASpect PQ Отчет**.
- ▶ При необходимости измените в открывшемся окне в списке **Direct to** формат вывода и при помощи кнопки **[Опции]** установите специальные параметры формата вывода.
- ▶ Запустите печать кнопкой **[Start]**.

10.1.3 Шаблоны отчетов

Использование режима разработки отчета

Шаблоны отчетов, установленные по умолчанию, можно изменить (адаптировать). Для лучшего обзора вид отчета можно отредактировать, используя фактические значения.

- ▶ Активируйте пункт меню **Файл | Отчет режим разработки**.
- ▶ Откройте окно, шаблон которого нужно изменить в отчете.
- ▶ В открывшемся окне щелкните (если имеется), по значку . Или выберите пункт меню **Файл | Печать | Активн. окно**.
- ▶ Подтвердите контрольный вопрос о редактировании шаблона отчета, нажав кнопку **[Да]**. Откроется разработчик отчета.
- ▶ Сделайте необходимые изменения и сохраните измененный шаблон отчета.
- ▶ Привяжите шаблон отчета к соответствующему содержанию печати (см. раздел «Изменение назначений»).

Краткое руководство по использованию разработчика отчета

Отдельные компоненты шаблона отчета называются объектами. Например, таблица может состоять из объектов для строки заголовка, значений списка и графика.

В свою очередь эти объекты содержат информацию для печати и относящиеся к ней характеристики макета, такие как шрифты, ориентация, переносы, цвета и т.д.

Разработчик отчета предоставляет различные типы объектов, например, текстовые объекты, графики, штрих-коды. Их можно произвольным образом расположить на рабочем поле и изменить их размер. В зависимости от типа объекта он может отображать различную информацию или иметь различные характеристики.

Перемещение требуемых объектов в рабочую область, как правило, выполняется с помощью кнопки мыши и затем они получают соответствующее содержимое и характеристики макета. В качестве альтернативы можно перенести переменные из списка переменных в рабочую область с помощью использования функции "Перетащить и вставить". Если в заданной позиции все еще нет объекта, объект создается автоматически и ему присваивается переменная.

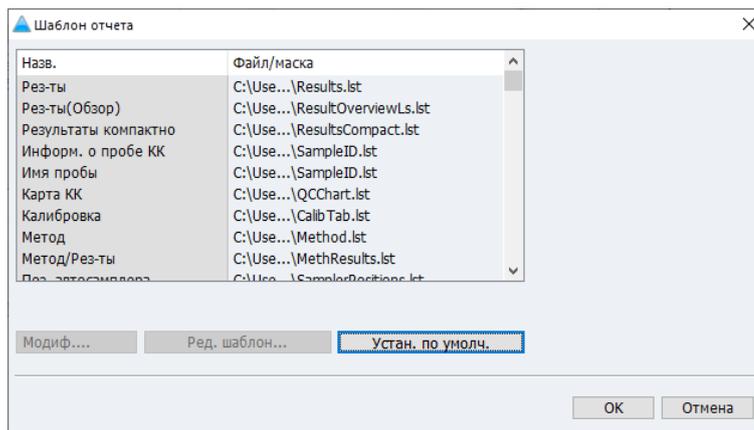
Чтобы отредактировать существующий объект, необходимо сначала выделить его. Для этого щелкните по объекту левой кнопкой мыши. Выбранный объект будет выделен рамкой. При создании нового объекта он будет автоматически выбран и можно будет непосредственно изменить его размер и положение. Двойным щелчком мыши запускает диалоговое окно, с помощью которого можно изменить дальнейшие настройки.

Дополнительная информация по работе с разработчиком отчетов и его функциям приведена в руководстве `designer_deu.pdf` / `designer_eng.pdf` на компакт-диске, поставляемом с ПО ASpect PQ.

Окно Шаблон отчета

В окне **Шаблон отчета** можно редактировать шаблоны и назначать их окнам ASpect PQ. Одному окну можно назначить несколько шаблонов с помощью файловой маски, из которой при запуске печати выбирается нужный шаблон.

- ▶ С помощью кнопки  откройте окно **Данные / Отчеты**.
- ▶ Нажмите кнопку **[Шаблон отчета]**.



Шаблон должен быть готов для следующих окон:

Имя	Описание
Рез-ты	Содержание вкладки Рез-ты в главном окне
Результаты компактно	Компактный обзор результатов
Результаты (Обзор)	Содержание вкладки Обзор в главном окне
Калибровка	Калибровка анализа: Окно Калибровка
Метод	Параметры метода: Окно Метод
Метод / Рез-ты	Весь отчет
Поз. автосамплера	Заполнение автосамплера: Окно Автосамплер / Положиции
Имя пробы	Данные с информацией о пробах Окно Имя пробы / Инф. о пробе
Карта КК	Данные вкладок КК: Окно КК
Информ. о пробе КК	Информационные данные проб КК: Окно Имя пробы / Информ. о пробе КК
Послед-ть	Последовательность: Окно Послед-ть

Изменение назначений

- ▶ В окне **Шаблон отчета** выделите окно, шаблон отчета которого необходимо изменить.
- ▶ Кнопкой **[Модиф.]** откройте диалоговое окно для назначения файлов.
- ▶ Если необходимо назначить только один шаблон отчета, активируйте опцию **Использ. файл шаблона отчета (*.lst)** и выберите нужный файл, щелкнув по значку .
- ▶ Если в начале печати предлагается одновременно несколько отчетов, активируйте опцию **Разрешить выделение файла (маска, напр. c:\Reports\Results*.** Введите имя маски в поле ввода с помощью замещающих знаков.
- ▶ Подтвердите настройки кнопкой **[OK]**.

Редактирование шаблона отчета

- ▶ В окне **Шаблон отчета** выделите окно, шаблон отчета которого необходимо отредактировать.
- ▶ С помощью кнопки **[Ред.]** откройте окно **Разработчик отчета**.
- ▶ Дополнительная информация по разработчику отчетов приведена в руководстве designer_deu.pdf / designer_eng.pdf на компакт-диске, поставляемом с ПО ASpect PQ.

Восстановление стандартных настроек ► Для восстановления стандартных настроек после установки программы ASpect PQ нажмите кнопку **[Устан. по умолч.]**.

10.2 Управление данными для всех типов данных в ASpect PQ

Существует несколько способов управления данными в ПО ASpect PQ.

Методы, последовательности и модели коррекции сохраняются в базе данных по отдельности. База данных методов получает обозначение "method.tps". База данных последовательностей получает обозначение sequ.tps.

