

Руководство по эксплуатации

ASpect CS

Программное обеспечение для ААС с ИСС



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	D (05/2023)
---------	-------------

Техническая документация	Analytik Jena GmbH+Co. KG
--------------------------	---------------------------

© Copyright 2023, Analytik Jena GmbH+Co. KG

Оглавление

1 Программное обеспечение ASpect CS.....	7
1.1 Запуск ASpect CS.....	7
1.1.1 Окно Быстрый старт.....	7
1.1.2 Начало работы с рабочим листом.....	9
1.1.3 Начало работы без рабочего листа.....	10
1.1.4 Открытие приложения во втором окне.....	11
1.2 Завершение работы ASpect CS и выключение анализатора.....	11
1.3 Общие инструкции по эксплуатации.....	12
1.3.1 Рабочий интерфейс.....	12
1.3.2 Использование справки.....	13
1.3.3 Обзор строки меню, панели инструментов и строки символов.....	13
1.3.4 Наиболее часто используемые элементы управления.....	15
2 Управление рабочими листами.....	19
2.1 Создание нового рабочего листа.....	20
2.2 Редактирование рабочего листа.....	22
2.3 Удаление рабочего листа.....	22
2.4 Загрузка рабочего листа.....	22
3 Методы.....	23
3.1 Создание, сохранение и загрузка методов.....	23
3.1.1 Создание нового метода.....	23
3.1.2 Сохранение метода.....	24
3.1.3 Загрузка метода.....	25
3.2 Спецификация параметров метода.....	26
3.2.1 Окно Метод / Строки – спецификация аналитических линий.....	26
3.2.2 Окно метод / Пламя – спецификация параметров пламени.....	31
3.2.3 Окно Метод / Печь – спецификация параметров атомизации в графитовой печи.....	32
3.2.4 Окно Метод / Гидрид.....	39
3.2.5 Окно метод / Транспорт пробы – спецификация подачи пробы.....	43
3.2.6 Окно метод / Обработка – спецификация спектральной области и коррекций фона.....	51
3.2.7 ОкноМетод / Калибровка - установка параметров калибровки.....	53
3.2.8 Окно Метод / Статистика – спецификация статистических параметров.....	59
3.2.9 Окно Метод / ККС – установка параметров проб для контроля качества.....	61
3.2.10 Окно метод / ККК.....	65
3.2.11 Окно метод / Вывод – параметры вывода результатов и объема памяти.....	66
4 Последовательности.....	68
4.1 Создание, сохранение и загрузка последовательностей.....	68
4.1.1 Создание новой последовательности.....	68
4.1.2 Сохранение последовательности.....	68
4.1.3 Загрузка последовательности.....	69
4.2 Окно Послед-ть.....	70
4.3 Параметры измерений и действий в последовательности.....	71
5 Данные с информацией о пробах (ID проб).....	75
5.1 Создание, сохранение и открытие данных с информацией о пробах.....	75
5.2 Окно Имя пробы.....	76

5.3	Определение информации о пробах и проб КК.....	78
6	Проведение анализа и расчет результатов.....	79
6.1	Обзор команд меню и кнопок для начала анализа в главном окне.....	79
6.2	Запуск процедуры измерения.....	79
6.3	Прерывание, продолжение или остановка процедуры измерения	82
6.4	Повтор действий последовательности	82
6.5	Пересчет результатов анализа	83
6.6	Обработка измерений параллельно с выполнением анализа	85
6.7	Просмотр результатов и процесса анализа	85
6.7.1	Вкладка Послед-ть/Результаты	85
6.7.2	Вкладка Последовательность.....	86
6.7.3	Вкладка Результаты	86
6.7.4	Вкладка Общий вид.....	90
6.7.5	Вкладка Тверд.....	90
6.8	Открытие файлов результатов или их удаление из окна просмотра	91
6.9	Данные пробы и спектры	91
6.9.1	Отображение отдельных значений проб	92
6.9.2	Отображение и анализ спектров	94
6.10	Анализ твердых проб с техникой графитовой печи	103
6.10.1	Функции вкладки Тверд.....	103
6.10.2	Измерение твердых проб.....	106
6.10.3	Сохранение данных уже подготовленных проб	107
6.10.4	Повторное измерение анализируемых твердых проб.....	108
6.11	Промывка системы.....	109
7	Калибровка.....	110
7.1	Отображение калибровочной кривой	111
7.2	Отображение результатов калибровки.....	112
7.3	Модификация калибровочной кривой	113
7.4	Замена калибровочных стандартов путем повторного измерения	114
8	Контроль качества (КК)	115
8.1	Отображение вкладок КК	115
8.2	Параметры вкладок КК	116
8.3	Вводы и пределы вкладок КК	117
9	Управление и мониторинг прибора и аксессуаров.....	118
9.1	Спектрометр.....	118
9.1.1	Функциональный тест устройства: contrAA	118
9.1.2	Измерение пика спектров на выбранной длине волны	120
9.1.3	Непрерывное измерение	120
9.2	Пламя.....	122
9.2.1	Проверка функции пламени	122
9.2.2	Оптимизация пламени.....	125
9.3	Печь	128
9.3.1	Отображение программы печи.....	129
9.3.2	Отображение матричных модификаторов, обогащения и предварительной обработки	129
9.3.3	Оптимизация программы печи.....	130
9.3.4	Графическое отображение программы печи и нанесение покрытия на графитовую трубку	132

9.3.5	Другие функции печи	133
9.4	Гидридная система	135
9.4.1	Проверка функций гидридной системы	135
9.4.2	Проверка гидридной системы на наличие ошибок	137
9.5	Параметры автосамплера	138
9.5.1	Автосамплер для пламенной атомизации	138
9.5.2	автосамплер для техники графитовой печи	145
9.5.3	Автосамплер твердых проб	153
10	Управление данными	157
10.1	Информация о функциях печати	157
10.1.1	Печать данных результатов.....	157
10.1.2	Печать других параметров анализа и установок	159
10.1.3	Адаптация шаблонов отчета	159
10.2	Управление всеми типами файлов.....	161
10.2.1	Управление методами и последовательностями.....	161
10.2.2	Управление данными результатов	163
10.2.3	Экспорт файлов линий/длин волн	165
10.2.4	Управление моделями коррекции.....	165
10.2.5	Удаление корректирующих спектров	166
10.2.6	Импорт шаблонов отчета	166
10.2.7	Управление рабочими листами.....	166
10.3	Управление единицами измерения	167
10.4	Управление базами данных для исходных растворов и проб КК	168
10.5	Создание предварительно заданных комментариев	168
10.6	Использование буфера обмена Windows.....	169
11	Параметры - настройка ASpect CS.....	170
11.1	Возможности отображения	170
11.2	Пути сохранения	171
11.3	Параметры ASCII/CSV-экспорта.....	172
11.4	Опции для непрерывного экспорта в формате ASCII.....	172
11.5	Опции для процесса анализа	173
11.6	Параметры продувки оптики.....	175
11.7	Параметры калибровки и коррекции бланка	176
12	Дополнительный модуль соответствия FDA 21 CFR Part 11	178
12.1	Управление пользователями	178
12.1.1	Иерархия и доступ к функциям	178
12.1.2	Управление пользователями – индикация и настройки.....	180
12.1.3	Общие настройки системы управления пользователями	181
12.1.4	Создание новой учетной записи пользователя.....	183
12.1.5	Изменение существующей учетной записи пользователя	184
12.1.6	Изменение пароля.....	184
12.2	Просмотр, печать и экспорт журнала событий.....	185
12.3	Электронные подписи	186
12.3.1	Подпись результатов измерения	186
12.3.2	Отображение подписи.....	187
12.4	AJ File Protection	187

13 Приложение	188
13.1 Обзор обозначений, используемых при отображении значений	188
13.2 Описание используемых алгоритмов спектральной коррекции фона	189
13.2.1 Коррекция фона "без опорн."	189
13.2.2 Коррекция фона "с опорн."	189
13.2.3 Коррекция фона IBC и IBC-m	190
13.2.4 Вычитывание спектров (коррекция постоянных структур)	190
13.3 Папка для хранения файлов ASpect CS	191

1 Программное обеспечение ASpect CS

ASpect CS – это управляющее программное обеспечение (ПО) для проведения анализов на атомно-абсорбционных спектрометрах Analytik Jena. Программное обеспечение поддерживает атомно-абсорбционные спектрометры (AAC) серии contrAA. 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

Данный документ основан на версию ASpect CS 2.3.

Область применения

ПО ASpect CS 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 CS не по назначению. Работать с ПО ASpect CS и управляемыми им устройствами должен только обученный и проинструктированный персонал. Пользователь должен быть ознакомлен с содержанием настоящего руководства по эксплуатации и содержанием руководств соответствующих устройств.

1.1 Запуск ASpect CS

ASpect CS запускается вместе с AAC. При этой процедуре устройство подключается к ПК и инициализируется в ПО.

- Включить AAC и автосамплер.
- Щелкнуть по ярлыку ASpect CS на рабочем столе Windows. ASpect CS запустится.
- Если установлена опциональная функция управления пользователями, на экран выводится запрос имени пользователя и пароля. После успешного ввода данных программа ASpect CS активируется.

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

1.1.1 Окно Быстрый старт

После запуска программы и авторизации пользователя (только если установлена система управления пользователями) откроется окно **Быстрый старт**. Из него можно загрузить рабочий лист или без дополнительных предварительных настроек перейти в главное окно программы. Окно **Быстрый старт** можно также открыть из главного окна через пункт меню **Файл | Быстрый старт**.

ASpect CS 04.11.2021 10:57:29

Прибор: contrAA 800D ASpect CS Версия: 2.0 analytikjena
An Endress+Hauser Company

Оператор: AJ Analytik Jena
Лаборатория:
Режим: Пламя

Таблица	Последн. измен	По	Техника
TestWorksheet EA	08.01.2021 8:41	Analytik Jena	Графитовая печь (Стенка)
TestWorksheet FL	26.08.2021 15:49		Пламя

Конфигурация

Автосамплер: AS-FD
Поток сеплера: 54 поз.
Горелка: 50 mm

Favorites Недавние Предварит. заданные Все все (2)

☒ Симуляция

Замена лампы... Пропустить быстрый старт Выход из прогр. OK

Проверка системы

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.
Лаборатория	Можно ввести до 30 символов. Введенное последним обозначение сохраняется и выводится в виде информации в отчетах результатов.
Техника	В зависимости от конфигурации AAC можно выбрать различные техники атомизации. Графитовая печь (Стенка) Электротермическая атомизация (EA) в стандартной графитовой трубке Пробы используются в жидком состоянии. Атомизация пробы происходит на стенке графитовой трубки. Графитовая печь (Платформа) Электротермическая атомизация (EA) в графитовой трубке с платформой Пробы используются в жидком состоянии. Атомизация пробы происходит на платформе графитовой трубки. Пламя Атомизация в пламени с системой горелка-распылитель Гидрид. Анализ гидридообразующих металлов и ртути в кварцевой кювете, при необходимости в сочетании с обогащением ртутью HydrEA Анализ гидридообразующих металлов и ртути с обогащением в графитовой трубке с покрытием Графит. печь, тверд Электротермическая атомизация (EA) в графитовой трубке для твердых проб Пробы переносятся в графитовую трубку автосамплером для твердых проб (SSA 600 или SSA 6z) на платформах для проб.

Опция / Кнопка	Описание
Симуляция	В целях обучения или демонстрации программу можно использовать без подключенного анализатора. При активации все функции устройства (включая сбор и обработку измеренных значений) отрабатываются в режиме моделирования.
Проверка системы	Установление соединения между ААС и ПК (программным обеспечением) При нажатии кнопки происходит распознавание и настройка спектрометра и аксессуаров в зависимости от выбранной техники атомизации.
Замена лампы	Поддерживаемая программой замена ксеноновой лампы При щелчке по кнопке запускается руководство по замене лампы.
Пропустить быстрый старт	Переход к главному окну без выбора рабочего листа
Выход из прог.	Закрытие окна Быстрый старт и завершение работы программы
ОК	После выбора рабочего листа переход к главному окну и запуск процесса измерения

Таблица рабочих листов

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

Вкладка	Содержание
Favorites	Рабочие листы с обозначением Избранное
Недавние	Последние рабочие листы
Предварит. заданные	Рабочие листы Analytik Jena, которые были установлены при установке программы
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. Если выделено нескольких элементов, отобразятся все рабочие листы, в которых содержится хотя бы один из элементов (логика ИЛИ). При этом поиск осуществляется как в методах, которые непосредственно связаны с рабочим листом, так и в методах, загружаемых в связанной последовательности.

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.

- ▶ Установить комплектующие на анализатор, после чего включить комплектующие и устройство.
- ▶ Запустить программу.
Откроется окно **Быстрый старт**.
- ▶ Ввести необходимые данные в поля **Оператор** и **Лаборатория**.
- ▶ В списке **Техника** выбрать технику атомизации.

- ▶ Нажать кнопку **Проверка системы**.
Будет выполнена инициализация и подключение прибора и аксессуаров к ПК/программному обеспечению. В поле выше отображается конфигурация устройства. Также проверяется соответствие установленных аксессуаров выбранной технике.
- ▶ В таблице рабочих листов выделить нужный рабочий лист.
- ▶ Нажать кнопку **ОК**.
✓ Откроется главное окно программы. 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.

См. также

📖 Окно Быстрый старт [▶ 7]

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.

- ▶ Установить комплектующие на анализатор, после чего включить комплектующие и устройство.
- ▶ Запустить программу.
Откроется окно **Быстрый старт**.
- ▶ Ввести необходимые данные в поля **Оператор** и **Лаборатория**.
- ▶ В списке **Техника** выбрать технику атомизации.
- ▶ Нажать кнопку **Проверка системы**.
Будет выполнена инициализация и подключение прибора и аксессуаров к ПК/программному обеспечению. В поле выше отображается конфигурация устройства. Также проверяется соответствие установленных аксессуаров выбранной технике.
- ▶ Выбрать Пропустить быстрый старт.
Откроется главное окно программы.

Основной ход процедуры 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 идентификации пробы являются текстовыми файлами, и их можно также создавать 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 запуска процедуры 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.

1.1.4 Открытие приложения во втором окне

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

Запустите программу во втором окне с помощью пункта меню **Файл | Старт оф-флайн**.

См. также

📖 Обработка измерений параллельно с выполнением анализа [► 85]

1.2 Завершение работы ASpect CS и выключение анализатора

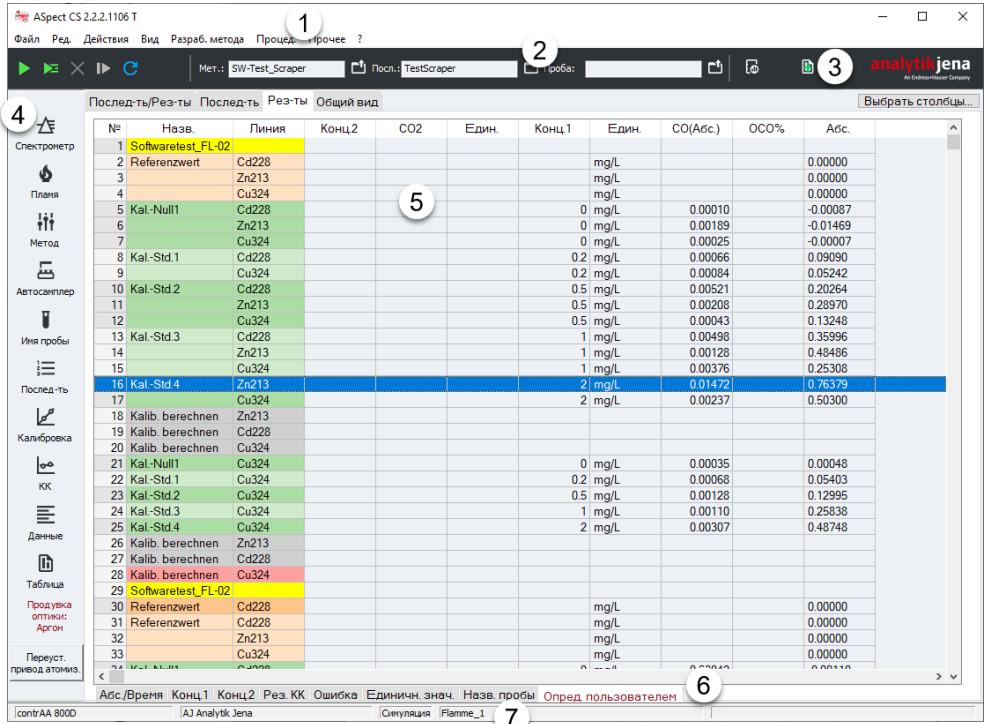
Всегда отключайте анализатор с программной поддержкой, завершив работу ASpect CS.