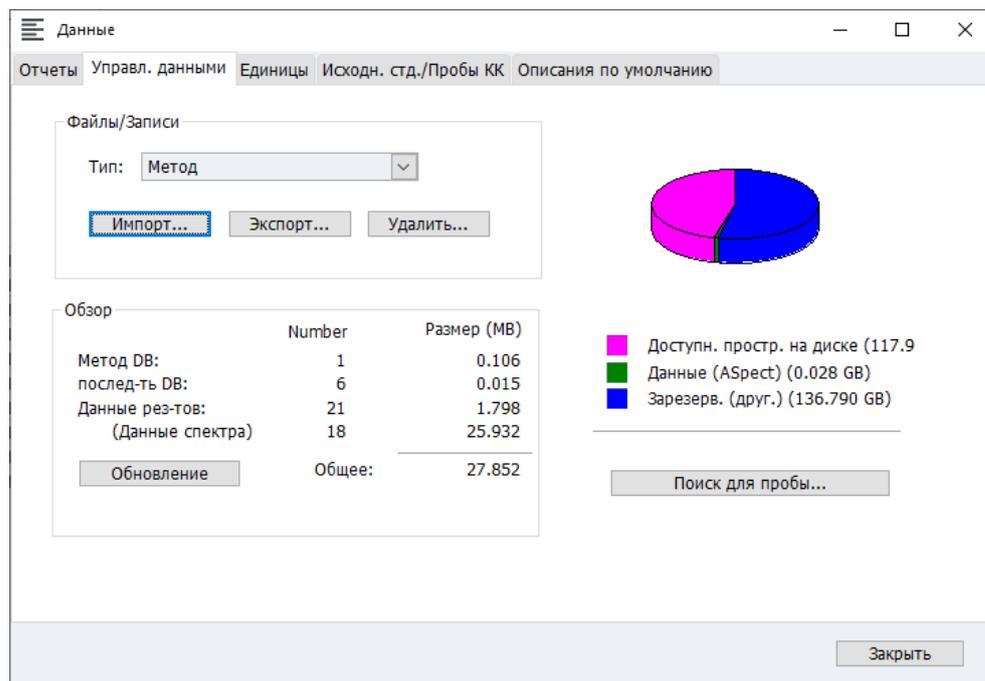
Для данных результатов измерений создаются собственные базы данных. Дальнейшие результаты можно добавить к этой базе данных при измерении. Удаление отдельных проб из базы данных невозможно. Обозначения баз данных с файлами результатов получают расширение ".tps".

Данные с информацией о пробах сохраняются в читабельном формате в редакторе электронных таблиц, например, в Excel с расширением .csv.

Методы, последовательности и данные результатов можно упорядочить в окне **Данные / Управл. данными**. Такие же диалоговые функции для управления методами и последовательностями также используются для открытия и сохранения этих файлов.

Окно **Данные / Управл. данными** открывается по щелчку по значку  или при выборе команды меню **Прочее | Данные**.

Окно Данные / Управл. данными



	Number	Размер (MB)
Метод DB:	1	0.106
послед-ть DB:	6	0.015
Данные рез-тов:	21	1.798
(Данные спектра)	18	25.932
Обновление	Общее:	27.852

В этом окне можно осуществлять управление следующими данными:

- Методы
- Последовательности
- Данные результатов
- Файл линий/длин волн
- Модели коррекции
- Корректирующие спектры
- Шаблоны отчетов
- Избранные линии

- Рабочие листы

В поле **Тип** выберите необходимый тип данных.

10.2.1 Управление методами и последовательностями

Окно базы данных для методов и последовательностей

Методы и последовательности сохраняются в базе данных. При сохранении, открытии, удалении, импорте и экспорте методов и последовательностей открывается окно базы данных, которое содержит идентичные элементы.

Сохранение метода

Назв.: Кат.:

Назв.	Верс.	Дата	Время	Кат.	Оператор	Статус
Example Multiline Ev	1	08.06.2020	15:10	INS	User	Разраб.
Mehrlinienauswertung	1	08.06.2020	13:39		User	Разраб.
Method_Ground	1	05.06.2020	17:15	INS	User	Разраб.
test	2	03.11.2020	9:15		Admin	Разраб.
TW Standardkit	1	08.06.2020	12:34		User	Разраб.
USP_232/233	2	10.03.2021	16:26		User1	Разраб.

Сорт. по: Увеличение Уменьшение

Только текущ. версия

Исполз. как рутинный метод

Сохр. данные калиб-ки

Описание:

Отображения и поля ввода

Опция/отображение	Описание
Назв.	Ввод имени метода или последовательности или отображение выбранного метода или последовательности.
Кат.	Дополнительный идентификатор (категория) для поиска метода или последовательности в базе данных. В качестве обозначения категории можно ввести максимально 3 символа. Отображение списка можно ограничить, введя наименование категории в поле Кат. Если нужно отобразить методы/последовательности всех категорий, удалите ввод из поля Кат.
Список методов/список последовательностей	Отображение сохраненных методов/последовательностей с именем, версией, датой, временем, категорией и пользователем.
Сорт. по	Сортировка списка методов/последовательностей по различным признакам, например, имя/версия или дата/время. В зависимости от выбранной опции информацию можно упорядочить в порядке Увеличение или Уменьшение .
Описание	Отображение или ввод дополнительных комментариев, например, по использованию метода/последовательности.

Опция/отображение	Описание
Только текущ. версия	Если создается несколько версий метода/последовательности с одним и тем же именем, отображается только метод/последовательность с наибольшим номером версии.

Методы/последовательности с одинаковым именем не перезаписываются в ПО ASpect PQ. Вместо этого создается еще одна версия, а номер версии увеличивается на 1.

Вы можете импортировать, экспортировать или удалять записи данных отдельных методов или последовательностей из баз данных для методов или последовательностей. Методы и последовательности обозначаются в дальнейшем тексте настоящего раздела как «записи данных».

Примечание

Для выбора нескольких записей данных в окне базы данных нажмите и удерживайте нажатой клавишу Ctrl или Shift при выделении записей.

Открытие управления данными

- ▶ Откройте окно **Данные / Управл. данными** при помощи команды меню **Прочее | Данные** или щелчком по значку .
- ▶ Выберите из списка **Тип** тип записи данных для обработки: **Метод** или **Последовательность**.

Экспорт записей данных

При экспорте записи данных становятся доступными для других устройств/компьютеров. Вы можете одновременно экспортировать несколько записей данных в общий файл. Обозначение файлов экспорта получают следующие расширения: Записи данных метода – .met, записи данных последовательности – .seq.

- ▶ Кнопкой **[Экспорт]** откройте окно базы данных.
- ▶ Выберите необходимые записи данных и нажмите кнопку **[Экспорт]**.
- ▶ В стандартном окне **Сохранить как** введите имя файла и подтвердите ввод кнопкой **[Сохранить]**.

При этом появится окно базы данных с экспортированными файлами.

- ▶ Закройте окно базы данных кнопкой **[Закреть]** и вернитесь в окно **Данные**.

Импорт записей данных

Импорт позволяет загружать в базу данных записи данных с других устройств/компьютеров. Импортированный файл может содержать несколько записей данных, из которых можно выбрать ту, которая должна быть загружена.

- ▶ Кнопкой **[Импорт]** откройте окно **Выберите файл метода для импорта** или **Выберите файл пос-ти для импорта'**) со стандартными функциями для открытия файлов.
- ▶ Выберите файл для импорта.
- ▶ Подтвердите выбор, нажав кнопку **[Открыть]**.
Откроется окно базы данных, в котором представлены имя, дата создания и категория записи данных, содержащиеся в файле. В заголовке окна отображается имя импортируемого файла.
- ▶ Выберите в окне базы данных записи данных, которые необходимо импортировать, и нажмите кнопку **[Импорт]**.
Данные будут импортированы в базу данных. Если метод/последовательность с таким же именем уже существует, будет создана новая версия метода/последовательности. В окне базы данных появляются текущие версии имеющихся записей данных.
- ▶ Закройте окно базы данных кнопкой **[Закреть]** и вернитесь в окно **Данные**.

- Удаление записей данных
- Используя функцию удаления, можно удалить записи данных из базы данных.
- ▶ Кнопкой **[Удалить]** откройте окно базы данных.
 - ▶ Выберите записи данных, которые должны быть удалены.
 - ▶ Нажмите кнопку **[Удалить]**.
 - ✓ Окно базы данных обновится, и в нем будут отображены только оставшиеся записи данных. Для одноименных записей данных номер версии уменьшается на 1.
- Удаление записей данных через меню Файл
- ▶ В качестве альтернативы вы можете открыть окно базы данных **Удал. метод** или **Удал. послед-ть** командой меню **Файл | Удалить | Метод** или **Файл | Удалить | Пос-ть**.
 - ▶ Затем действуйте, как описано выше.

10.2.2 Управление файлами результатов

Во время измерения данные результатов сохраняются в виде базы данных. Базу данных, содержащую данные результатов, можно копировать или удалить.

- ▶ Откройте окно **Данные / Управл. данными** при помощи пункта меню **Прочее | Данные** или щелчком по значку .
 - ▶ Выберите из списка **Тип** опцию **Результаты**.
- Экспорт данных результатов
- С помощью этой команды можно копировать одну или несколько баз данных, а также имеющиеся файлы со спектрами, в другую папку.
- ▶ В окне **Данные / Управл. данными** выберите **[Экспорт]**.
Откроется окно **Экспорт** с обзором имеющихся баз данных результатов. Файлы результатов представлены в виде списка с именем, размером и моментом последнего изменения файла.
 - ▶ Выделите базы данных результатов для копирования щелчком кнопкой мыши. Вы можете выбрать несколько баз данных, удерживая нажатой клавишу Ctrl или Shift.
 - ▶ При помощи команды **[Экспорт]** откройте окно **Поиск папки**.
 - ▶ Выберите папку назначения и подтвердите выбор нажатием кнопки **[ОК]**.
 - ✓ Файл результатов копируется в выбранную папку.
- Удаление файлов результатов
- Вы можете удалить данные результатов навсегда.
- ▶ В окне **Данные / Управл. данными** выберите **[Удалить]**.
 - ▶ В окне **Удалить файлы результатов** щелчком мыши выберите базу данных для удаления. Для выбора нескольких баз данных удерживайте клавишу Ctrl или Shift нажатой.
 - ▶ Чтобы удалить базу данных результатов, нажмите кнопку **[Удалить]**.
 - ▶ Подтвердите контрольный вопрос об удалении файлов, нажав кнопку **[ОК]**.
 - ✓ Данные будут окончательно удалены.
- Поиск результатов отдельных проб
- Можно искать отдельные пробы с известными обозначениями проб.
- ▶ В окне **Данные / Управл. данными** выберите **[Поиск для пробы]**. Или выберите пункт меню **Прочее | Поиск пробы**.

Поиск для:

Проба:

Искать в (вкл. субпапки):

Поиск подстроки

Данные между: и:

Искать рез-ты:

Файл рез-тов	Папка	Техника	Метод	Дата
Au in electronic waste reproces	C:\Users\Public	ICP-OES	PGM in Na-fusion 3	28.02.2019
Au in electronic waste reproces	C:\Users\Public	ICP-OES	PGM in Na-fusion 3	28.02.2019
Au in electronic waste original r	C:\Users\Public	ICP-OES	PGM in Na-fusion 3	28.02.2019

- ▶ В поле ввода **Проба** введите имя пробы.
- ▶ Для поиска проб, у которых введенный ряд символов является частью имени, активируйте контрольное поле **Поиск подстроки**.
- ▶ Ограничьте поиск моментом измерения, установив флажок в поле **Данные между**.
- ▶ Запустите поиск, нажав кнопку **[Старт]**.

В таблице отобразятся все результаты, содержащие пробы с введенным обозначением.

- ▶ Чтобы открыть одну из показанных баз данных результатов, отметьте эту базу данных в списке и нажмите кнопку **[Откр.]**.
 - ✓ Результаты отобразятся в главном окне.

10.2.3 Экспорт файлов линий/длин волн

Файл линий/длин волн с аналитическими линиями и сохраненными основными пиками зависит от устройства. Этот файл сохранен на компьютере, с которого осуществляется управление ИСП-ОЭС. Чтобы использовать файл линий/длин волн на другом компьютере:

- ▶ Откройте окно **Данные / Управл. данными** при помощи команды меню **Прочее | Данные** или щелчком по значку .
- ▶ Выберите из списка **Тип** опцию **Линии/файл длины волны** и нажмите кнопку **[Экспорт]**.
- ▶ Выберите папку для сохранения файла и нажмите кнопку **[ОК]**.
 - ✓ Файл с именем lines.dat сохранен в выбранной папке.

10.2.4 Управление моделями коррекции

Модели коррекции используются для спектральных коррекций. Их можно перенести с одного устройства на другое. Файлы модели коррекции имеют расширение .MOD.