- ▶ Выбрать пункт меню **Файл | выход**.
- ▶ Если на этот момент данные о методе, последовательности и данные с информацией о пробах еще не сохранены, появится указание сохранить данные.
- ▶ В зависимости от установленных комплектующих и используемой техники атомизации, выводятся дальнейшие уведомления о действиях с программной поддержкой:
 - Пламя: погасить горящее пламя
 - Гидридная система: Промывка гидридной системы
 - Ксеноновая лампа: выключить ксеноновую лампу**Указание:** после отключения лампы необходимо выдержать время ожидания 30 с до выключения contrAA. Отсчет времени ожидания графически отображается на экране.
- ▶ Только contrAA 800: если работает продувка оптики, на экран выводится запрос об отключении промывки.
 - ✓ После отработки операций работа ASpect CS завершается, и анализатор выключается.

1.3 Общие инструкции по эксплуатации

1.3.1 Рабочий интерфейс

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



Основные компоненты рабочего интерфейса

№	Описание
1	В строке заголовка находится информация о версии программного обеспечения, подключенном устройстве, технике и (если загружен) рабочем листе.
2	Через строку меню осуществляется доступ ко всем функциям программы.
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 блок 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, еще раз щелкнув по символу.
5	В главном окне на различных вкладках отображаются последовательность и результаты измерений.
6	Некоторые основные вкладки содержат дополнительные подвкладки , расположенные в нижней области окна.
7	В строке состояния в нижней области экрана отображается информация о подключенном устройстве, зарегистрированном пользователе и имени отображаемого в данный момент файла результатов.

1.3.2 Использование справки

Справка по работе с программой доступна через пункт меню ? | **Помощь: заголовки**. В ходе работы с окнами/ диалоговыми окнами ASpect CS можно активировать контекстно-ориентированную функцию справки, нажав клавишу **F1**.

При перемещении курсора по кнопкам программа показывает на экране краткую информацию (всплывающие подсказки) о кнопках.

1.3.3 Обзор строки меню, панели инструментов и строки символов

Функции строки меню

В верхней области интерфейса программы 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	■ Создание, открытие и сохранение методов, последовательностей и данных с информацией о пробах ■ Открытие файлов результатов ■ Удаление методов и последовательностей ■ Экспорт данных спектров ■ Печать активного окна или отчета ■ Запуск режима печати отчета ■ Запуск программы в режиме офлайн или онлайн ■ Открыть Быстрый старт ■ Создать рабочий лист ■ Завершение работы программы ■ Непосредственный вызов последних открытых методов и последовательностей
Ред.	■ Копирование и вставка содержимого текстовых полей и областей ввода ■ Копирование выделенных строк списка результатов в буфер обмена ■ Удаление содержимого списка результатов
Действия	■ Открыть/закрыть печь, отжиг печи, форматирование печи ■ Гашение пламени ■ Активация скребка ■ Промывка системы (гидридная система, автосамплер или система фиксации горелки) ■ contrAA 800: инициализация привода атомизатора
Дисплей	■ Открытие и закрытие окон, отображающих графики и информацию во время процесса анализа, например, кривые сигналов. ■ Выбор шкалы оси сигнала для графиков ■ Отображение отдельных значений проб
Разраб. метода	■ Открытие окон, обходимых для разработки методов ■ Редактирование рабочих листов ■ Открыть справочник по элементам
Процед.	■ Запуск, приостановка и отмена процедуры измерения ■ Запуск отдельных строк последовательностей ■ Пересчет результатов
Прочее	■ Открытие окон Данные и Опции ■ Поиск проб ■ Активация научного режима для разработки метода

Пункт меню	Описание
	Активация монитор-режима для документирования диагностических данных (требуется только для диагностических мероприятий по требованию авторизованного сервисного персонала)
Система	Доступно при установленном опциональном модуле 21 CFR Part 11 Compliance ASpect CS - Конфигурирование системы управления пользователями - Изменение пароля - Просмотр контрольного журнала (Audit Trail) - Подписывание результатов
?	Просмотр справки и информации о версии ПО

Панель инструментов

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

Инструмент	Описание
	Запуск последовательного измерения
	Измерение выделенных строк в последовательности
	Немедленная отмена текущей процедуры измерения
	Остановка процедуры измерения после отработки текущего измерения Еще будут выполнены необходимые шаги по очистке атомизатора.
	Пересчет результатов
	Открыть файлы Сохраненные методы, последовательности или идентификаторы проб можно загрузить в программу и использовать для текущего анализа.
	Открыть справочник по элементам
	Создать новый рабочий лист
	Только во втором окне программы: обновить список результатов

Строка символов

Строка символов обеспечивает быстрый доступ к важнейшим функциям программы. Щелчок по кнопке 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.

Экранная кнопка	Описание
	Проверка функций спектрометра
	Открыть окно пламени
	Открыть окно печи

Экранная кнопка	Описание
	Открыть окно Гидрид. система
	Открыть окно метода
	Настройка автосамплера
	Открыть окно с информацией о пробах
	Открыть окно последовательности
	Открыть окно калибровки
	Открыть окно с данными контроля качества
	Открытие системы управления данными
	Управление рабочими листами, открытие сохраненных рабочих листов
Переуст. привод атомиз.	Только contrAA 800 Устройство автоматически контролирует правильное позиционирование атомизатора. Дополнительно щелчком по этой кнопке можно снова переместить атомизатор в исходное положение, например, после механического столкновения с горелкой.

1.3.4 Наиболее часто используемые элементы управления

В программе 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 применить настройки
Отмена	Заккрыть окно, отклонить изменения
Принять	Применить настройки, не закрывая окно
Заккрыть	Заккрыть окно, настройки не сохраняются
Откр.	Открыть выбранное окно для загрузки файла или блока данных
Сохран.	Открыть выбранное окно для сохранения файла или блока данных
	Открыть диалоговое окно выбора, например, для выбора пути
	Открыть окно Печать . Из этого окна можно распечатать содержимое активного окна или экспортировать файл.

Таблицы

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

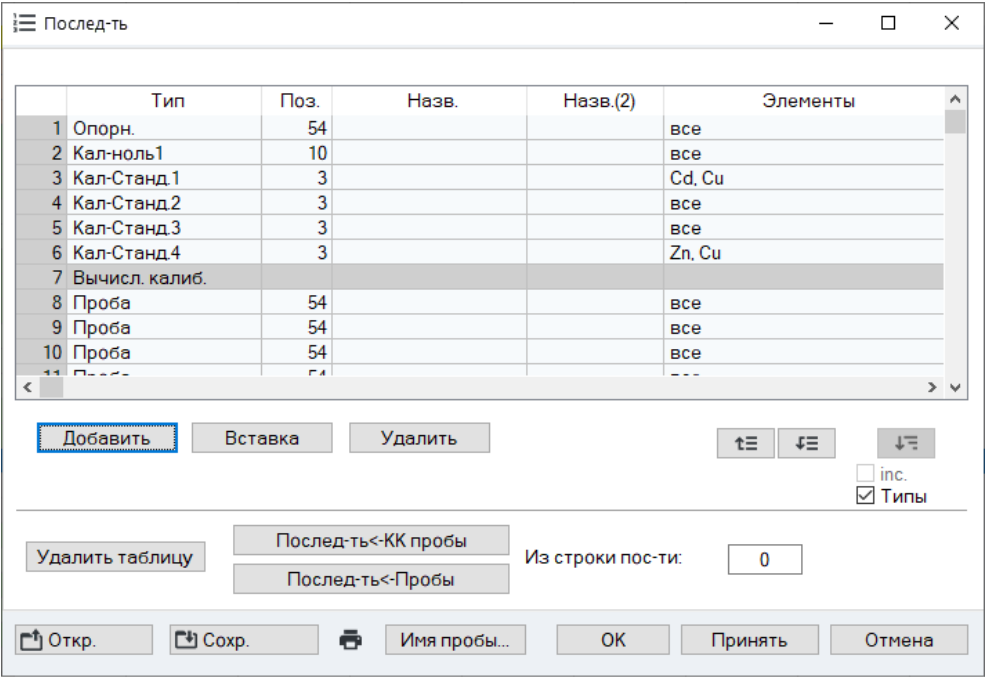
- ▶ Для выделения строки таблицы щелкните по соответствующей строке в первом столбце таблицы, выделенном серым цветом. Затем можно перемещать курсор строки клавишами со стрелками.
- ▶ Для изменения ширины столбца переместите курсор мыши к соответствующей линии границы между двумя столбцами таким образом,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

В областях ввода дополнительно доступны следующие функции:

- ▶ Функциональная клавиша **F2** активирует режим редактирования. В этом режиме клавиши со стрелками используются для посимвольного редактирования. При повторном нажатии **F2** активируется стандартный режим, в котором клавиши со стрелками используются для навигации по ячейкам.
- ▶ С помощью пунктов меню **Ред. | Копир. и Ред. | Встав.**, или сочетанием клавиш **Strg+C** и **Strg+V** текст можно скопировать в буфер обмена Windows вставить в нужное место.

Кнопки в таблицах

Экранная кнопка	Описание
Добавить	Добавляет новую строку таблицы в конец списка
Вставка	Вставляет новую строку таблицы перед выделенной строкой
Удалить	Удаляет выделенную строку таблицы
	Перемещает выделенную строку таблицы на одну позицию вверх Указание: чтобы переместить строку таблицы, ее необходимо выделить. Для этого щелкните по номеру соответствующей строки в первом столбце таблицы.
	Перемещает выделенную строку таблицы на одну позицию вниз
	Применяет значение выделенной ячейки ко всем последующим строкам таблицы аналогичного типа пробы Если активировано поле inc. (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 в строке символов.

Символ	Описание
	Активирует режим масштабирования Активировав кнопку, удерживая нажатой левую клавишу мыши, выделите область графика для увеличения рамкой, и отпустите кнопку.
	Отключает режим масштабирования и возвращает первоначальный масштаб
	Активирует текстовый режим Активировав кнопку, удерживая нажатой левую клавишу мыши, сделайте на графике рамку и введите в нее текст. Двойной щелчок по существующему тексту открывает окно, в котором текст можно отредактировать или удалить. Сочетание клавиш Strg + правая клавиша мыши позволяет переместить существующий текст.
	Активирует режим выделения в окнах кривой сигнала или спектров При помощи левой клавиши мыши можно добавить надписи к пунктам меню.

Функциональные клавиши

Клавиша	Функция
F1	Вызов контекстно-ориентированной справки
F2	Редактирование ячеек таблицы
F6	Измерение выделенной строки последовательности
F7	Открытие дополнительных окон просмотра в ходе процедуры измерения (например, кривая сигнала)
F8	Закрытие окна просмотра
F10	Переключение между строкой меню рабочей области и окном результатов для работы с клавиатуры
F11	Продолжить остановленную процедуру измерения

Клавиша	Функция
F12	Запуск и остановка процедуры измерения

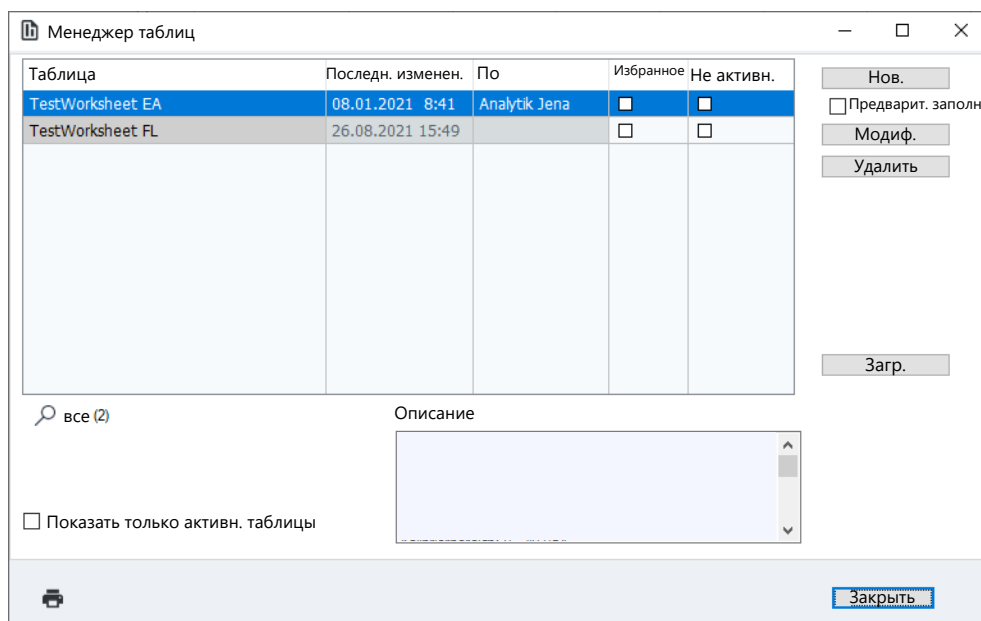
Использование принтера В программе используется заданный в Windows принтер по умолчанию.

2 Управление рабочими листами

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 процедуру измерения.

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

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



Элементы в окне Менеджер таблиц

Опция/кнопка	Описание
Нов.	Создать новый рабочий лист
Предварит. за-полн.	Применить активную последовательность и метод как шаблон
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 неактивные
Описание	Описание выделенного 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	Автор последнего изменения. Имя пользователя применяется из окна быстрого запуска.
Избранное	Рабочий лист на вкладке Favorites отображается в окне Быстрый старт .

Столбец таблицы	Описание
Не активн.	Рабочий лист не отображается в окне Быстрый старт . Однако 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

Создать рабочий лист можно в окне **Новая таблица**.

Новая таблица

Назв. : ★ Избранное
☐ Не активн.

Метод: 

08.01.2021 8:40

Послед-ть: 

08.01.2021 8:40

Назв. пробы:

Файл рез-тов:

Папка:

Назв. :

C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectCS\EA\RESULTS\Filename.tps

Элементы:

Последн. изменен. 30.08.2021 13:25

Описание:

Элементы в окне Новая таблица

Опция	Описание
Назв.	Ввод имени рабочего листа
Метод	Метод, сохраненный в рабочем листе Щелкнув по значку  , открыть окно базы данных и выбрать метод.
Послед-ть	Последовательность, сохраненная в рабочем листе Щелкнув по значку  , открыть окно базы данных и выбрать последовательность.
Имя пробы	Опциональные настройки для загрузки идентификационного файла пробы

Опция	Описание
	(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. Щелкнуть по значку  и выбрать папку. Загрузить файл Sample ID При загрузке рабочего листа автоматически загружается идентификационный файл пробы. Щелкните по значку  и выберите файл. С помощью символов-заполнителей "*" и "?" Вы также можете задать маску файла.
Файл рез-тов	Опциональные настройки для сохранения результатов (нет) Процедура измерения запускается в окне Старт, в котором указаны имя файла результатов и его расположение. Всегда создавать новый файл (добавлять печать времени) Результаты процедуры измерения всегда сохраняются в новом файле. Имя файла состоит из постоянной части (имени) и метки времени измерения. Выберите папку, в которой будет сохранен файл, и введите имя. Создать и добавить к файлу При первом запуске создается файл результатов. При каждом последующем запуске 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 отображаются в окне Быстрый старт и в окне Менеджер таблиц.
Избранное	Щелчок по звездочке позволяет добавить рабочий лист в Избранное: Желтая звездочка: Избранное Серая звездочка: Не избранное
Не активн.	Если не активировано, рабочий лист не отображается в окне быстрого запуска.

Спецификация рабочего листа

- ▶ Чтобы создать новый рабочий лист, щелчком по кнопке  в строке символов открыть окно **Менеджер таблиц** и выбрать **Нов..**
Или на панели инструментов выбрать .
Откроется окно **Новая таблица**.
- ▶ Выбрать метод и последовательность.
Примечание: в одну последовательность можно подгрузить дополнительные методы в виде действий.
- ▶ Опционально можно задать параметры сохранения файла результатов и использования идентификационного файла пробы, а также отредактировать описание.
- ▶ Закрыть окно, нажав кнопку **ОК**.
 - ✓ Новый рабочий лист появится в окне **Менеджер таблиц** и его можно будет загрузить.

См. также

 Запуск процедуры измерения [► 79]

2.2 Редактирование рабочего листа

Можно редактировать все настройки в имеющемся рабочем листе.

- ▶ Щелчком по значку  в строке символов открыть окно **Менеджер таблиц**.
- ▶ Выделить рабочий лист и выбрать **Модиф..**
- ▶ Откроется окно **Редактир. таблицу**.
- ▶ Изменения вносятся по аналогии с созданием нового рабочего листа.
- ▶ Закрыть окно **Редактир. таблицу**, щелкнув по кнопке **ОК**.
 - ✓ Массив данных рабочего листа будет обновлен.

2.3 Удаление рабочего листа

Ненужный рабочий лист можно удалить.

- ▶ Щелчком по значку  в строке символов открыть окно **Менеджер таблиц**.
- ▶ Выделить рабочий лист и выбрать **Удалить**.
 - ✓ После контрольного вопроса рабочий лист удаляется.

2.4 Загрузка рабочего листа

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

- ▶ Открыть окно **Менеджер таблиц**, щелкнув по значку  в строке символов.
- ▶ Выделить рабочий лист в таблице и нажать кнопку **Загр..**.
 - ✓ Загрузится рабочий лист, а в главном окне отобразится соответствующая 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 актуальные версии метода и последовательности. При загрузке метода или последовательности, отличающихся от рабочего листа, параметры файла результатов и ID проб в рабочем листе сбрасываются.

3 Методы

В методах сохранены необходимые для анализа параметры:

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

На основании метода можно создавать последовательности измерения. В последовательностях задан порядок измерения проб и других операций 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. Можно создавать новые методы, а также изменять, сохранять и загружать методы. Дополнительные функции по управлению методами доступны в окне **Данные / Управл. данными**.

См. также

 Управление методами и последовательностями [► 161]

3.1.1 Создание нового метода

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

- Выбрать пункт меню **Файл | Новый метод**.

Или, если активированных методов нет, щелкнуть по значку .

- В окне **Новый метод** выбрать одну из трех опций:
 - **На основе параметров по умолч.:** открывать окно **Метод** только с настройками по умолчанию для калибровки и статистики.
 - **На основе текущ. параметров:** открывать окно **Метод** с актуальными параметрами метода.
 - **На основе сохран. метода:** выбрать метод в окне базы данных методов **Открыть метод**.
- Подтвердить выбор, нажав **[OK]**.
Откроется окно **Открыть метод** с выбранными преднастройками.

- ▶ Задать параметры метода на различных вкладках и внести необходимые коррективы.
- ▶ Активировать параметры метода кнопками **[OK]** или **[Принять]**.
 - ✓ Сейчас можно сохранить метод или использовать его для следующего анализа. Для анализа на основании метода создается последовательность и опционально заполняется таблица ID-проб. После этого запускается измерение.

3.1.2 Сохранение метода

После ввода параметров метода сохраните метод в базе данных. Это позволит загрузить метод позже для других измерений или добавить его в рабочий лист. Методы сохраняются в базе данных в окне **Сохранение метода**. При этом Вы можете сохранять в методе другие данные для разбивки методов по категориям и облегчения их поиска.

Элементы в окне Сохранение метода

Опция	Описание
Назв.	Наименование метода
Кат.	Категория (три символа) для дальнейшей маркировки и упорядочивания методов Ввод является опциональным.
Таблица	Обзор существующих методов
Сорт. по:	Опции этой группы позволяют упорядочить список методов. При активированном контрольном поле Только текущ. версия при одноименных методах будет отображаться только последняя версия.
Сохранение данных калиб-ки	Сохранение существующих калибровочных кривых в методе Калибровочные кривые можно будет использовать для дальнейших анализов.
Описание	Ввод более подробных пояснений по методу (опция) Щелчок по значку открывает список предварительно заданных комментариев. Управление этими комментариями осуществляется в окне Данные / Описания по умолчанию .

Сохранение метода

- ▶ В окне **метод** выбрать **Сохранение** и открыть окно **Сохранение метода**. Или выбрать пункт меню **Файл | Сохранение | Метод**.

- ▶ В окне **Сохранить метод** выбрать имя метода и другие параметры.
- ▶ Подтвердить настройки кнопкой **ОК**.
 - ✓ После этого метод будет сохранен в базе данных. При использовании уже существующего имени метода в базе данных будет создана новая версия метода.

Примечание: Метод сохраняется также в файле результатов измерений. После загрузки файла результатов можно также восстановить метод. Другие функции управления методами доступны в окне **Данные / Данные**.

См. также

- 📄 Создание предварительно заданных комментариев [▶ 168]
- 📄 Управление методами и последовательностями [▶ 161]

3.1.3 Загрузка метода

Вы можете загружать сохраненные методы и на их основе вместе с последовательностью запускать измерение. Загрузить параметры метода можно из базы данных методов и из существующего файла результатов.

Загрузка из базы данных

- ▶ Откройте окно базы данных. Это можно сделать следующими способами:
 - На панели инструментов щелкнуть по значку папки  рядом с полем **Метод**.
 - Выбрать пункт меню **Файл | Открыть метод**.
 - Открыть окно **Метод**, щелкнув по значку , и выбрать **Откр.**
- ▶ Или ограничить отображаемые методы, выбрав категорию в поле **Кат..** Чтобы показать все методы, убрать запись в поле **Кат..**
- ▶ Или, если для методов с несколькими версиями нужно показать только последнюю, активировать опцию **Только текущ. версия**.
- ▶ Выделить метод в списке и нажать кнопку **ОК**.
 - ✓ Откроется окно **метод** с сохраненными параметрами.

Загрузка из файла результатов

Из отображенного в главном окне файла результатов можно извлечь метод. Это производится автоматически при отображении отдельных значений проб.

- ▶ Двойным щелчком щелкнуть по любой пробе в списке результатов или, щелкнув правой клавишей мыши по пробе, выбрать из контекстного меню пункт **Единичн. Значения**.
- ▶ Появится вопрос, следует ли загрузить параметры метода. Выбрать **Да**.
 - ✓ Теперь можно открыть метод, щелкнув по значку .

3.2 Спецификация параметров метода

В окне **Метод** задаются параметры измерения для анализа и параметры обработки результатов.

Открыть окно **Метод**, щелкнув по значку .

Кнопки в окне Метод

В нижней области окна расположены всегда доступные кнопки.

Экранная кнопка	Описание
Откр.	Открытие сохраненного метода
Сохран.	Сохранение актуальных параметров метода
	Печать параметров метода
	Просмотр свойств метода
ОК	Применить параметры в окне и закрыть окно
Принять	Применить параметры в окне, но оставить окно открытым
Отмена	Не применять измененные параметры и закрыть окно

См. также

- Наиболее часто используемые элементы управления [► 15]
- Определение информации о пробах и проб КК [► 78]

3.2.1 Окно Метод / Строки – спецификация аналитических линий

В окне **Метод / Строки** выберите аналитические линии метода. Будут загружены данные из справочника по элементам с предустановками по атомизации элементов.

Элементы в окне Метод / Строки

Метод

СтрокиПламяТранспорт пробыОбработкаКалиб.СтатистикаККСKKКВывод

№	Элем.	Тип	Дл.волн. [nm]	Линия	Режим Инт.	Основные линии	Время считывания [s]	Группа	Порядок
1	Zn	Abs	213.8570	Zn213			3.0	1	2
2	Cd	Abs	228.8018	Cd228			3.0	1	1
3	Cu	Abs	324.7540	Cu324			3.0	1	3

Линия

ДобавитьВставкаУдалитьМодиф.

Комбинир. линииОптимизир. порядок измерен.

Откр.

Сохран.

ОК

Принять

Отмена

Параметры таблицы линий

Столбец таблицы	Описание
№	Последовательность выбранных линий в таблице
Элем.	Символ анализируемого элемента
Тип	Выбор режима измерения Абс.: режим абсорбции Эмис.: режим эмиссии
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.
Режим Инт.	Выбор опции анализа сигнала Средн.: среднее значение оптической плотности за время интегрирования Площадь: площадь пика оптической плотности за время интегрирования Высота: высота пика оптической плотности за время интегрирования Опция Средн. используется при достаточном количестве проб, т. е. с пламенной атомизацией, и реже с гидридной техникой. Опции Площадь и Высота используются при атомизации определенного количества проб. Их выбирают при использовании режима графитовой трубки, с гидридной техникой или пламенной атомизацией в сочетании с инжекционным модулем.
Основные линии	Индикация, с какой аналитической линией одновременно измеряется текущая линия (синхронное измерение) Общую продолжительность анализа можно сократить, зарегистрировав линии, расположенные почти рядом, посредством настройки спектрометра. При щелчке по Комбинир. линии отобразятся возможные сочетания.
Время считывания	Общее время измерения для аналитической линии
Группа	Только пламенная атомизация Аналитические линии с одинаковым номером группы измеряются при непрерывном потоке проб, т. е. в ходе наезда на следующую аналитическую линию и настройки горелки канюля автосамплера остается погруженной в пробу. Так сокращается время задержки между анализами отдельных элементных линий и тем самым также общее время измерения. Между различными группами автосамплер появляется из пробы. Поток проб к горелке прерывается. При значительном изменении потока горючего газа и высоты горелки элементы назначаются разным группам. Тогда время задержки между анализами используется для стабилизации настроек пламени.
Порядок	Последовательность в ходе анализа Последовательность измерения может быть задана произвольно. Только пламенная атомизация Щелчок по кнопке Оптимизир. порядок измерен. позволяет автоматически, по возрастанию потоков горючего газа, задавать порядок.

Кнопки группы Строки

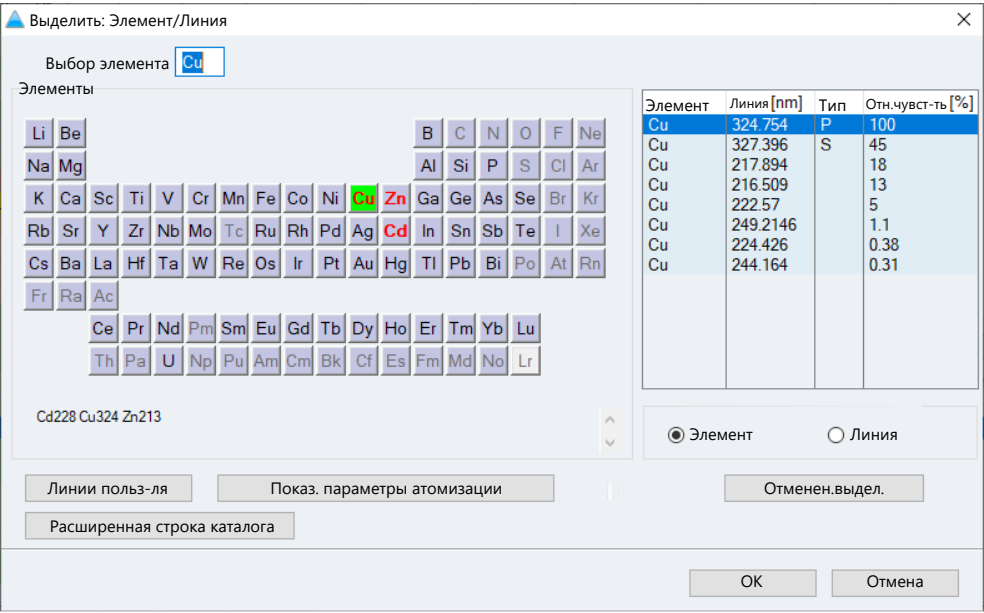
Кнопки **Добавить**, **Вставка** и **Модиф.** позволяют добавить в таблицу линий дополнительные аналитические линии или отредактировать выбранную линию. По щелчку по одной из этих экранных кнопок откроется окно **Выделить: Элемент/Линия** для ввода дальнейших данных. Кнопка **Удалить** позволяет удалить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

Дополнительные экранные кнопки

Экранная кнопка	Описание
Комбинир. линии	Линии, которые можно учесть в настройке спектрометра, можно измерить одновременно. Это позволяет сократить продолжительность измерения.
Оптимизир. порядок измерен.	Только пламенная атомизация Упорядочить линии по возрастанию потоков горючего газа

3.2.1.1 Вставка аналитических линий в таблицу линий

Выбор аналитических линий осуществляется в окне **Выделить: Элемент/Линия**. Для вызова окна **Выделить: Элемент/Линия** выберите в окне **метод / Строки** кнопку **Добавить**.



Элементы в окне Выделить: Элемент/Линия

Периодическая система содержит все анализируемые посредством ААС элементы (темно-серые экранные кнопки и черные значки элементов). "Светло-серые" элементы недоступны для анализа посредством ААС.

Таблица линий содержит все доступные для выбора линии со следующими данными:

Столбец таблицы	Описание
Элем.	Элемент
Дл.волн.	Аналитическая длина волны в Нм
Тип	Тип линии Р: первичная длина волны. Эта длина волны – самая чувствительная линия с относительной чувствительностью 100%. S: вторичная длина волны. Вторичная длина волны имеет вторую по величине чувствительность.

Столбец таблицы	Описание
	Примечание: не всегда первичная длина волны является линией, рекомендуемой для измерения. Более подробные сведения см. в Справ. по элементам – Примечан..
Отн.чувст-ть	Чувствительность относительно первичной длиной волны P
Элемент / Длина волны	Упорядочить таблицу линий по возрастанию по химическому символу или длине волны
	Открыть справочник по элементам с рекомендуемыми настройками анализов

Выбор линий

- ▶ В окне **Метод / Строки** выбрать **Добавить** или **Вставка**.
Откроется окно **Выделить: Элемент/Линия**.
- ▶ В периодической системе щелкнуть по символу элемента. Темно-серые экран-ные кнопки являются доступными для выбора элементами. Тем самым в табли-це линий отобразятся только линии выбранного элемента.
Или введите символ элемента в поле **Выбор элемента**.
Чтобы показать полный список элементов в таблице линий, удалите данные, введенные в поле **Выбор элемента**.
- ▶ Выделить линии в таблице линий.
- ▶ 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. Не всегда подходящей является основная линия. Посмотрите в справочнике по эле-ментам рекомендуемые параметры атомизации и возможные неисправности и ин-терференции.

Проверка параметров пламе-ни

При использовании пламенной атомизации выберите **Показ. параметры атомиза-ции**, чтобы проверить параметры атомизации выбранных линий. По возможности сочетайте только элементы в методе, для которого рекомендуется аналогичный тип пламени, т. е. с пламенем воздух/ацетилен или пламенем закись азота/ацетилен. При возврате в окно методов Строки в нем Вы сможете одним щелчком по Оптима-зир. порядок измерен. автоматически упорядочить линии по возрастанию по пото-кам горючего газа.

Расширенный каталог линий

После установки список линий содержит предварительно выбранные аналитиче-ские линии. Эти линии можно дополнить аналитическими линиями из расширенно-го каталога линий.

- ▶ Нажать кнопку **Расширенная строка каталога**.
- ▶ В списке щелчком мыши выделить линии.
Повторный щелчок мыши по отдельной линии позволяет снять выделение.
Щелчок по **Отменен.выдел.** позволяет снять все выделения.
- ▶ Щелчком по кнопке **Доб.** можно добавить выбранные линии в список.



ПРИМЕЧАНИЕ

Линии, добавленные из расширенного каталога линий, нельзя удалить из стан-дартного каталога.

Создание и редактирование собственных аналитических линий

Можно создавать собственные аналитические линии и использовать их для анализа.

- ▶ Нажать кнопку **Линии польз-ля**.
- ▶ В окне **Ред. линии** ввести данные новой линии: **Элемент**, **Длина волны** и **Тип**.
- ▶ Нажав кнопку **Доб.**, перенести введенные данные в собственный список линий.
- ▶ При щелчке по **Заккрыть** собственные линии сохраняются в списке линий окна **Выделить: Элемент/Линия**.

Собственные линии можно редактировать и снова удалять из списка линий.

- ▶ Редактировать линию: в списке окна **Ред. линии** выделить линию, ввести ее новые данные, после чего выбрать **Модиф.**.
- ▶ Удалить линию: выделить линию и нажать кнопку **Удалить**.

3.2.1.2 Синхронное измерение линий

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

- ▶ В окне **Метод / Строки** выбрать **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.

Столбцы таблицы/ экранная кнопка	Содержание
Контрольное поле/флажок	Если установлен, соответствующее сочетание линий в методе будет измеряться синхронно.
Основные линии	Для измерения сочетания линий используются параметры измерения Основные линии . 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 атомизации основной линии. Щелчок по кнопке **Использ. для измерения** позволяет поменять этот приоритет местами.