- ▶ Откройте окно **Данные / Управл. данными** при помощи команды меню **Прочее | Данные** или щелчком по значку .

- Импорт моделей коррекции

 - ▶ Выберите из списка **Тип** опцию **Корр. модели**.

Команда позволяет импортировать модели коррекции в ASpect PQ.

 - ▶ Нажмите кнопку **[Импорт]**.
 - ▶ Выберите файл модели коррекции, который необходимо импортировать, и нажмите кнопку **[Откр.]**.
Откроется окно базы данных **Импорт Корр. модель**.
 - ▶ Нажмите кнопку **[Импорт]**.
 - ✓ Модель коррекции сохраняется в базе данных.

- Экспорт моделей коррекции

Эта команда позволяет экспортировать модель коррекции для использования на другом компьютере.

 - ▶ Нажмите кнопку **[Экспорт]**.
 - ▶ В окне базы данных **Экспорт Корр. модель** выберите нужную модель. Можно выбрать несколько элементов.
 - ▶ Нажмите кнопку **[Экспорт]**.
 - ▶ В окне **Сохранить как** задайте имя и путь сохранения, после чего нажмите кнопку **[Сохранить]**.
 - ✓ Файл с моделью коррекции будет сохранен.

- Удаление моделей коррекции

Эта команда позволяет удалять ненужные модели коррекции.

 - ▶ Нажмите кнопку **[Удалить]**.
 - ▶ В окне базы данных **Корр. модель** выделите нужную модель.
 - ▶ Нажмите кнопку **[Удалить]**.
 - ✓ Модель коррекции удалится из базы данных.



ПРИМЕЧАНИЕ

Учтите, что используется ли модель коррекции в методе или нет, не проверяется.

См. также

📖 Устранение спектральных помех – окно Ред. спектр / Спектр. коррекции [▶ 86]

10.2.5 Удаление корректирующих спектров

Ненужные корректирующие спектры можно удалить из базы данных.

- ▶ Откройте окно **Данные / Управл. данными** при помощи команды меню **Прочее | Данные** или щелчком по значку .
- ▶ Выберите из списка **Тип** опцию **Корр. спектр** и нажмите кнопку **[Удалить]**.
- ▶ Выберите в окне базы данных **Корр. спектр** спектр для удаления и нажмите кнопку **[Удалить]**.
 - ✓ Проверяется, используется ли спектр в модели коррекции. Если нет, он удаляется.

10.2.6 Импорт шаблонов отчета

Шаблоны отчетов печати, которые были созданы на сторонних устройствах, необходимо импортировать в ASpect PQ посредством системы управления данными:

- ▶ Откройте окно **Данные / Управл. данными** при помощи команды меню **Прочее | Данные** или щелчком по значку .
- ▶ Выберите из списка **Тип** опцию **Шаблон отчета** и нажмите кнопку **[ОК]**.
- ▶ В окне **Откр.** выберите файл и нажмите кнопку **[Откр.]**.
Файлы отчета имеют расширение .lst.
 - ✓ Шаблон отчета импортируется в ASpect PQ. Теперь назначьте шаблон отчета содержимому печати.

См. также

-  Шаблоны отчетов [▶ 120]

10.2.7 Управление избранными линиями

Избранные линии можно задать в окне **Метод**. Избранные линии содержат аналитическую линию, используемую для определенной задачи, и зависимые от линии параметры метода. Файлы избранных линий имеют расширение .fav.

- ▶ Откройте окно **Данные / Управл. данными** при помощи команды меню **Прочее | Данные** или щелчком по значку .
- ▶ Выберите из списка **Тип** опцию **Предпочтит..**

Импорт избранных линий

Команда позволяет импортировать избранную запись данных в ASpect PQ.

- ▶ Нажмите кнопку **[Импорт]**.
- ▶ В окне базы данных **Детали предпочтит.** нажмите кнопку **[Импорт]**.
- ▶ Выберите файл избранной линии, который необходимо импортировать, и нажмите кнопку **[Откр.]**.
 - ✓ После контрольного вопроса избранная запись данных будет добавлена в ваши избранные линии.

Экспорт избранных линий

- ▶ Нажмите кнопку **[Экспорт]**.
- ▶ В окне базы данных **Детали предпочтит.** выделите нужную запись данных. Можно выбрать несколько элементов.
- ▶ Нажмите кнопку **[Экспорт]**.
- ▶ В окне **Файл назначения (новый или существующий)'** задайте имя и путь сохранения файла и нажмите кнопку **[Сохран.]**.
В качестве конечного файла можно использовать и уже существующий файл. В этом случае запись данных будет интегрирована в этот файл.
 - ✓ Файл с записью данных избранных линий сохранен.

Удаление избранных линий

Эта команда позволяет удалять ненужные избранные линии.

- ▶ Нажмите кнопку **[Удалить]**.
- ▶ В окне базы данных **Детали предпочтит.** выделите запись данных.
- ▶ Нажмите кнопку **[Удалить]**.
 - ✓ Выделенная запись данных будет удалена из базы данных.

См. также

- 📖 Определение собственных избранных линий [▶ 30]

10.2.8 Импорт и экспорт рабочих листов

Рабочие листы можно импортировать и экспортировать. Опционально можно указать сохраненные методы и последовательности.

- ▶ Откройте окно **Данные / Управл. данными** при помощи команды меню **Прочее | Данные** или щелчком по значку .
- ▶ Выберите из списка **Тип** опцию **Таблица**.

Экспорт рабочих листов

- ▶ Нажмите кнопку **[Экспорт]**.
- ▶ В окне **Экспортир. раб. табл.** выделите соответствующий рабочий лист. Чтобы также экспортировать методы и последовательности, активируйте опцию **включая послед-ть и метод(ы)**.
- ▶ Нажмите кнопку **[Экспорт]** и укажите папку и имя для файла экспорта.
- ▶ Подтвердите введенные значения, нажав кнопку **[Сохранить]**.
 - ✓ Рабочий лист экспортируется с расширением .WST.

Импорт рабочих листов

- ▶ Нажмите кнопку **[Импорт]**.
- ▶ В окне **Импортир. раб. табл.** нажмите кнопку **[Импорт]**. Чтобы также экспортировать методы и последовательности, активируйте опцию **включая послед-ть и метод(ы)**.
- ▶ Выберите в стандартном окне рабочий лист и нажмите кнопку **[Открыть]**.
 - ✓ Рабочий лист будет импортирован.

10.3 Сохранение результатов в формате ASCII/CSV

Результаты измерения и анализа можно сохранить как автоматически, так и вручную в формате ASCII/CSV. Для обоих видов экспорта в окне **Опции / ASCII/CSV экспорт** настраиваются параметры десятичных разделителей и разделителей столбцов.

Автоматический непрерывный экспорт данных

При активированной опции автоматического непрерывного экспорта данных каждая запись в таблице результатов сразу же переносится в заданный файл ASCII. Имя этого файла ASCII задается в окне **Опции / Послед. ASCII экспорт**.

Экспорт данных вручную

При экспорте данных вручную можно выбрать в таблице результатов строки, которые должны быть экспортированы.

- ▶ Выделите пробы в списке результатов. Удерживая нажатой клавишу Ctrl или Shift, щелчком по строке пробы выберите пробы. Выделить все строки проб можно с помощью команды меню **Ред. | Выделить все Ctrl+A**.
- ▶ С помощью пункта меню **Ред. | Сохранить выделение** откройте стандартное окно **Сохранить как**. Или правой кнопкой мыши щелкните по выделенным строкам и в контекстном меню выберите соответствующий пункт меню.

- ▶ Введите имя файла и подтвердите его, нажав кнопку **[ОК]**. Данные сохраняются в формате, доступном для программ для работы с электронными таблицами, с расширением ".csv".

См. также

- 📖 Опции экспорта [▶ 135]
- 📖 Опции для непрерывного экспорта в формате ASCII [▶ 135]

10.4 Установка единиц измерения

В окне **Данные / Единицы** осуществляется управление доступными для программы единицами.

- ▶ Откройте окно **Данные / Единицы** при помощи команды меню **Прочее | Данные** или щелчком по значку .

Доступно 3 предпочтительных варианта (для растворов: мг/л, мкг/л, нг/л; для твердых проб: мг/кг, мкг/кг, нг/кг). Эти единицы не могут быть изменены пользователем. Единицы, отличные от этих, можно устанавливать произвольным образом. Для произвольной установки единиц необходимо ввести коэффициент преобразования в поле Коэффициент:

Опция	Описание
Един.	Обозначение единицы (макс. 10 символов)
Примеч.	Замечания (макс. 20 символов)
Фактор	Коэффициент 1 соответствует 1 мкг/л или мкг/кг, коэффициент 1000 соответствует 1 нг/л или нг/кг
Тип	<p>тверд. Единица измерения для твердых проб</p> <p>жидк. Единица измерения для жидких проб (раствор)</p> <p>жидк. грав. Единица измерения для отвешиваемой жидкой пробы, например, масло</p>

Кнопки **[Добавить]** и **[Вставка]** позволяют добавить в конец списка или над текущим выделением строки новые единицы. Кнопка **[Удалить]** позволяет удалить только те единицы, которые заданы пользователем, предпочтительные варианты удалить нельзя. Сохранить изменения можно нажатием кнопки **[Сохранить]**.

10.5 Управление базами данных для исходных растворов и проб КК

Управление базами данных с часто используемыми маточными стандартными растворами и пробами КК осуществляется в окне **Данные / Исходн. станд./Пробы КК**. Эти стандарты с одним или несколькими элементами затем доступны в рамках всей программы.

- ▶ Откройте окно **Данные / Исходн. станд./Пробы КК** при помощи команды меню **Прочее | Данные** или щелчком по значку .
- ▶ Чтобы выбрать отображение в таблице, активируйте опции **Исходн. стандарт** или **Пробы КК**.

Окно Данные / Исходн. стд./
Пробы КК

Столбец таблицы	Значение
Назв.	Ввод обозначения стандарта (макс. 20 символов).
Един.	Наименование единицы измерения (макс. 10 символов) стандарта.
Элементы и концентрации	Концентрация элемента вводится в формате «символ элемента концентрация» в выбранной единице измерения, например, Fe 0.5;Cu 10; Co 0.005. Или при помощи кнопки [Концентрации] откройте одноименное поле ввода, в котором можно назначить концентрацию каждому элементу.

Кнопки имеют следующие функции:

Экранная кнопка	Функция
[Добавить]	Добавление новой строки в конец списка.
[Вставка]	Добавление строки над выбранной строкой в списке.
[Удалить]	Удаление выделенной строки.
[Сохранить]	Сохранение базовых стандартов/ проб КК.
[Концентрации]	Открытие поля ввода для элемента и концентрации выбранного стандарта.

10.6 Создание предварительно заданных комментариев

Для следующих действий можно предварительно задать пользовательские комментарии:

- Сохранение метода
- Сохранение последовательности
- Запуск нового расчета
- Начало измерения

Пользовательские комментарии можно вставить в соответствующие окна, щелкнув по значку **...** рядом с полем **Описание**.

- Создание комментария
- ▶ Откройте окно **Данные / Описания по умолчанию** при помощи команды меню **Прочее | Данные** или щелчком по значку .
 - ▶ Выберите действие из списка **Select category**.
 - ▶ Щелчком по кнопке **[Ред. шаблон]** откройте список комментариев.
 - ▶ Создайте новый комментарий, нажав кнопку **[Новый]**. Введите **Имя**, с помощью которого можно будет выбрать комментарий. В поле **Текст** введите текст комментария.
 - ▶ Можно отредактировать комментарий с помощью кнопки **[Модиф.]** или удалить его из раскрывающегося списка кнопкой **[Удалить]**.

10.7 Использование буфера обмена Windows

Копирование результатов в буфер обмена

Результаты выбранных проб можно скопировать непосредственно в буфер обмена Windows и таким образом сделать их доступными для других приложений Windows.

Соответствующие команды доступны в меню Ред.:

Меню Ред....	Описание
Копир. только видим. столб. Ctrl+C	Копировать видимые результаты проб в текущую таблицу.
Копир. все столб.	Копировать результаты проб из всех таблиц.
Загол. столбца	Если активировано (галочкой), копируется также строка заголовка с заголовками столбцов.

- ▶ Выберите пробы из соответствующей таблицы списка результатов.
 - Удерживая нажатой клавишу Ctrl или Shift, щелчком по строке пробы выберите пробы.
 - Выделить все строки проб можно с помощью команды меню **Ред. | Копир. все столб.**
- ▶ При необходимости, чтобы также скопировать строку заголовка, активируйте команду меню **Ред. | Загол. столбца**.
- ▶ Активируйте соответствующую команду меню для копирования результатов в буфер обмена.

Копирование графиков в виде снимка экрана

Графические окна и графики калибровочных кривых, сигналов интенсивности или эмиссии можно скопировать в буфер обмена в виде снимков экрана.