3.2.2 Окно метод / Пламя – спецификация параметров пламени

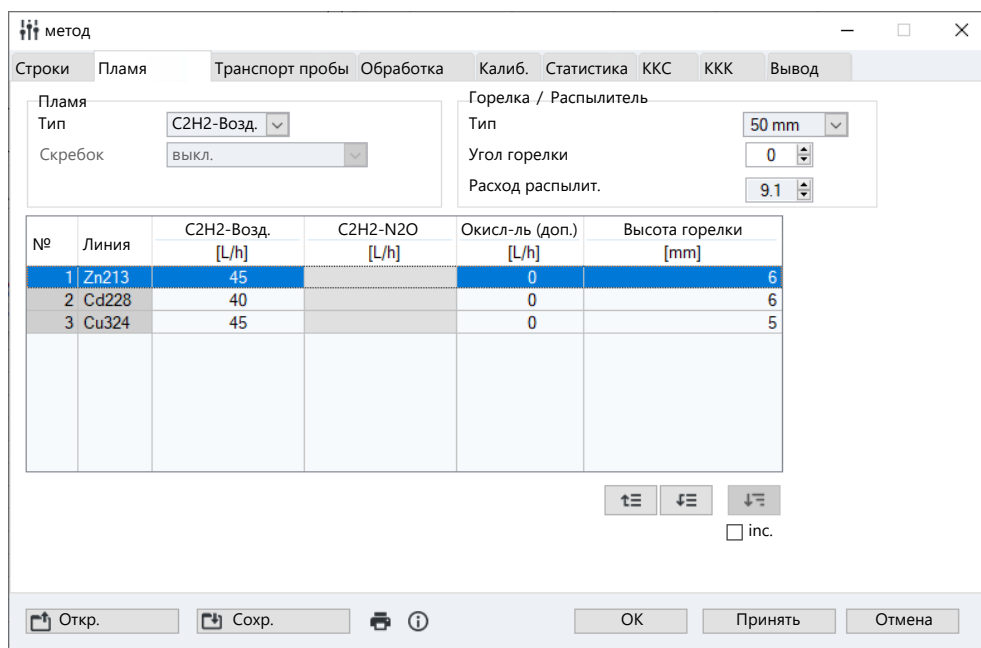
Только пламенная атомизация

В окне **метод / Пламя** задайте следующие параметры для атомизации в пламени:

- Параметры горелки и распылителя
- Тип пламени
- Газовые потоки
- Использование скребка

В качестве настроек по умолчанию сначала загружаются данные из справочника по элементам.

Чтобы открыть окно **метод / Пламя**, щелкните по значку .



№	Линия	C2H2-Возд. [L/h]	C2H2-N2O [L/h]	Окисл-ль (доп.) [L/h]	Высота горелки [mm]
1	Zn213	45		0	6
2	Cd228	40		0	6
3	Cu324	45		0	5

Независимые от линии на-
стройки

Независимые от линии параметры одинаковы для всех элементных анализов с текущим методом. Сначала выставьте параметры, которые действительно для всего метода и не могут быть изменены для отдельных аналитических линий.

Опция	Описание
Пламя / Тип	Выбор вида пламени C2H2-Возд.: Пламя ацетилен/воздух, поток горючего газа = 40 ... 120 л/ч C2H2-N2O: Пламя ацетилен/закись азота, поток горючего газа = 120 ... 180 л/ч Этот тип пламени можно выбрать только для горелки 50 мм.
Скребок	Скребок активируется для автоматического процесса анализа с горелкой 50 мм и пламенем ацетилен-закись азота. Он очищает головку скребка автоматически. Очистку можно выполнить перед каждой пробой, перед каждой группой, перед каждой линией, перед каждым измерением/ перед каждым 2-м/3-м измерением.
Горелка / Тип	Отображение используемого типа горелки. Устройство автоматически распознает горелку датчиком горелки.
Угол горелки	Угол поворота горелки относительно оптической оси

Опция	Описание
	Угол горелки устанавливается вручную по отметкам на горелке (нормальное положение - 0°). Ввод значения является опциональным и служит лишь для дополнения метода и данных в отчете. При вращении горелки вручную изменяется чувствительность. Правило: при повороте на 10° чувствительность снижается на коэффициент 2 ... 3. при повороте на 90° чувствительность снижается на коэффициент 10.
Расход распылит.	Расход всасывания распылителя Расход всасывания – это специфический параметр распылителя. Ввод значения является опциональным и служит лишь для дополнения метода и данных в отчете.

Параметры, зависящие от линии

В таблице приведены зависящие от линии параметры потоков горючего газа и высот горелки. Поиск значений в программе оптимизации пламени можно выполнить вручную или автоматически, после чего перенести значения в таблицу зависящих от линии параметров пламени. При работе с дополнительным окислителем оптимизировать пламя можно только вручную. Или можно отредактировать значения вручную.

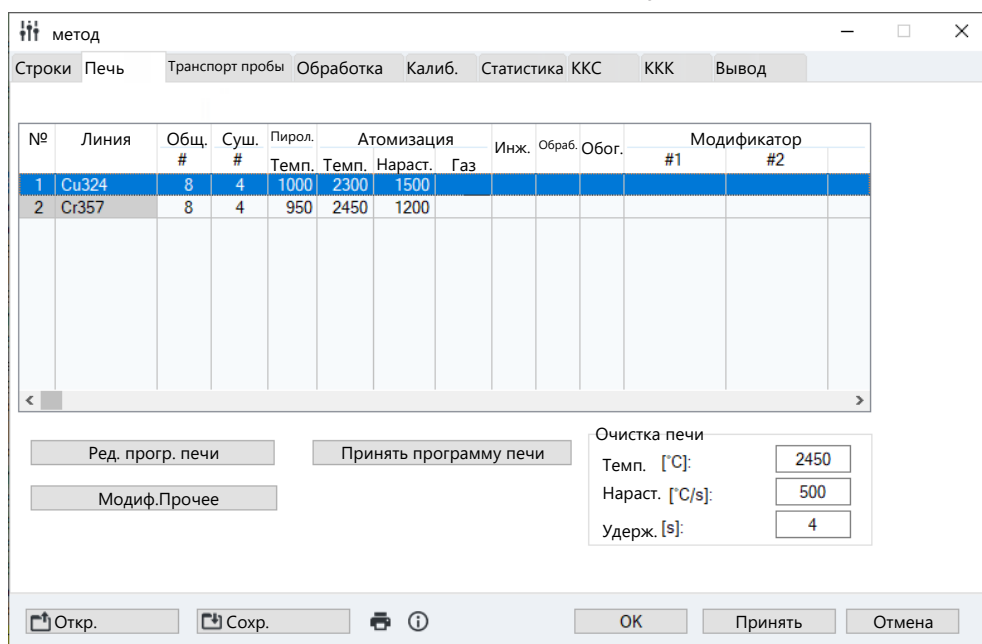
См. также

📄 Оптимизация пламени [▶ 125]

3.2.3 Окно Метод / Печь – спецификация параметров атомизации в графитовой печи

Окно **Метод / Печь** содержит наиболее важные параметры программ печи для атомизации анализируемых элементов. В качестве значений по умолчанию для атомизации отдельных элементов с техникой графитовой печи используются данные программ печи из справочника по элементам. Программу печи можно редактировать для каждой аналитической линии в окне **Печь**.

Чтобы открыть окно **Метод / Печь**, щелкните по значку .



The screenshot shows the 'Метод / Печь' window with the following components:

- Table:**

№	Линия	Общ. #	Суш. #	Пирол. Темп.	Атомизация			Инж.	Обраб.	Обог.	Модификатор	
					Темп.	Нараст.	Газ				#1	#2
1	Cu324	8	4	1000	2300	1500						
2	Cr357	8	4	950	2450	1200						
- Buttons:**
 - Ред. прогр. печи
 - Принять программу печи
 - Модиф.Прочее
- Form Fields:**
 - Очистка печи
 - Темп. [°C]: 2450
 - Нараст. [°C/s]: 500
 - Удерж. [s]: 4
- Footer:**
 - Отр. Сохр. (with icons)
 - OK, Принять, Отмена

Над таблицей содержится информация, для какого типа графитовой трубки (стенка или платформа) был создан метод. Если этот тип отличается от инициализированного типа, это также отображается на экране.

В списке перечислены следующие параметры программ печи:

Опция	Описание
Линия	Наименование аналитической линии
Общ.	Общее число шагов программы печи
Суш.	Число шагов сушки в программе печи
Пирол. Темп.	Температура пиролиза в °C
Атомизация	Детальное отображение данных температуры во время фазы атомизации Темп. Конечная температура фазы атомизации Нараст. Изменение температуры в фазе атомизации в °C/с Газ Подача инертного газа
Инж.	Нет отметки Проба вводится перед запуском программы печи. »ж» Проба вводится позже.
Обраб.	Термическая подготовка Если отмечено, выполняется термическая подготовка пробы и модификаторов.
Обог.	Обогащение пробы, если отмечено.
Модификатор	Дополнительно используемые модификаторы Для каждого измерения можно выбрать макс. пять модификаторов.

Экранные кнопки

Экранная кнопка	Описание
Ред. прогр. печи	Открывает окно Печь / Прогр-ма печи, в котором показана вся программа печи. Параметры печи можно адаптировать для каждой анализируемой элементной линии. Или можно открыть окно Печь / Прогр-ма печи, двойным щелчком щелкнув по строке аналитической линии в таблице линий.
Принять программу печи	Применяет параметры выделенной аналитической линии ко всем следующим линиям в списке.
Модиф.Прочее	Окно Печь / Модиф.Прочее для внесения параметров применяемых модификаторов

Очистка печи как дополнительная операция в последовательности

Печь будет тщательно очищена путем отжига в конце программы печи для элементной линии. Кроме того, в качестве дополнительного шага очистки в последовательности можно выбрать специальную операцию **Очистка печи**. Параметры для этой операции вводятся в области **Очистка печи**.

Опция	Описание
Темп.	Конечная температура, которая должна быть достигнута в процессе очистки отжигом
Нараст.	Скорость изменения температуры
Удерж.	Время выдержки конечной температуры

3.2.3.1 Редактирование программы печи

Если в окне **Метод / Печь** выбрать кнопку **Ред. прог. печи**, откроется окно **Печь / Прогр-ма печи** в доступной для редактирования форме.

The screenshot shows the 'Печь / Прогр-ма печи' window with the 'Модиф.Прочее' tab selected. It contains a table with 8 steps of a furnace program. Below the table are buttons for 'Добавить', 'Вставка', 'Удалить', and 'Удалить таблицу'. There is also a 'Задержка измерения' section with a 'Время [s]' input field set to 0. At the bottom, there are buttons for 'Прогр.из справ.', 'Пров. программу', 'Перенести шаг(и) сушки', and 'Линия:' with a dropdown menu showing 'Ga287'. The 'Общее время' is 151 s.

Шаг	*	Назв.	Темп. [°C]	Нараст. [°C/s]	Удерж. [s]	Время [s]	Газ	Продув.	Доб.	Инж.	Е/Р
1		Сушка	80	6	20	28.3	Макс	Стоп			
2		Сушка	90	3	20	23.3	Макс	Стоп			
3		Сушка	110	5	10	14.0	Макс	Стоп			
4		Сушка	350	50	20	24.8	Макс	Стоп			
5		Пиролиз	1100	300	10	12.5	Макс	Стоп			
6		Адап. газа	1100	0	5	5.0	Стоп	Стоп			
7		Атомизация	2300	1500	3	3.8	Стоп	Стоп			
8		Чистка	2450	500	4	4.3	Макс	Стоп			

Табличное отображение

В таблице перечислены все этапы, относящиеся к текущей программе печи с соответствующими настройками температуры, времени выдержки, подачи газа, применения модификаторов и обогащения/термической подготовки для каждой аналитической линии. После выбора аналитической линии сначала загружаются умолчания для справочника по элементам.

Экранные кнопки и поля ввода

Опция	Описание
Добавить	Добавить новую строку в конец списка
Встав.	Вставить новую строку перед выделенным местом в списке
Удалить	Удалить выделенные строки
Удалить таблицу	Удалить всю таблицу программы печи
	Копировать параметры выделенной строки во все последующие строки
Задержка измерения	При необходимости ввод временной задержки для получения сигнала измерения По умолчанию получение сигнала измерения осуществляется с началом шага программы печи Атомизация. Посредством ввода времени начало получения сигнала будет задержано на это время. Эта функция используется для того, чтобы начать измерение на температурном плато только после достижения температуры атомизации.
Прогр.из справ.	Загрузить программу печи для выделенной аналитической линии из справочника по элементам
Пров. программу	Проверка программы печи Если программа печи содержит ошибки, из-за которых отработка невозможна, шаг с ошибкой отображается в окне сообщений. В этом случае запуск программы невозможен. Измените ошибочный шаг или измените предшествующую шагу программу печи.

Опция	Описание
	При запуске программы проверяется вероятность перегрева печи, если известны все предельные условия. Если выбраны слишком высокие значения температуры или времени, после запуска программы появится сообщение об ошибке.
Перенести шаг(и) сушки	Применение параметров сушки выделенной аналитической линии ко всем аналитическим линиям
Перенести шаг(и) сушки	Применение параметров выделенной аналитической линии для отжига графитовой трубки ко всем аналитическим линиям

Спецификации параметров для отдельных шагов программы печи

При выборе аналитической линии сначала выполняется загрузка соответствующей программы печи из справочника по элементам.

- ▶ Кнопками **Добавить**, **Встав.** или **Удалить** добавить в программу печи дополнительные шаги или удалить шаги.
- ▶ Для редактирования щелкнуть по соответствующей ячейке таблицы. При ограниченном предварительном выборе в ячейке откроется список. Числа редактируются непосредственно в поле.

Шаги программы

В программе печи можно запрограммировать следующие шаги:

Шаг	Описание
Сушка	Испарение растворителя в пробе
Пиролиз	Термическая обработка, при которой происходит разложение пробы без подачи кислорода
Ash	Термическая обработка, при которой происходит термическое разложение пробы при подаче соответствующего выбранного добавочного газа (например, кислорода)
Атомизация	Высвобождение аналитических атомов
Чистка	Удаление остатков проб
Охлажд.	
Адап. газа	Адаптация газового потока под условия атомизации

Температурные параметры

Опция	Описание
Темп.	Конечная температура этого шага Диапазон значений: Максимальная температура до 3000 °C с шагом 1 °C Минимальная температура как минимум на 20 °C выше температуры охлаждающей воды (предпочтительно 35 °C) циркуляционного охладителя
Нараст.	Скорость нагрева для достижения целевой температуры Диапазон значений: От 1 до 3000°C/с с шагом 1°C/с; соответствующие возможные предельные значения: FP (полная мощность), NP (нет мощности)
Удерж.	Время выдержки целевой температуры Диапазон значений: от 0 до 999 с за вычетом времени нагрева
Время	Общая продолжительность шага (сумма времени нагрева и выдержки) рассчитывается автоматически.

Подача газа

Опция	Описание
Продув.	Поток инертного газа Стоп Подача отсутствует, действует 2 с до смены шага Мин Минимальный расход (0,1 л/мин Ar) Макс Максимальный расход (2,0 л/мин Ar)
Доб.	Поток дополнительного газа, например, воздуха, азота и т.д. Стоп Подача отсутствует, действует 2 с до смены шага Макс Максимальная скорость подачи (0,5 л/мин)

Инжекционный шаг/термическая подготовка

Опция	Описание
Инж.	Если шаг отмечен значком "*", проба (газ в методе HydrEA) будет введена в графитовую трубку только после этого шага (пипетирование в предварительно прогретую трубку).
Е/Р	Только анализ растворов Обогащение/термическая подготовка (Enrichment/Pretreatment) При обогащении проба предварительно подготавливается в ходе измерительного цикла до этапа обогащения, затем трубка снова охлаждается до комнатной температуры и вводится следующий объем пробы. Для термической обработки аналитического раствора и/или модификаторов эта опция будет выполнена до заявленного шага. В конце шага необходимо охладить графитовую трубку и ввести пробу. Число циклов обогащения, применение модификаторов и тип термической предварительной обработки задается в окне Печь / Модиф.Прочее .

Корректно оптимизировать программу печи для аналитической линии можно в окне **Печь / Оптимизация**.

3.2.3.2 Спецификации матричных модификаторов, обогащения и предварительной обработки

Если в окне **Метод / Печь** выбрать кнопку **Модиф.Прочее**, откроется окно **Печь / Модиф.Прочее** в доступной для редактирования форме. Вы можете указать следующие параметры:

- Использование и объем матричных модификаторов
- Обогащение в графитовой трубке путем повторяемого пипетирования и сушки
- Термическая предварительная обработка пробы

Печь

Прогр-ма печи Модиф.Прочее Диагр.

Модификатор

	Назв.	Объем	Поз.	после Проба
☒ #1	Pd(NO3)2	5	20	☐
☐ #2		0	0	☐
☐ #3		0	0	☐
☐ #4		0	0	☐
☐ #5		0	0	☐

Обогащ.
 Циклы

☐ Терм. постоянно Задержка нагрева

☐ Преднагрев пробы

Линия

Выбор модификаторов для отделения матрицы и предварительная термообработка должны быть настроены для каждой линии.

Матричные модификаторы

Для анализа элементной линии можно указать до 5 различных модификаторов. Они активируются щелчком по соответствующему полю модификатора. Во избежание ошибок переноса включение компонентов анализа в список по умолчанию осуществляется в следующем порядке:

- Бланк (в случае разбавления)
- Модификатор 1
- Другие модификаторы (если назначены)
- Раствор проб

Ввод в графитовую трубку осуществляется в обратной последовательности, т.е. проба будет вводиться первой. Со всеми остальными компонентами остатки пробы вымываются из дозирующей трубки и вводятся в графитовую трубку. При необходимости можно изменить стандартный порядок ввода пробы и модификаторов.

Введите следующие параметры модификаторов:

Опция	Описание
Контрольное поле/ флажок	Активация модификатора для анализа
Назв.	Поле списка содержит обозначения наиболее распространенных модификаторов. Выбрать обозначение из этого списка или ввести его непосредственно в поле ввода.
Объем	Выпускаемый объем (от 1 до 50 мкл)
Поз.	Позиция модификатора на автосамплере
после Проба	Соответствующий модификатор будет забран автосамплером после пробы, т.е. введен в графитовую трубку перед пробой.
Обраб.	Термическая подготовка модификатора

Обогащение

При обогащении программа печи будет повторяться до указанного шага (столбец E/P). При этом в каждом случае объем пробы, указанный в таблице проб, вводится и предварительно обрабатывается, затем трубка охлаждается до комнатной температуры и вводится следующий объем пробы. Таким образом, в печь можно загрузить больший объем пробы. Объем модификаторов вводится только один раз.

Можно указать следующие режимы обогащения:

Опция	Описание
выкл.	Обогащение не выполняется.
постоянно (только пробы)	Обогащение каждой пробы (исключая специальные пробы, такие как стандарты и т.д.)
постоянно (включ.калибр.)	Обогащение каждой пробы, включая стандарты, пробы КК и добавочные стандарты
если конц. слиш-ком низкая	Обогащение производится только для тех проб, концентрация которых меньше минимального значения количественного определения.
Циклы	Число циклов обогащения (от 2 до 100) Примечание: Так как все примеси в трубке также обогащаются вместе с измеряемым элементом, количество шагов по обогащению для действительных проб должно оставаться в допустимых пределах.

Термическая подготовка

При термической подготовке аналитического раствора и/или модификаторов эта опция будет выполнена до заявленного шага программы печи. В конце этого шага остальные компоненты будут введены в предварительно прогретую трубку.

Опция	Описание
Терм. постоянно	Выполняется термическая подготовка модификаторов или пробы. В области Модификатор для модификаторов, подлежащих обработке, необходимо установить флажок в поле Обраб.. Примечание: температура термической подготовки модификатора может превышать температуру пиролиза пробы.
Преднагрев пробы	Подготовка аналитического раствора, после чего добавление модификаторов и других компонентов.
Задержка нагрева	Время ожидания между добавлением компонента, подлежащего термической обработке, и следующим компонентом



ПРИМЕЧАНИЕ

После термической подготовки с температурой выше 300 °C охладите трубку!

Если температура термической подготовки превышает 300 °C, перед добавлением остальных компонентов графитовую трубку необходимо дополнительно охладить до температуры ниже 300 °C. При пипетировании в горячую трубку (при температуре выше 300°C) разрушается наконечник трубки! При более высоких температурах сообщение об ошибке не выводится!

Анализ твердых проб с использованием автосамплера для твердых проб SSA 600

При анализе твердых проб возможно добавление только матричных модификаторов. Если активирован один из модификаторов, можно задать его имя и объем (см. выше).

При использовании SSA 600 без функции жидкого дозирования модификаторы следует ввести в пробу вручную. Добавление происходит непосредственно перед помещением платформы в печь или на последнем этапе полной подготовки пробы с использованием SSA 600.

При использовании SSA 600 с функцией жидкого дозирования пипетирование модификатора или жидких проб осуществляется автоматически.

При термической подготовке для анализа твердых проб платформа предварительно обрабатывается с использованием модификатора (например, палладия). Программа печи отработывается до шага **Е/Р**. Затем выполняется определение веса платформы с покрытием и дозирование пробы. Затем программа печи продолжается с шага **Е/Р**.

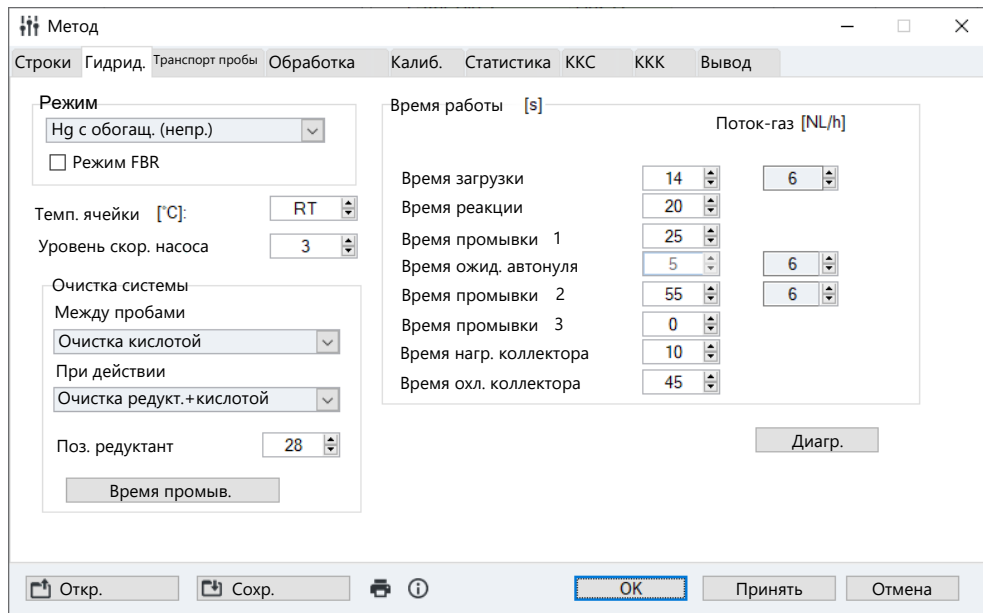
3.2.4 Окно Метод / Гидрид.

В окне **Метод / Гидрид** задаются параметры следующих гидридных систем:

- HS60A/ HS60
- HS55A/HS55
- HS 60 modular
- HS 55 modular

Подключенная гидридная система распознается во время инициализации прибора. Параметры гидридного инжектора HS50 задаются в окне **Метод / Транспорт пробы**. Команды для дополнительной промывки или загрузки системы гидридов задаются в окне **Гидрид. система**.

Чтобы открыть окно **Метод / Гидрид**, щелкните по значку .



Режим

В зависимости от оснащения гидридной системы пользователь может выбрать различные режимы работы.

Опция	Описание
Гидрид. (непр.)	HS 60 A / HS 60 / HS 60 modular Реакция происходит в реакторе в непрерывном режиме. Ввод проб производится автосамплером или вручную.
Гидрид. (порц.)	HS 55 A / HS 55 / HS 55 modular

Опция	Описание
	Проба пипетируется в реакционный стакан (макс. 30 мл), который герметично закрепляется на головке загрузочного модуля. С помощью первого канала компонентного насоса редуцирующий агент подается в реакционный стакан. Быстрая и достаточно энергичная реакция высвобождает газообразные гидриды металлов или атомарную ртуть в виде пара.
Режим FBR	Только анализ ртути в непрерывном режиме Быстрый возврат к базовой линии, FBR После того, как достигнут максимум абсорбции, поток аргона свободно промывает ячейку в течение времени промывки 2, для того чтобы быстро вернуть сигнал к уровню базовой линии.

Температура ячейки / Скорость насоса

Опция	Описание
Темп. ячейки	Только гидридная техника Для гидридообразующих элементов As, Se, Sn, Sb, Te и Bi можно выбрать температуру ячейки в диапазоне от 600 °C до 1000 °C. Для ртути можно использовать RT (комнатная температура < 60 °C) или 150 °C. Нагрев кюветы до выбранной температуры происходит при запуске последовательности анализа или может быть запущен в окне Гидрид. система .
Уровень скор. насоса	Для транспортировки пробы и компонентов доступны четыре уровня скорости (1 - 4) (в непрерывном режиме). В непрерывном режиме используемый объем пробы определяется на основе выбранной скорости работы насоса и времени реакции.

Промывка системы

Для непрерывного режима

Промывку системы можно выбрать опционально после каждого измерения пробы и/или как отдельное действие.

Опция	Описание
Между пробами	Промывка системы после каждого измерения пробы выкл. Промывка системы не выполняется. Очистка кислотой Система промывается после каждого измерения пробы разбавленной кислотой. Продолжительность промывки определяется в поле Время промывки кислот.. По истечении половины времени промывки путь пробы переключается к реактору. Очистка редукт.+кислотой Этот вид промывки рекомендуется при сильном загрязнении системы (пробы с высоким содержанием элемента). Сначала выполняется промывка редуцирующим агентом в течение времени, указанном в параметре Время пром. редуктантом , затем следует время ожидания (Время всасывания), чтобы редуцирующий агент мог подействовать на отложения на стенках. После этого система промывается разбавленной кислотой (Время промывки кислот..).
При действии	Промывку системы как действие можно запрограммировать в последовательности – специальная функция. Этот дополнительный этап промывки можно выполнить после проб с высоким содержа-

Опция	Описание
	нием элементов. Для операции в последовательности доступны опции Очистка кислотой и Очистка редукт.+кислотой (см. выше).
Поз. редуктант	Позиция редуцирующего агента в лотке для проб.
Время промывки	Открывает окно для ввода времени трех видов промывки: Время промывки кислот. , Время пром. редуктантом , Время всасывания . Выставляйте время в соответствии с параметрами промывки.

Время работы

Время работы настраивается в зависимости от выбранного режима работы. Все значения времени задаются в секундах.

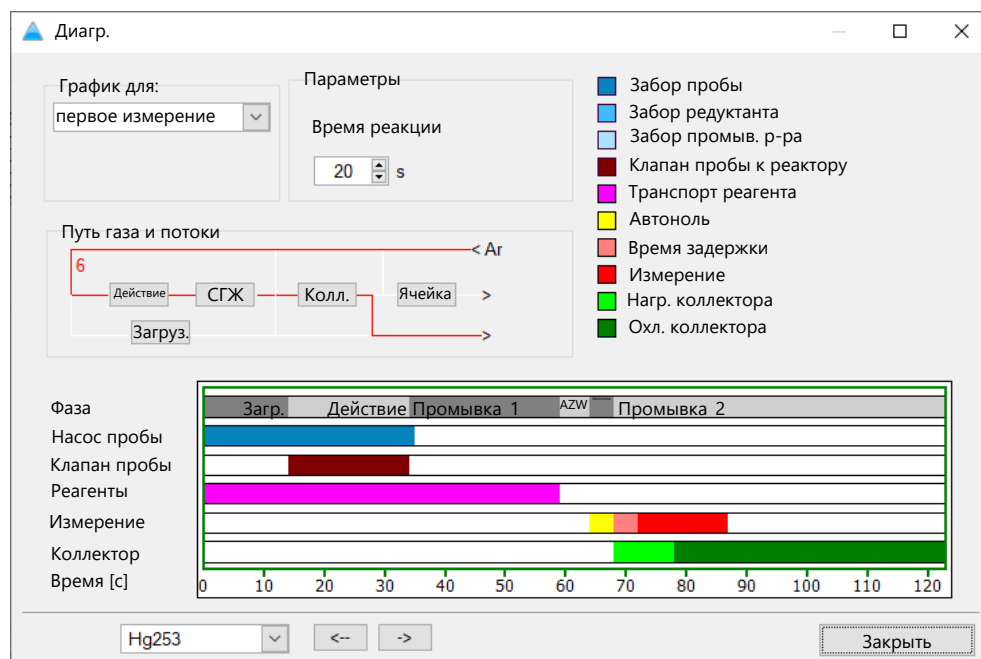
Опция	Описание
Время загрузки	Время, в течение которого насос для проб заполняет трубку с пробой до двухклапанного узла. Это время требуется только для первого измерения новой пробы.
Время ожид. авто-нуля	Время непосредственно перед корректировкой базовой линии (AZ = автозачистка)
Время предпро-мыв.	Время промывки стакана аргоном перед реакцией (для гидридо-образующих элементов) Время предварительной промывки используется для вытеснения воздуха, чтобы предотвратить оксигидрогенную реакцию во время последующей реакции.
Время реакции	Время, в течение которого насос для проб подает пробу в реактор. Это время – решающий параметр для подачи требуемого объема пробы и чувствительности измерения.
Время насоса	Время, в течение которого редуцирующий агент подается насосом в стакан для протекания реакции.
Время промывки 1 ... 3	Время, в течение которого реакторный газ транспортируется потоком аргона. Пути транспортировки различаются в зависимости от фазы процесса и режима работы и могут быть представлены в графическом виде.
Время нагр. коллектора	Время, в течение которого происходит нагрев золотого коллектора для высвобождения обогащенной ртути.
Время охл. коллектора	Время, в течение которого происходит охлаждение золотого коллектора для его подготовки к следующему обогащению.
Поток-газ	Значение, с которым поток аргона поступает в соответствующие фазы. Поток аргона действителен до тех пор, пока не будет введено новое значение. Газовый поток можно регулировать произвольное количество раз для разных режимов работы. Газовые пути для отдельных фаз последовательности анализа можно посмотреть в графическом отображении последовательности анализа в гидридной системе. На выбор есть 3 вида газового потока – от 5 до 15 л/ч.

Параметры порционного (реакторного) режима

Опция	Описание
Объем пробы	Объем находящейся в стакане пробы
Циклы обогащения	Для порционного (реакторного) режима с обогащением ртути на коллекторе Число стаканов, содержимое которых будет подвергнуто обогащению

Графическое представление газовых потоков и процесса анализа в гидридной системе и системе HydrEA

Щелчок по **Диагр.** открывает графическое представление газовых путей для отдельных фаз процесса анализа. В данном окне графически отображается запрограммированный процесс анализа.



Отдельные фазы процесса анализа отображаются цветом на графике процесса. При щелчке по определенной цветной области фазы появляются соответствующие параметры в области **Параметры** и заданный газовый поток в области **Путь газа и потоки**. Процесс определяется выбранным режимом работы.

Опция	Описание
График для:	Если предусмотрена статистика проб (окно Метод / Статистика), можно отобразить различные процессы для первого, следующего и последнего измерения.
Путь газа и потоки	Эта диаграмма потоков показывает пути газа в гидридной системе. Модули Действие (реактор), СГЖ (сепаратор газ-жидкость), Колл. (золотой коллектор), Загруз. (загрузочный модуль) и Ячейка (кювета) Печь представлены со своими соединительными трубками (для аргона и реакторного газа). На графике процесса нажмите на ту фазу, газовый поток которой нужно отобразить. Газовый путь отмечен красным цветом, а поток аргона отображается цифровым образом в л/ч.
Параметры	Отображение и изменение времени работы, времени измерения и, при необходимости, соответствующих газовых потоков выбранной фазы Нажмите кнопкой мыши на соответствующую фазу. Название и числовое значение времени действия или измерения / газового потока отображаются на дисплее и могут быть изменены. График процесса корректируется в соответствии с измененными параметрами.
Линия	Выбранная аналитическая линия

См. также

▢ Параметры измерений и действий в последовательности [► 71]

3.2.5 Окно метод / Транспорт пробы – спецификация подачи пробы

Вид в окне **метод / Транспорт пробы** отличается в зависимости от применяемой техники атомизации.

3.2.5.1 Параметры метода для автосамплера для пламенной атомизации и гидридной техники

Для пламенной атомизации доступны следующие автосамплеры:

- AS 52s / AS 51s
- AS-FD / AS-F

В окне **метод / Транспорт пробы** можно задать следующие параметры:

- Использование автосамплера
- Режим промывки и контроль очистки
- Автоматическое разбавление во время анализа
- Использование инжекционного переключателя SFS 6 или гидридного инжектора HS 50

Откройте окно **метод / Транспорт пробы**, щелкнув по значку .