- ▶ Щелкните правой кнопкой мыши по графику. Откроется контекстное меню с двумя командами копирования.
- ▶ Выберите команду копирования, чтобы скопировать требуемый объект: копировать только график или все отображенное окно.
 - ✓ Выбранный объект копируется в буфер обмена и становится доступен для других приложений Windows.

11 Настройка программы ASpect PQ

В окне **Опции** выполняются следующие настройки, которые действительны для всей работы ASpect PQ:

- Возможности отображения
- Места сохранения файлов
- Параметры для экспорта данных
- Общие настройки процесса анализа

Выполненные настройки сохраняются после выхода из программы ASpect PQ и ее перезапуска.

Открытие окна Опции

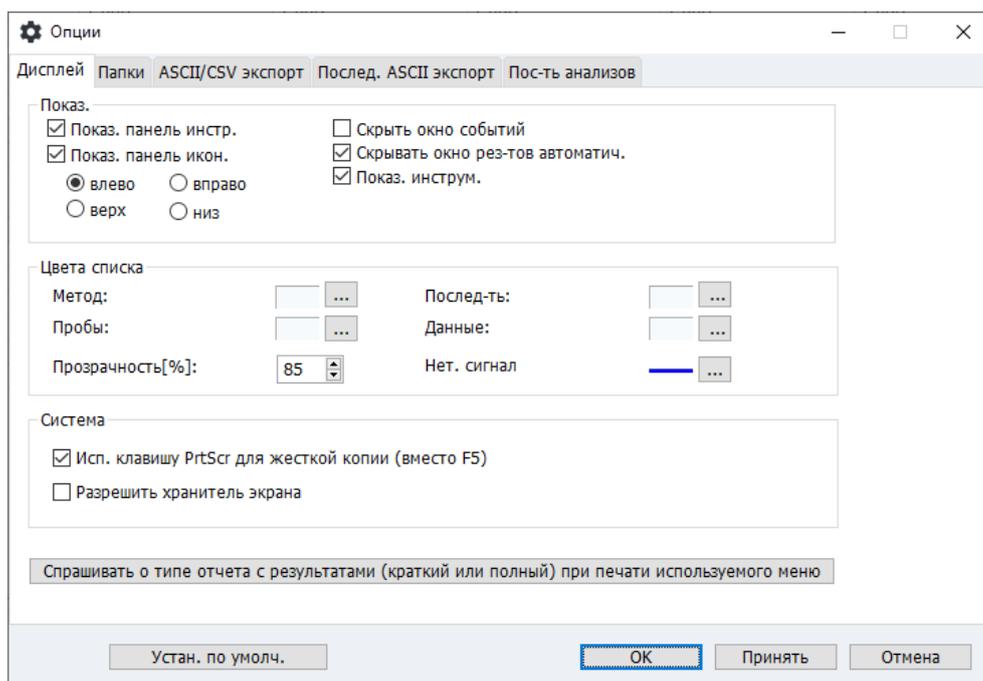
Открыть окно **Опции** можно с помощью команды меню **Прочее | Опции**.

11.1 Возможности отображения

В окне **Опции / Дисплей** задаются функции, видимые на рабочем столе.

- ▶ Откройте окно **Опции / Дисплей** при помощи команды меню **Прочее | Опции**.

Окно Опции / Дисплей



Опция	Описание
Показ. панель инстр.	Отображение панели инструментов с кнопками для процедуры измерения.
Показ. панель икон.	Отображение строки символов с крупными кнопками для быстрого доступа и выбор положения строки символов. (Положение строки символов также можно изменить, переместив строку с помощью кнопки мыши, при этом настройка не сохраняется до следующего запуска программы).
Скрыть окно событий	Не показывать окно результатов (например, Время задержки) . Вместо этого сообщения отображаются в строке состояния главного окна.

Опция	Описание
Скрывать окно рез-тов автоматич.	Окна результатов скрываются при открытии выпадающего списка (например, окно Метод) . После закрытия подокон окна результатов отображаются снова.
Показ. инструм.	Показ небольших текстов справки (всплывающих подсказок) для всех кнопок и заголовков столбцов в окнах Метод , Пос-ть и Назв. пробы .
Цвета списка	Нажатие кнопки ... открывает диалоговое окно выбора цветов. Можно задать предустановленные или новые цвета для фонов списков.
Исп. клавишу PrtScg для жесткой копии (вместо F5)	По умолчанию распечатка содержания экрана выполняется кнопкой [F5]. В этом случае кнопка [Печать] на клавиатуре используется для функций буфера обмена Windows. Если это контрольное поле активировано, кнопка [Печать] запускает печать содержания экрана. Эта функция активируется только после перезапуска ASpect PQ.
Разрешить храни-тель экрана	Если эта функция активирована, во время пауз ввода включается экранная заставка Windows.
[Спрашивать о типе отчета с результатами (краткий или полный) при печати используемого меню]	При печати окон результатов при помощи пункта меню Файл Печать Активн. окно можно выбрать полный или компактный отчет. Щелчок по этой кнопке всегда сбрасывает выбор Всегда исп-ть этот тип отчета с результатами , что позволяет снова выбрать тип отчета.

Кнопка **[Устан. по умолч.]** сбрасывает все опции и сохраненные положения окон на значения по умолчанию.

11.2 Пути сохранения

При установке задаются пути сохранения файлов. Они отображаются в окне **Опции / Папка** и частично доступны для редактирования.

- ▶ Откройте окно **Опции / Папка** при помощи команды меню **Прочее | Опции**.

Функции в окне Опции / Папка

Папка	Описание
Программа	Путь установки исполняемых программных файлов.
Рабочая папка	Директория пользовательских данных Рабочая директория содержит дополнительные подпапки. Она задается во время установки или дополнительной функцией управления пользователями.
Временн. данные	Каталог данных, временно созданный программой
Инф. о пробе	Путь по умолчанию для открытия и сохранения файлов с информацией о пробах Этот путь может быть изменен. Для выбора новой папки щелкните по значку При открытии и сохранении файлов с информацией о пробах можно выбрать другой путь.
Экспорт/Импорт	Путь по умолчанию для импорта и экспорта данных метода и последовательностей и экспорт данных результатов в виде файлов CSV

Папка	Описание
	Этот путь может быть изменен. Для выбора новой папки щелкните по значку  . При экспорте и импорте также можно выбрать другой путь.
Рез-ты	Каталог для файлов результатов Этот каталог по умолчанию может содержать дополнительные подпапки для сохранения результатов. Эти папки доступны для сохранения результатов при запуске измерений.
Прикладные данные	Каталог, в который ASpect PQ сохраняет необходимые данные.