Использование аксессуаров

Опция	Описание
Автосамплер	Использование подключенного и инициализированного автосамплера. Если эта функция отключена, подача пробы выполняется в ручном режиме без автосамплера.
Инж. перекл. SFS	Инжекционный модуль SFS 6 можно использовать в сочетании с автосамплером или в ручном режиме. SFS 6 обеспечивает воспроизводимые условия в пламени. Он постоянно всасывает промывочный или буферный раствор и за счет этого поддерживает постоянную температуру горелки. Обеспечиваются, по сравнению с буферным раствором, воспроизводимые измерения малых объемов проб. Следующие параметры активны, если в окне Метод / Строки в качестве оценки сигнала выбраны параметры Площадь или Высота .

Опция	Описание
	Время инъекции Время, в течение которого клапан SFS 6 открывает путь подачи пробы к распылителю с последующей транспортировкой аэрозоля к горелке. Это время зависит от максимальной предполагаемой концентрации. Типичные значения: 0,5 ... 2,0 с. Время загрузки Время, необходимое для заполнения пути забора пробы между пробой и инъекционным модулем новой пробой. Модуль SFS 6 также можно использовать для обработки постоянных во времени сигналов (усредненное интегрирование).
Гидридн. инжектор HS50	Гидридный инжектор HS 50 является чисто пневматической системой для порционного ручного режима работы. Он состоит из модуля загрузки и держателя кюветы с кварцевой кюветой. Раствор редуцирующего агента пневматически транспортируется из бутылки в реакционную емкость. Кварцевая кювета нагревается пламенем. HS 50 работает с анализами сигнала Площадь или Высота. Процедура измерения состоит из следующих этапов: Предварительная промывка – Автозачистка – Реакция/Интегрирование. Время реакции Во время фазы реакции реакционный агент подается в реакционный стакан. При запуске времени реакции одновременно начинается запись измеренных значений. Время интегрирования должно быть выбрано таким образом, чтобы обеспечить получение всего сигнала в течение этого периода. Время предпромыв. Во время предварительной промывки из реакционного стакана вытесняется воздух. Фаза предварительной промывки не требуется для определения ртути, т.к. поток аргона уже вытесняет ртуть из пробы. Объем пробы: Используемый объем пробы

Разбавление при превышении концентрации

Автосамплеры AS-FD и AS 52s позволяют автоматически разбавлять пробы. Здесь в методе можно задать уровень заполнения в смесительном сосуде и активировать автоматическое разбавление при превышениях концентрации.

При разбавлении при превышении концентрации проверяется измеренная концентрация проб. Если концентрация превышает диапазон измерения калибровочной кривой более чем на 10 %, проба в смесительном сосуде разбавляется. Объемы рассчитываются в программе в зависимости от оптической плотности неразбавленного раствора. Рассчитанный объем аналита вводится в смесительный сосуд, который затем заполняется до указанного уровня раствором разбавителя из бутылки для хранения.

Опция	Описание
Разб. при превыш. конц.	нет Автоматическое разбавление отключено. в смесит. сосуде Разбавление выполняется описанным выше способом.
Уровень смесит. сосуда	Уровень, до которого смесительный сосуд заполняется раствором для разбавления. Введенное здесь значение также применяется для индивидуального разбавления проб.

Примечание: параметры индивидуального разбавления проб задаются в окне **Имя пробы**.

Промывка и контроль очистки

Во время выполнения последовательности измерений можно согласовать этапы промывки для очистки путей проб в приборе и аксессуарах.

Если концентрация пробы превышает диапазон измерения калибровочной кривой более чем на 10 %, можно промыть систему горелка-распылитель (пламенная атомизация) или гидридную систему (гидридная техника), чтобы удалить загрязнения после предыдущего измерения. Во время промывки измеряется оптическая плотность/эмиссия для проверки результатов очистки. Автоматическое управление очисткой рекомендуется после измерения высококонцентрированных проб, в частности, если активен режим **Разб. при превыш. конц.**

Опция	Описание
Режим промывки	выкл. Автоматическая промывка отключена. Между пробами Промывка проводится после каждой пробы, но не в пределах статистической серии.
Время промывки	Время, в течение которого жидкость для промывки закачивается из промывочной емкости. При этом промывается система трубок и система горелка-распылитель.
Циклы смесит. сосуда	Число циклов промывки смесительного сосуда Во время цикла промывки смесительный сосуд заполняется промывочной жидкостью/ разбавителем и снова опорожняется.
Управляемая чистка	При превышениях концентрации автоматически производится контролируемая очистка.
Контр.предел (Абс)	Значение, к которому сигнал должен вернуться во время промывки перед измерением разбавленной пробы или пробы с более низкой концентрацией.

Примечание: управление очисткой можно также установить в последовательности.

Процедура промывки автосамплера

Для промывки пути всасывания пробы и системы горелка-распылитель рычаг автосамплера погружает иглу в промывочную емкость автосамплера. Промывочный насос доставляет промывочную жидкость из сосуда для ее хранения на время погружения. Скорость насоса выше, чем скорость всасывания распылителя или скорость насоса гидридной системы. Промывается весь путь пробы (канюля, трубка с пробой, инжекционный модуль SFS6 и система горелка-распылитель). Лишняя промывочная жидкость стекает в бутылку для отходов.

При промывке смесительного сосуда AS 52s и AS-FD он за один цикл промывки заполняется промывочной жидкостью/разбавителем и снова опорожняется.

Время задержки

Время задержки, необходимое для транспортировки пробы к атомизатору (например, к пламени или реакционной камере гидридной системы). Время задержки измерения адаптируется с учетом длины участка всасывания между пробой и распылителем.

- Выставьте время в поле **Время задержки**. Если в окне **метод/ Статистика** Вы задаете пустое измерение, используйте следующее время. Если пустое измерение не активируется, увеличьте заданное время на 3 с.

Комплектующие / с активированным пустым измерением	Время
Короткие всасывающие капилляры для работы вручную	8 с
Стандартные всасывающие капилляры для работы вручную	12 с
Инжекционный модуль SFS для работы вручную	18 с
Автосамплер без инжекционного модуля	18 с
Автосамплер с инжекционным модулем	20 с

Следующие экранные кнопки / опции

Опция / Кнопка	Описание
Position reference solution	Позиция эталонного раствора на лотке для проб Примечание: все другие позиции проб задаются в последовательности или в идентификаторе пробы.
Техн. параметры	Открыть окно Автосамплер / Техн. параметры Здесь можно задать другие параметры автосамплера, такие как глубина погружения в сосуды для проб и скорость дозирования.

См. также

- 📄 Технические параметры автосамплера для пламенной атомизации [► 140]
- 📄 Определение информации о пробах и проб КК [► 78]
- 📄 Параметры измерений и действий в последовательности [► 71]

3.2.5.2 Параметры метода для автосамплеров для техники графитовой печи (анализ растворов)

Для подачи проб в графитовой печи следует использовать один из следующих автосамплеров:

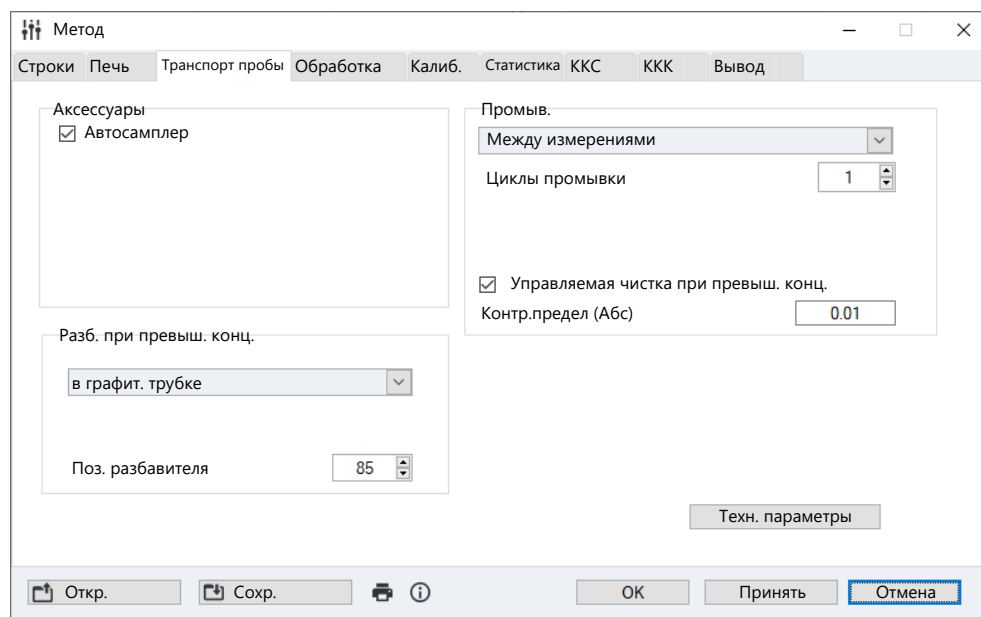
- MPE 60 или MPE 60/2
- AS-GF

В окне **метод / Транспорт пробы** можно задать следующие параметры для этих автосамплеров:

- Использование автосамплера
- Режим промывки
- Автоматическое разбавление во время анализа

Опция **Автосамплер** всегда должна быть активирована при использовании техники графитовой печи для анализа растворов.

Чтобы открыть окно **метод / Транспорт пробы**, щелкните по значку .



Автоматическое разбавление
с помощью автосамплера

В сочетании с MPE 60 можно выполнить функцию автоматического разбавления пробы. Отдельные факторы разбавления для каждой пробы задаются в окне ID пробы. В методе можно задать общие параметры (режим и позиция разбавителя) для выполнения разбавления.

Также можно указать параметры автоматического разбавления при превышении концентрации. Если концентрация пробы превышает диапазон измерения калибровочной кривой более чем на 10 %, проба в смесительном сосуде разбавляется. Максимально возможный фактор разбавления ограничен минимальным вводимым объемом в 2 мкл, который должен быть точно дозирован.

Разбавление в смесительном сосуде возможно только для MPE 60. Для автосамплеров MPE 60/2 и AS-GF понижение концентрации аналита производится непосредственно в графитовой трубке. Дополнительно для разбавления при превышении концентрации можно использовать неиспользованные сосуды для проб.

Опция	Описание
нет	Проба не разбавляется.
в графит. трубке	Объем пробы уменьшается в соответствии с фактором разбавления и помещается в графитовую трубку. Недостающий объем исходного объема пробы будет замещен разбавителем.
уменьшенный объем	Объем пробы уменьшается в соответствии с фактором разбавления и помещается в графитовую трубку. Недостающий объем исходной пробы не будет замещен разбавителем.
в смесит. сосуде	Только MPE 60 Разбавление выполняется в смесительном сосуде. Объем всегда доводится до 500 мкл.
в виалах для проб	Разбавление производится в неиспользованных сосудах для проб, количество которых и их исходное положение на лотке выбирается в пункте Кол-во смес. сосудов . Объем заполнения задается в пункте Уровень в смесит. сосуде . После замены сосудов для проб следует выполнить сброс использованных позиций для дальнейшего использования в окне Автосамплер / Техн. параметры с помощью опции Опорожн. смес. сосуд .
Поз. разбавителя	Выбор позиции разбавителя на лотке для проб.

Установка шагов промывки

Во время отработки последовательности измерений можно задать этапы промывки для очистки путей проб в аксессуарах.

Опция	Описание
Режим промывки	выкл. Режим промывки отключен. Промывка не проводится автоматически. Между измерениями Промывка после каждого цикла статистического измерения Между компонентами Промывка после переноса каждого компонента (модификатор, стандарт, проба и т.д.) в графитовую трубку.
Циклы промывки	Число циклов промывки на одну промывку, от 1 до 5
Циклы смесит. сосуда	Только MPE 60 Число циклов промывки смесительного сосуда Во время цикла промывки смесительный сосуд заполняется промывочной жидкостью/ разбавителем и снова опорожняется.

Контролируемая очистка

Если при анализе проб происходит превышение рабочего диапазона калибровочной кривой более чем на 10 %, графитовую трубку можно очистить путем отжига для удаления загрязнений после предыдущего измерения. Во время очистки измеряется оптическая плотность для проверки результата очистки. Автоматическое управление очисткой рекомендуется после измерения высококонцентрированных проб, в частности, если активен параметр **Разб. при превыш. конц.**.

Опция	Описание
Управляемая очистка при превыш. конц.	При превышениях концентрации автоматически производится контролируемая очистка.
Контр.предел (Абс)	Значение, к которому сигнал должен вернуться во время очистки перед измерением разбавленной пробы или пробы с более низкой концентрацией

Примечание

Управление очисткой также можно задать в последовательности, вне зависимости от текущего превышения концентрации.

Промывка автосамплера

После отбора проб или других жидкостей дозирующая трубка автоматически очищается промывочной жидкостью, которая находится в бутылки для хранения, (деионизированная вода, с добавлением небольшого количества 0,1 N HNO₃). Промывочная жидкость подается из бутылки для хранения через дозирующий шланг в промывочную емкость автосамплера.

Параметры глубины погружения и скорости дозирования

Параметры автосамплера относительно глубины погружения в различные емкости, а также скоростей дозирования задаются в окне **Автосамплер / Техн. параметры**. Открыть окно можно, выбрав **Техн. параметры**.

См. также

- 📖 Технические параметры автосамплеров для техники графитовой печи [► 148]
- 📖 Определение информации о пробах и проб КК [► 78]
- 📖 Параметры измерений и действий в последовательности [► 71]

3.2.5.3 Параметры метода для автосамплеров для анализа твердых проб

В окне **метод / Транспорт пробы** задаются следующие параметры:

- Использование автосамплера для твердых проб SSA 600 или SSA 6 (z)
- Режим работы – процесс анализа
- Модификации автосамплера

Чтобы открыть окно **метод / Транспорт пробы**, щелкните по значку .

Метод

Строки

Печь

Транспорт пробы

Обработка

Калиб.

Статистика

ККС

ККС

Вывод

Автосамплер

☐ SSA6/SSA6Z ручн. режим

☒ SSA600 автоматич. режим

☐ SSA600 с автоматич. пипетир. жидк.

Режим

☐ Режим одной платформы

☒ Загруз. (полн. табл.)

☐ Загруз. (спец. поз. 42)

Номер платформы

2

☐ Последовательность выполнения для проб, чувствительных ко времени

Скорость

Уровень скор-ти

2

Лоток сAMPLера

☒ Один лоток (42 поз.)

☐ Двойной лоток (84 поз.)

Получить вес пробы

☐ Вес

☒ Вес с подтверждением

☐ Без взвешив.

Инсталляц. сторона

очень дрожит

Управляемая чистка

☐ Управляемая чистка

Контр.предел (Абс)

Откр.

Сохр.

OK

Принять

Отмена

Автосамплер

Опция	Описание
SSA6/SSA6Z ручн. режим	Ручной автосамплер SSA 6 (z) При использовании ручного автосамплера SSA 6 указывать дополнительные опции для подачи пробы не требуется. Все пробы необходимо взвесить отдельно и ввести значения массы проб в главное во вкладке Тверд..
SSA600 автоматич. режим	Автоматический автосамплер для твердых проб SSA 600
SSA600 с автоматич. пипетир. жидк.	Использование автоматического автосамплера для твердых проб SSA 600 со встроенной системой автоматического дозирования жидких компонентов (стандартов и/или модификаторов)

Для автосамплера SSA 600 в этом окне можно более подробно указать последовательность подачи пробы.

Опция	Описание
Режим	Режим одной платформы Анализ выполняется с одной единственной платформой, которая постоянно загружается новыми пробами. Эта платформа располагается в первой позиции лотка 1. Все необходимые действия (тарирование, дозирование, взвешивание, дозирование жидкостей) производятся с этой платформой. Загруз. (полн. табл.) Анализ выполняется с использованием нескольких платформ. Анализы могут выполняться автоматически в зависимости от настроек. Загруз. (спец. поз. 42) Анализ выполняется с использованием нескольких платформ. Анализы могут выполняться автоматически в зависимости от настроек. Для проб, которые не требуют взвешивания, например, Кал-ноль или стандарты жидкости, используется позиция 42 на лотке для проб. Для этого там следует установить пустую платформу, на которую при необходимости можно пипетировать пробы. Номер платформы Для Загруз. (полн. табл.) и Загруз. (спец. поз. 42) Количество используемых платформ и, тем самым, доступного количества позиций проб.