Кнопка **[Доб.]** позволяет создать новые подпапки для сохранения результатов в папке результатов. Пустые папки можно удалить или переименовать.

11.3 Опции экспорта

В окне **Опции / ASCII/CSV экспорт** задаются параметры для ASCII-экспорта данных результатов. Параметры действительны как для автоматического экспорта данных, так и для экспорта данных вручную.

- ▶ Откройте окно **Опции / ASCII/CSV экспорт** при помощи команды меню **Прочее | Опции**.

Настройки в окне Опции / ASCII/CSV экспорт

Опция	Описание
Десятичн. разделитель	Определяет разделитель десятичных разрядов.
Разделитель списка	Указывает символ, с помощью которого разделены элементы списка.

Для экспорта списков результатов выберите **Десятичн. разделитель** и **Разделитель списка**.

В области **Поля рез-тов для экспорта** можно задать, какие столбцы таблицы результатов будут экспортированы в файл ASCII. При выборе опции **все** экспортируются содержимое всех столбцов списка результатов (со всеми вложенными вкладками). Опция **только выдел. поля** открывает список, в котором можно выбрать столбцы для экспорта.

Кнопка **[Устан. по умолч.]** сбрасывает все опции и сохраненные положения окон на значения по умолчанию.

См. также

-  Сохранение результатов в формате ASCII/CSV [▶ 129]

11.4 Опции для непрерывного экспорта в формате ASCII

В окне **Опции / Послед. ASCII экспорт** активируется автоматический экспорт данных результатов во время выполнения анализа. Файл экспорта обновляется каждый раз при выводе новой строки в окне процесса и результата. Данные добавляются к уже имеющимся файлам.

Другие параметры экспорта задаются в окне **Опции / ASCII/CSV экспорт**.

- ▶ Откройте окно **Опции / Послед. ASCII экспорт** при помощи команды меню **Прочее | Опции**.

Экспорт данных результатов

Флажок в поле **Послед. ASCII экспорт данных результатов** активирует функцию экспорта. После этого необходимо выбрать опцию для имени файла:

Опция	Описание
Имя метода.csv	Имя файла соответствует обозначению метода. Расширение файла - ".csv". Файл сохраняется по пути Экспорт/Импорт (окно Опции / Папка), заданному по умолчанию.
Имя файла результатов.csv	Имя файла соответствует обозначению файла результатов. Расширение файла - ".csv". Файл сохраняется по пути Экспорт/Импорт (окно Опции / Папка), заданному по умолчанию.
другое	Имя файла и путь к нему можно задать произвольным образом. При нажатии кнопки ... открывается стандартное окно Сохр. как , в котором можно задать путь сохранения и имя файла. Данные будут постоянно записываться в этот файл, пока не будет задано новое имя или не будет выбрана другая опция для наименования.
Создать отдельный файл для каждой пробы (число строк рез-тов и имя пробы будут добавлены к имени файла)	Номер строки списка результатов и обозначение пробы добавляются к имени файла. Недопустимые символы заменяются символами подчеркивания (например, метод тестирования-001 QC 1 mg_L.csv).

Экспорт спектров

Для экспорта спектров активируйте опцию **Послед. экспорт спектра (CSV)** и выберите путь сохранения.

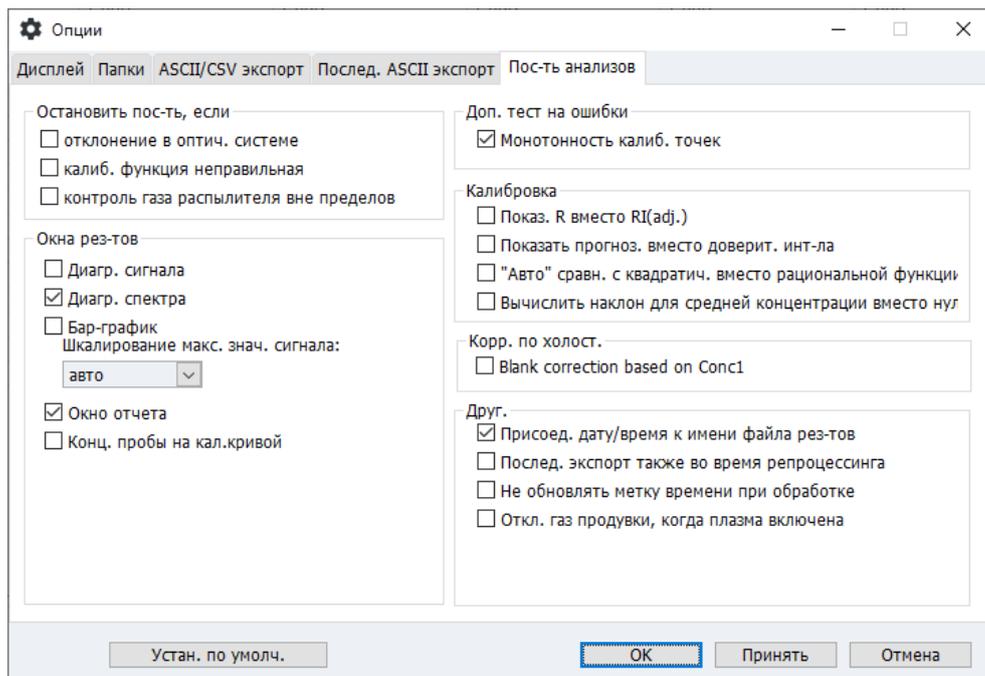
Спектры дополнительно экспортируются в виде CSV-файлов по указанному пути экспорта. Имя файла формируется по схеме «строка списка-наименование пробы-наименование линии-повторное измерение», например, 0007-проба-AI309-02.csv.

11.5 Опции для процесса анализа

В окне **Опции / Пос-ть анализов** задаются общие настройки для процесса анализа.

- ▶ Откройте окно **Опции / Пос-ть анализов** при помощи команды меню **Прочее | Опции**.

Окно Опции / Пос-ть анали-
зов



Отмена последовательности
после следующих ошибок

Анализ контролируется на предмет следующих ошибок, и при возникновении этих ошибок его можно прерывать:

Опция	Описание
отклонение в оптич. системе	Останавливается при ошибочной настройке длины волны (Некоррекция).
калиб. функция неправильная	Останавливается, если вычисление калибровочной функции невозможно.
контроль газа распылителя вне пределов	Останавливается при превышении контрольного значения распылителя. Во время калибровки определяется контрольное значение потока газа распылителя. Если в ходе последующего анализа контрольное значение изменяется, это является признаком засорения распылителя.