Опция	Описание
Последовательность выполнения для проб, чувствительных ко времени	Поведение автосамплера во время подготовки проб и дозирования При активации платформы загружаются пробами только непосредственно перед измерением. Это предотвращает испарение проб на лотке для проб во время длительных простоев или "рас-текания" по платформе из-за высокой адгезии, как, например, при использовании масел. Этот режим требует постоянного присутствия оператора. Если деактивировано, все доступные платформы подготавливаются к началу измерения. Все действия, требующие присутствия пользователя (ввод пробы или ручное дозирование модификаторов), выполняются комплексно. В этом режиме прибор AAS может проводить измерения без постоянного присутствия пользователя.
Скорость	Для скорости движения SSA600 в распоряжении есть 3 ступени. Рекомендуемая ступень: 2
Лоток смплера	Количество лотков, расположенных один над другим
Получить вес пробы	Вес После взвешивания дозируемой твердой пробы ее масса принимается без уточнения приемлемости. Вес с подтверждением Результат взвешивания отображается после каждого взвешивания твердых проб. Нажав зеленую клавишу (кнопка на автосамплере или кнопка ОК в окне взвешивания на экране монитора), пользователь может дать сигнал о своем подтверждении результата взвешивания. При нажатии оранжевой клавиши (кнопка на автосамплере или кнопка Повтор в окне взвешивания) платформа возвращается в позицию дозировки, дозировка меняется, и снова производится взвешивание. Без взвешив. В этом режиме взвешивания измерение концентрации невозможно. Он используется только для качественного анализа твердых проб.
Инсталляц. сторо-на	Настройка точности встроенных микровесов в зависимости влияния мешающих факторов (особенно вибрации) Если время взвешивания является слишком долгим, его можно сократить в ущерб точности, изменив настройку на месте установки.
Управляемая чистка	При превышениях концентрации автоматически производится контролируемая очистка. Если при анализе проб происходит превышение рабочего диапазона калибровочной кривой более чем на 10 %, выполняется очистка графитовой трубки и платформы посредством отжига, чтобы удалить загрязнения после предыдущего измерения. Во время очистки измеряется оптическая плотность для проверки результата очистки. Примечание: задать параметры управления очисткой также можно в последовательности, вне зависимости от текущего превышения концентрации.
Контр.предел (Абс)	Значение, к которому сигнал должен вернуться во время очистки перед измерением пробы с более низкой концентрацией.

3.2.6 Окно метод / Обработка – спецификация спектральной области и коррекций фона

В окне **метод / Обработка** задаются специфические для линии параметры анализа для определения результатов измерений из спектра.

Откройте окно **метод / Обработка**, щелкнув по значку .

Зависимые от линии параметры анализа сигнала

Опция	Описание
Линия	Имя линии элемента
Сигнал / Сглаж.	Не для пламенной атомизации выкл.: сигналы не сглаживаются. слаб.: сигналы слегка сглаживаются, напр., для подавления шума. сильн. : сигналы сильно сглаживаются.
Спектр.диап.	Число пикселей для записи спектра (макс. 200) Считывается и сохраняется только заданное число пикселей CCD-строки, что позволяет оптимизировать время вычисления в анализе и сохраненный объем данных
Обраб.пикселей	1 ... 19 пикселей Число пикселей, которые берутся для оценки сигнала абсорбции и из которых в конечном счете формируются результаты измерений. Значения оптической плотности обрабатываемых пикселей суммируются. Таким образом можно минимизировать неточности анализа, возникающие в результате позиции пика между двумя пикселями. Поэтому в результате измерения теоретически может возникнуть оптическая плотность до 9. Рекомендуемое число выбираемых пикселей: 3 Высота Интерполяция максимального пика 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.
Режим КФ	IBC Итерационная коррекция фона. Эта коррекция фона предполагает наличие в последовательности эталонного спектра. IBC-m Итерационная коррекция фона для широкополосных структур (молекулярные абсорбции). Эта коррекция фона предполагает наличие в последовательности эталонного спектра. без опорн. Эта коррекция фона не предполагает наличие в последовательности эталонного спектра. с опорн. Коррекция фона предполагает наличие в последовательности эталонного спектра.
Пост.структ.	Минимизация перманентных структур Технология предполагает наличие эталонного спектра. Перманентные структуры – это спектральные полосы, которые могут быть в эталонном спектре и спектре пробы в разной интенсивности, но их не вызывает анализируемый элемент. По большей части причиной этих структур являются молекулярные колебания, например, из пламени закиси азота. выкл.: не выполнять коррекцию перманентных структур.

Опция	Описание
	вкл.: выполнять коррекцию перманентных структур.
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 при статической настройке коррекции фона Введите номера пикселей для коррекции фона. В строке состояния имеется пример ввода.

Экранные кнопки

Экранная кнопка	Описание
Спектр. коррекции	Откроется окно Спектр. коррекции . Можно выбирать существующие модели коррекции или создавать новые модели. Примечание: в окне просмотра линейных спектров можно выбрать пиксели для коррекции фона по графическому представлению и перенести их в метод.
Ослабление	Откроется окно Ослабление . При ослаблении сигнала для формирования сигнала учитываются только пиксели слева и справа от максимального пикового значения. Сигнал пикового пикселя и, в зависимости от степени ослабления, его смежного пикселя "вырезается". Чем выше выбранная степень ослабления сигнала, тем дальше отдалены от пикового пикселя обработанные площади сигнала. Ослабление сигнала позволяет расширить рабочий диапазон калибровки. Краевые пиксели, используемые для анализа, отображаются в столбце Пиксели обработки . Пример: при выборе среднего уровня для формирования результата измерения учитываются два пикселя на расстоянии 3 пикселей от пикового.
Интегрир. сигнала	Не для пламенной атомизации Откроется окно Интегрир. сигнала . Для анализа площади транзитных сигналов диапазон интегрирования можно ограничить областью от и до. Прежде всего это имеет смысл для синхронного анализа нескольких линий, в других случаях диапазон следует ограничить уже при измерении, например, установив подходящее время измерения. Задать предельный диапазон интегрирования сигналов можно также в окне Единицн. Значения на графике спектра. Щелчок по кнопке Переустан. устанавливает диапазон выделенной строки таблицы на все время измерения. Если строка не выделена, предельные значения интегрирования всех линий сбрасываются.

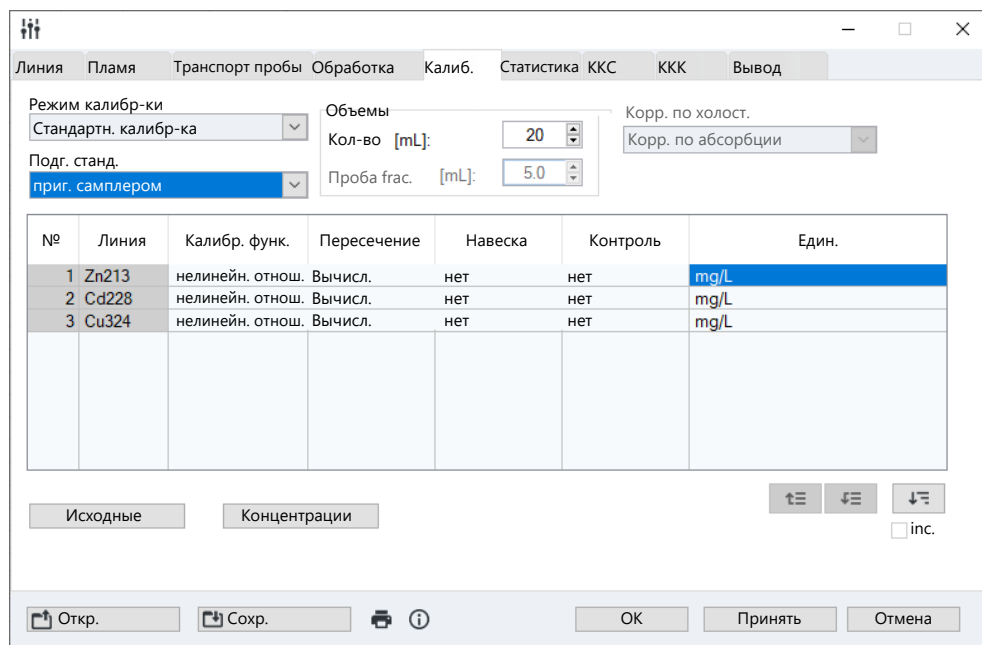
См. также

- 📖 Создание модели для спектральных коррекций [► 98]
- 📖 Описание используемых алгоритмов спектральной коррекции фона [► 189]
- 📖 Отображение отдельных значений проб [► 92]

3.2.7 ОкноМетод / Калибровка - установка параметров калибровки

В окне **Метод / Калибровка** задайте вид калибровки и укажите таблицу концентраций стандартов. Для калибровки можно использовать многоэлементные стандартные растворы, которые можно ввести как маточные стандартные растворы.

Чтобы открыть окно **Метод / Калибровка**, щелкните по значку .



Режим калибр-ки
Стандартн. калибр-ка

Подг. станд.
приг. сэмплером

Объемы
Кол-во [mL]: 20
Проба frac. [mL]: 5.0

Корр. по холост.
Корр. по абсорбции

№	Линия	Калибр. функ.	Пересечение	Навеска	Контроль	Един.
1	Zn213	нелинейн. отнош. Вычисл.	нет	нет	нет	mg/L
2	Cd228	нелинейн. отнош. Вычисл.	нет	нет	нет	mg/L
3	Cu324	нелинейн. отнош. Вычисл.	нет	нет	нет	mg/L

Исходные Концентрации

Откр. Сохр. ОК Принять Отмена

Выбор метода калибровки

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

Метод градуировки	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 абсорбции	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

Технология	Описание
вручную	Эталонные растворы изготавливает пользователь.
приг. самплером	Только при использовании автосамплера AS-FD или AS 52s Приготовление эталонных растворов выполняется в смесительном сосуде автосамплера путем смешивания различных порций маточных стандартных растворов и разбавителя. В этом случае в области Объемы задаются следующие параметры изготовления эталонных растворов: Кол-во: общий объем заполнения в смесительном сосуде (диапазон значений: 1... 20 мл) Проба frac.: только с методом добавок Пропорциональный объем пробы (шаг 0,5 мл) При методе добавок фракция пробы в серии измерений всегда одинаковая. Доля раствора пробы должна быть меньше, чем общий объем заполнения. Разница в объеме дополняется маточным раствором и разбавителем. Соотношение объема пробы/общего объема представляет собой коэффициент коррекции для вычисляемой концентрации.
через измен. объема	Только техника графитовой трубки С целью получения градации концентрации (в зависимости от объема/веса пробы) выполняется атомизация различных объемов базового раствора или количества эталонной пробы.
через разбавление	Только техника графитовой трубки Определенные объемы базового раствора и объем раствора для разбавления, отсутствующего в объеме пробы, переносятся в графитовую трубку за один подход, тем самым достигается градация концентрации (по отношению к объему пробы).

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 $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$

Столбец таблицы	Описание
	нелинейн. квадрат. 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 / Пос-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.
Навеска	нет Все калибровочные точки учитываются одинаково. 1/конец Калибровочные точки, имеющие более низкие концентрации, учитываются в большей степени. 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). 1/(CO*конец) Сочетание методов расчета 1/конец и 1/CO
Контроль	Программное обеспечение позволяет проводить автоматическую проверку полученных калибровочных кривых посредством прогнозируемого диапазона, который вычисляется на основе выбранной вручную статистической достоверности. нет Для расчета кривой используются все измеренные и не удаленные калибровочные точки. Калибровочные точки никак не отмечаются и не удаляются. 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): ■ 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.

Столбец таблицы	Описание
	■ 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.

3.2.7.1 Установка параметров маточных стандартных растворов

При автоматическом изготовлении стандартных концентраций при помощи авто-сэмплера необходимо задать параметры маточных стандартных растворов, из которых путем разбавления впоследствии будут изготовлены отдельные стандарты. Для этого нужно установить параметры маточных стандартных растворов до заполнения таблицы калибровки, при этом можно использовать несколько исходных растворов с различными элементами и концентрациями. При частом использовании маточных стандартных растворов управление ими возможно в базе данных в окне **Данные / Исходн. std./Пробы КК**.

- ▶ В окне **метод / Калиб.** выбрать **Исходные**.
Откроется список маточных стандартных растворов. Для анализа можно задать не более 20 стандартов.
- ▶ Выбрав **Добавить** или **Вставка**, добавить в список исходных растворов новую строку.
Откроется окно **Вставить исходн. стандарт** с двумя параметрами:
 - При использовании существующих исходных растворов из базы данных выбрать параметр **Из исходн. базы данн..** Выделите маточные стандартные растворы в списке.
 - Если маточные стандартные растворы нужно ввести вручную, выбрать параметр **вручную**.
- ▶ Для подтверждения выбора нажать кнопку **ОК**.
- ▶ В окне **Исходн. стандарт** в столбце **Поз.** ввести позицию исходного раствора на автосамплере и выбрать единицу измерения в столбце **Един..**
- ▶ Для ввода вручную в окне **Исходн. стандарт** выбрать **Концентрации** и в окне **Ввод концентраций** ввести концентрацию для каждого элемента.
- ▶ Для завершения щелкнуть по **Заккрыть**.

3.2.7.2 Ввод концентраций для стандартов, приготовленных вручную

В окне **Таблица калибр-ки** задайте параметры калибровочных стандартов с их концентрациями элементов.

Калибровочная таблица для стандартных методов со стандартами, приготовленными вручную

Таблица калибр-ки

Кал. нуля Кал. стандарты

	Тип	Поз.	РЕК	Zn mg/L	Cd mg/L	Cu mg/L
1	Kal.-Null1	10		0	0	0
	Kal.-Std.1	21	-		0.2	0.2
	Kal.-Std.2	22	-	0.5	0.5	0.5
	Kal.-Std.3	23		1	1	1
	Kal.-Std.4	24	-	2		2

inc. ☐

OK

Типы стандартов

Для различных стандартов калибровки необходимо задать параметры следующих типов стандартов:

Метод калибровки	Типы стандартов
Стандартн. калибр-ка	Кал-ноль: стандарты кал.-ноль без аналита Можно ввести несколько стандартов кал. нулей, например, если анализируемые элементы присутствуют в разных растворителях. В этом случае концентрация для соответствующих элементных линий устанавливается на «0», остальные столбцы остаются пустыми. Кал-Станд.: калибровочные стандарты
Метод добавок	Кал-Станд.: стандарт калибровки Проба+Доб.: добавочные стандарты
Метод доб. калибр-ки.	Проба+Доб.: добавочные стандарты

Таблица стандартов

Столбец	Описание
Тип	Тип стандарта Стандарты нумеруются по выбранному числу.
Поз.	При использовании автосамплера Ввести позицию стандарта на лотке для проб автосамплера
РЕК	Только при стандартной калибровке Определение стандарта в качестве стандарта для рекалибровки
Элементы	Концентрация отдельных элементов в стандарте

Заполнение калибровочной таблицы

- ▶ В окне **метод / Калиб.** выбрать **Концентрации**.
Откроется окно **Таблица калибр-ки**.
- ▶ Выбрать количество стандартов в полях над таблицей.
- ▶ Для каждого стандарта ввести концентрацию элемента в таблице.

- ▶ Опционально ввести позицию стандартов на автосамплере. Эта настройка будет сохранена как настройка по умолчанию в последовательности и там ее можно будет изменить.
- ▶ Для подтверждения настройки нажать кнопку **ОК**.

3.2.7.3 Ввод концентраций при автоматическом изготовлении стандартов

Автоматическое приготовление калибровочных стандартов производится при пламенной атомизации путем смешивания с помощью автосамплера. Для режима графитовой трубки калибровочная серия выполняется путем пошагового изменения объема или разбавления объема внутри графитовой трубки.

Для автоматического изготовления калибровочных стандартов требуются маточные стандартные растворы.