Дополнительная проверка
ошибок

Опция	Описание
Монотонность калиб. точек	Выполняется проверка монотонности точек калибровки. Тест на монотонность позволяет определить, приводят ли более высокие стандартные концентрации к более высоким значениям измерения.

Отображение результатов

Опция	Описание
Диагр. сигнал.	Во время процесса анализа появляется окно с отображением зависящей от времени кривой сигнала измерения.
Диагр. спектра	Во время процесса анализа появляется окно с отображением записанной спектральной области.
Бар-график	Показывает измеренные интенсивности в виде столбчатой диаграммы.
Шкалирование макс. знач. сигнала	Задаёт максимальное значение по оси значений измерения для отображения кривой сигнала.

Опция	Описание
	авто : Автоматическое масштабирование осей. Этот параметр можно также установить с помощью функции меню Вид Шкала .
Окно отчета	Во время процесса анализа отображается окно с данными о состоянии плазмы.
Конц. пробы на кал.кривой	Отображает окно Конц. пробы на кал.кривой с текущей кривой калибровки и, если уже измерена, кривой рекалибровки. После измерения пробы вычисление неправильной концентрации по данным эмиссии указывается дополнительными красными линиями. При дополнительной калибровке отображается пересчитанная калибровочная кривая.

Калибровка

В этой группе производятся основополагающие настройки для калибровки. В настройках по умолчанию все контрольные поля деактивированы.

Опция	Описание
Показ. R вместо RI(adj.)	При активации отображается корреляционный коэффициент. В стандартных настройках предусмотрен откорректированный (откорректированный) коэффициент детерминации.
Показать прогноз. вместо доверит. инт-ла	Если активировано, отображается прогнозируемый диапазон для калибровки. Доверительный диапазон установлен в стандартных настройках.
Авто сравн. с квадратич. вместо рациональной функции	«авто» обозначает автоматический выбор калибровочной функции. Если активировано, для сравнения используется квадратичная функция. По умолчанию здесь установлена дробно-рациональная функция.
Вычислить наклон для средней концентрации вместо нуля	Если активировано, наклон калибровочной кривой рассчитывается по средней концентрации диапазона калибровки. В стандартных настройках увеличение рассчитывается для концентрации 0.



ПРИМЕЧАНИЕ

Для совместимости расчета квадратной функции калибровки по DIN 38402 и ISO 8466-2 необходимо активировать все вышеназванные опции.

Коррекция бланка

Для коррекции бланка можно выбрать один из 2 различных методов вычисления: На основе конц.1 или конц.2.

С помощью метода расчета на основе конц2 сначала рассчитывается исходная концентрация бланка (конц2_{BV}) на основе идентификаторов проб бланка. При вычислении конц.2 пробы учитывается значение Conc2_{BV}

В методе расчета на основе конц.1, для расчета концентрации пробы используется концентрации бланка, вычисленная непосредственно из пробы (Conc1_{Blank}). Этот метод можно использовать, если данные ID проб, например, разбавлений, не оказывают сильного влияния на концентрацию растворов бланка, и, следовательно, данные идентификатора пробы для бланка не вводятся.

Пример расчета для жидкой исходной пробы с предварительным разбавлением:

- На основе конц.1: $Conc2_{Sample} = (Conc1_{Sample} - Conc1_{Blank}) * DF_{Sample}$
- На основе конц.2: $Conc2_{Sample} = (Conc1_{Sample} * DF_{Sample}) - Conc2_{Blank}$

$Conc1_{Sample}$	Концентрация пробы без учета данных идентификатора пробы
$Conc2_{Sample}$	Исходная концентрация пробы
$Conc1_{Blank}$	Концентрация бланка без учета данных идентификатора пробы
$Conc2_{Blank}$	Исходное значение бланка
DF_{Sample}	Фактор разбавления пробы

Для коррекции бланка по умолчанию используется метод на основе конц.2. Если Вы хотите использовать сокращенную процедуру на основе конц.1 без учета идентификатора пробы бланка, активируйте опцию **Blank correction based on Conc1** .

Прочее

Опция	Описание
Присоед. дату/ время к имени файла рез-тов	Текущее время ПК при запуске измерения автоматически добавляется к имени файла результата.
Послед. экспорт также во время репроцессинга	После пересчета результаты экспортируются автоматически.
Не обновлять метку времени при обработке	После повторного вычисления результатов сохраняется исходное время измерения.
Откл. газ продувки, когда плазма включена	В целях экономии при гашении плазмы продувочный газ отключается.

См. также

 Ввод параметров калибровки – окно Метод / Калибровка [▶ 39]

12 Приложение

12.1 Обзор обозначений, используемых при отображении значений

Примечание	Значение	Относится к	Издание
> Kal	Среднее значение пробы больше, чем рабочий диапазон калибровочной кривой	Средние значения	Окно процесса и результата
< Kal	Среднее значение пробы меньше, чем рабочий диапазон калибровочной кривой	Средние значения	Окно процесса и результата
< NWG	Значение пробы меньше, чем предел детектирования	Средние значения	Окно процесса и результата
< BG	Значение пробы меньше, чем предел количественного определения и больше, чем предел детектирования	Средние значения	Окно процесса и результата
RSD!	Среднее значение пробы или среднее значение стандарта лежит за пределами диапазона заданного относительного стандартного отклонения	Средние значения	Окно процесса и результата
RR!	Среднее значение пробы или среднее значение стандарта лежит за пределами диапазона заданного относительного диапазона	Средние значения	Окно процесса и результата
Фактор!	Превышение предела фактора рекалибровки для калибровочной кривой	Калибровочная кривая	Окно процесса и результата
R_2 (наст.) или R	Коэффициент детерминации регрессии R_2 (наст.) или R (в зависимости от выбора в окне Опции / Пос-ть анализов) калибровочной кривой ниже заданного значения	Калибровочная кривая	Окно процесса и результата Окно Калибровка
#MAN.	Отдельное значение пробы или отдельное значение стандарта было вручную исключено из расчета средних значений пробы	Отдельные значения пробы	Окно Детальн. рез-ты
#KOR.	Отдельное значение пробы или отдельное значение стандарта было автоматически исключено из вычисления средних значений пробы по тесту выбросов Граббса	Отдельные значения пробы	Окно Детальн. рез-ты