Калибровочная таблица для стандартного метода с автоматически изготовленными стандартами (пламенная атомизация)

Таблица калибр-ки

Кал. нуля Кал. стандарты

№	Тип	Поз.	Приготовление			Исходн.	Zn mg/L	Cd mg/L	Cu mg/L
			[%]	Объем					
1	Kal.-Null1	10	0	0			0	0	0
	Kal.-Std.1	3	2	200	1 -			0.2	0.2
	Kal.-Std.2	3	5	500	1 -		0.5	0.5	0.5
	Kal.-Std.3	3	10	1000	1 -		1	1	1
	Kal.-Std.4	3	20	2000	1 -		2		2

Деактивир. стандарты Ctrl + щелчок мыши или пробел

Типы стандартов

Для различных стандартов калибровки необходимо задать параметры следующих типов стандартов:

Метод калибровки	Типы стандартов
Стандартн. калибр-ка	Кал-ноль: стандарты кал.-ноль без аналита Можно ввести несколько стандартов кал. нулей, например, если анализируемые элементы присутствуют в разных растворителях. В этом случае концентрация для соответствующих элементных линий устанавливается на «0», остальные столбцы остаются пустыми. Кал-Станд.: калибровочные стандарты
Метод добавок	Кал-Станд.: стандарт калибровки Проба+Доб.: добавочные стандарты
Метод доб. калибр-ки.	Проба+Доб.: добавочные стандарты

Таблица стандартов

Столбец	Описание
Тип	Тип стандарта Стандарты нумеруются по выбранному числу.
Поз.	Позиция маточного стандартного раствора на лотке для проб

Столбец	Описание
Приготовление	%: Для пламенной атомизации Доля базового раствора в растворе Объем: Для пламенной атомизации Объем доли базового раствора в мкл. Значения рассчитываются из введенного значения % и определенного в окне метод / Калиб. общего объема в смесительном сосуде Кол-во. Объем: Для техникой графитовой печи Этот объем вводится в графитовую трубку. Исходн. Номер маточного стандартного раствора в базовой таблице
РЕК	Только при стандартной калибровке Определение стандарта в качестве стандарта для рекалибровки
Линии элементов	Расчетная концентрация отдельных элементов в стандарте

Заполнение калибровочной таблицы

- ▶ В окне **метод / Калиб.** выбрать **Концентрации**.
Откроется окно **Таблица калибр-ки**.
- ▶ Выбрать количество стандартов в полях над таблицей.
- ▶ Пламенная атомизация: для каждого стандарта ввести долю стандарта в таблице.
- ▶ Для техникой графитовой печи: для каждого стандарта ввести объем, вводимый в графитовую трубку.
- ▶ Для каждого стандарта ввести номер маточного стандартного раствора.
- ▶ Если линии не должны использоваться в стандарте для калибровки, отключить их:
Для этого щелкнуть по полю линий, после чего нажать клавишу пробела. Для активации повторить процедуру.
- ▶ Для подтверждения настройки нажать кнопку **ОК**.

3.2.8 Окно Метод / Статистика – спецификация статистических параметров

В окне **Метод / Статистика** выберите статистические методы, которые будут использоваться для калибровки и для измерения проб. Установки, выбранные здесь, не зависят от выбранного метода калибровки и сохраняются при каждом изменении метода.

Откройте окно **Метод / Статистика**, щелкнув по значку .

Статистика:

Опция	Описание
Сигма-статистика	Расчет среднего значения и стандартного отклонения Статистика ошибок согласно среднему арифметическому: проба измеряется несколько раз после циклов измерения бланка. 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. Значением медианы является: - 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. Так как наименьшее и наибольшее отдельные измеренные значения не влияют на результат измерения, медианная статистика подходит для устранения выбросов.

Повторы

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.	Это число измерений с пробой (циклов измерения бланка), предшествующих началу статистической серии, например, для стабилизации пламени. Эти значения не учитывающиеся при расчете результатов измерения.

Тест выбросов Груббса

Для статистики среднего значения с как минимум тремя измерениями каждой пробы

Опция	Описание
Деактивировано	Включение всех значений статистической серии для определения среднего значения.
Активировано	Выбросы устраняются и исключаются из расчета статистических величин. Рассчитанные таким образом средние значения отмечаются значком "I" в таблице результатов.

Довер. интервал выч.

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.

Опция	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)

Доверит. уровень

Вероятность в диапазоне 68.3... 99,9 % используется для расчета доверительного интервала проб и прогнозируемого диапазона калибровочных кривых.

3.2.9 Окно Метод / ККС – установка параметров проб для контроля качества

В окне **Метод / ККС** задайте параметры проб для контроля качества (пробы КК). В процессе измерения контрольные измерения проводятся в заранее определенных точках с пробами, которые должны дать известные результаты измерения. При этом известны либо абсолютное значение (оптическая плотность/ концентрация), либо разница концентраций с предыдущей пробой. Для контроля качества можно задать разные типы проб.

Результаты контрольных измерений автоматически записываются в так называемые вкладки контроля качества (вкладки КК, также вкладки с правилами или контрольные вкладки). Вкладки сохраняются в методе и выполняются для других измерений по этому методу. Система вкладок контроля качества используется тем самым для контроля качества в течение длительного периода времени.

Откройте окно **Метод / ККС**, щелкнув по значку .

метод

Строки Пламя Транспорт пробы Обработка Калиб. Статистика ККС ККК Вывод

Тип КК проба 2 Назв. QC2_2ppm Реакция кал. + продолж.

Нов./ Модиф. Удалить ☐ Корр. по холост. Един. mg/L

№	Линия	Ехр. конц.	выше		ниже		Карта КК	Действие
			отклон.	[%]	отклон.	[%]		
1	Zn213						-	-
2	Cd228						-	-
3	Cu324	2	2		2		+	+

Общий вид: пробы КК

Общий вид: пробы КК ☐ inc.

Откр. Сохр. Принять Отмена

Элементы в окне Метод / ККС

Опция	Описание
Тип	Эта проба КК отображается в таблице линий. Здесь редактируются параметры пробы КК.
Назв.	Имя отображенной пробы КК
Реакция	Процедура, которой необходимо следовать, если результаты пробы КК превышают или опускаются ниже установленных допустимых пределов.
Нов./Модиф.	Определение новой пробы КК или изменение существующей пробы КК
Удалить	Удаление выбранной пробы КК
Един.	Единица измерения концентрации пробы КК
Нов./Модиф.	Определение новой пробы КК или изменение существующей пробы КК
Общий вид: пробы КК	Открыть обзор со специфическими для линии параметрами проб КК
Таблица линий	В таблице отображаются параметры пробы КК, выбранной в списке Тип.

Типы проб КК

Можно задать следующие типы проб КК:

Опция	Описание
КК проба	Определение пробы как пробы КК Концентрации пробы КК можно либо загрузить из базы данных, либо ввести их. из базы данных В расположенном рядом списке выбрать соответствующую пробу КК. Управление базой данных проб КК осуществляется в окне Данные / Исходн. std./Пробы КК. вручную Ввести концентрации пробы КК непосредственно в таблицу линий Макс. количество проб КК: 50
КК станд.	Определение стандартного раствора как пробы КК

Опция	Описание
	В качестве стандарта КК можно использовать любой стандарт, указанный в калибровочной таблице. Возм. количество стандартов КК = количество стандартов в калибровочной таблице (макс. 65)
КК холост.	Определение холостой пробы как пробы КК
КК спайк	Определение пробы с добавленным объемом как пробы КК 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 пробы и КК спайк разность концентраций обеих проб сравнивается с "ожидаемым повышением концентрации", указанным здесь, и рассчитывается скорость обнаружения. Для пламенной атомизации спайк-раствор уже должен быть предварительно смешан.

При отсутствии сертифицированных контрольных проб контроль качества также может быть проведен с помощью дублирующих определений:

Опция	Описание
КК тренд	Измеренное значение концентрации сохраняется при первом появлении контрольной пробы в процессе анализа. При следующем появлении образуется 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 все этапы подготовки отдельно и помещаются на автосамплер отдельно в виде КК тренд и КК матрица. Выполняется оценка разницы между концентрациями.

Процедура при превышении пределов погрешности

Для типов проб КК как реакцию на превышение можно выбрать различные процедуры:

Тип пробы КК	Процедура
КК проба	флаг
КК станд.	Измеренное значение отмечается в таблице проб, программа измерений продолжается со следующей пробой.
КК спайк	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

Тип пробы КК	Процедура
	последней пробы КК или после последней (ре)калибровки. Если в этом случае проба КК снова выходит за пределы погрешности, выполнение программы измерений прерывается. кал. + возврат 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. Стоп Текущая программа измерений прерывается.
КК холост.	флаг след. метод Стоп
КК тренд	Нет реакции
КК матрица	

Специфические для линии
параметры типов проб КК

Специфические для линии параметры типов проб КК вносятся в таблице линий.

Столбец	Описание
Линия	Наименование аналитической линии
Ехр. конц.	Для КК проба и КК станд. Ожидаемая концентрация в пробе КК
Ехр. увелич. конц.	Для КК спайк Ожидаемое повышение концентрации от пробы к пробе с добавленным объемом Ввод значения, соответствующего добавленному объему и концентрации спайк-раствора.
Ехр. абс.	Для КК холост. Ожидаемая оптическая плотность
нижн. пред.	Нижняя область предела погрешности в процентах (концентрация) или оптическая плотность
верх. пред.	Верхняя область предела погрешности в процентах или оптическая плотность
Карта КК	Если отмечено значком "+", результат контроля качества для этой строки будет представлен во вкладке КК списка результатов.
Действие	Эта процедура применяется при превышении диапазона погрешности. Если значком "+" отмечено несколько линий, то для срабатывания реакции (логики ИЛИ) достаточно превышения предела погрешности для одной из этих линий.
Един.	Только КК станд. Единица ожидаемой концентрации

Ввод параметров проб КК

- ▶ В окне **Метод / ККС** выбрать **Нов./Модиф.**, создав таким образом новый набор параметров для пробы КК, или отредактировать выделенный набор параметров. Откроется окно **Доб./модиф. тип пробы КК**.
- ▶ В списке **Тип** выбрать тип пробы КК.
- ▶ Только **Пробы КК**: при указании нескольких **Пробы КК** в расположенном рядом списке задать порядковый номер.
- ▶ Только **КК станд.:** В списке выбрать номер стандарта согласно последовательности в таблице калибровки.
- ▶ Ввести специфические для линии параметры выставляются в таблицу.
 - ✓ Аналогичным образом определить другие пробы КК.

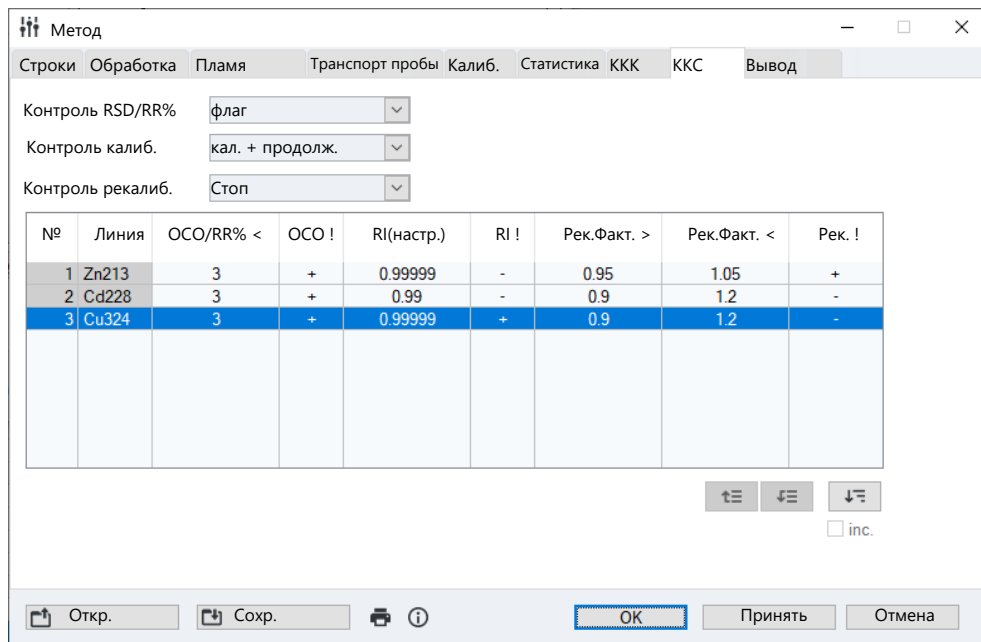
3.2.10 Окно метод / ККК

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

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

Одновременно с различными реакциями можно выбрать различные варианты контроля.

Откройте окно **метод / ККК**, щелкнув по значку .



№	Линия	ОСО/RR% <	ОСО !	RI(настр.)	RI !	Рек.Факт. >	Рек.Факт. <	Рек. !
1	Zn213	3	+	0.99999	-	0.95	1.05	+
2	Cd228	3	+	0.99	-	0.9	1.2	-
3	Cu324	3	+	0.99999	+	0.9	1.2	-

Варианты контроля качества

Опция	Описание
Контроль RSD/RR%	Контроль относительного стандартного отклонения или относительного диапазона
Контроль калиб.	Контроль калибровки
Контроль рекалиб.	Проверка фактора рекалибровки

Действия при превышении пределов погрешности

Опция	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 перед измерением следующей пробы.
кал.+прод.	Только Контроль калиб. и Контроль рекалиб. При превышении пределов погрешности калибровки или фактора рекалибровки выполнение новой калибровки, а затем продолжение измерения со следующей пробы.
след. метод	Только Контроль калиб. и Контроль рекалиб. При превышении пределов погрешности завершить измерение выполняемого в данный момент метода и запустить следующий метод.
Стоп	Только Контроль калиб. и Контроль рекалиб. При превышении пределов погрешности остановка измерения выполняемого в данный момент метода.

Контроль графитовой трубки

Только техника графитовой печи

При слишком длительном применении графитовой трубки качество анализа снижается. Вы можете контролировать срок службы графитовой трубки. При превышении определенного количества циклов ее нагрева Вы получите соответствующее сообщение.

Опция	Описание
Макс. циклов нагрева	Ввод количества измерений с трубкой Текущее значение циклов нагрева выводится в поле рядом с ним.
Реакция	Выбор типа действия при достижении максимального количества измерений нет реакц. Использование графитовой трубки не контролируется. флаг При превышении предельного значения отметить измерение в таблице проб. Стоп При превышении предельного значения остановить процесс анализа.

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 соответствующее действие.

3.2.11 Окно метод / Вывод – параметры вывода результатов и объема памяти

В окне **метод / Вывод** задается объем памяти, количество десятичных разрядов, с которыми результаты будут представлены на экране и в распечатке, а также порядок линий в распечатке.

В рамках разработки метода рекомендуется сохранять спектры. Они позволят получить важную информацию о потенциальных проблемах с матрицами и интерференцией. Без сохраненных спектров пересчет с измененными параметрами метода будет возможен только исходя из расчетных значений оптической плотности. Так, например, уже нельзя будет изменить опорные точки коррекции фона, так как отсутствует информация по спектрам для отдельных пикселей. При обкатанном рутинном методе сохранение спектров, как правило, не требуется.

Чтобы открыть окно **метод / Вывод**, щелкните по значку .

- ▶ При активации соответствующей опции инициируется дополнительное сохранение метода и спектров с результатами анализа.
- ▶ В списке отдельно для каждого элемента задается количество десятичных разрядов для просмотра и печати значений оптической плотности и концентрации, а также порядок вывода при печати.

Примечание

Если в окне **Опции / Пос-ть анализ** активирован параметр **Уже сохран. спектр**, спектры всегда сохраняются вне зависимости от настроек в параметрах метода.

См. также

-  Опции для процесса анализа [▶ 173]

4 Последовательности

Последовательность определяет, в каком порядке будут обрабатываться пробы и операции в одной процедуре измерения. Некоторые данные для описания проб, такие как название пробы и позиция на лотке для пробы, также можно ввести непосредственным образом. Эти данные сохраняются вместе с последовательностью. Последовательность основана на загруженном методе, который содержит информацию о типе калибровки статистических анализах, контроле качества и т.д.

4.1 Создание, сохранение и загрузка последовательностей

Также как и методы, последовательности сохраняются в общей базе данных. Можно создавать новые последовательности, а также изменять, сохранять и загружать последовательности. Другие функции управления последовательностями приведены в окне **Данные / Управл. данными**.

См. также

 Управление методами и последовательностями [► 161]

4.1.1 Создание новой последовательности

Создайте или загрузите метод. На основе метода можно будет задать параметры новой последовательности из измерений проб и действий.

► Выбрать пункт меню **Файл | Новая послед-ть**.

► Или открыть окно с актуальными параметрами последовательности, выбрав



или пункт меню **Разраб. метода | Пос-ть**.

✓ Откроется окно **Послед-ть**. Теперь можно задать измерения и последовательности операций.

См. также

 Параметры измерений и действий в последовательности [► 71]

4.1.2 Сохранение последовательности

После ввода измерений и операций сохраните последовательность в базе данных. Так вы сможете использовать ее для последующих измерений. Последовательности сохраняются в базе данных в окне **Сохран. послед-ть**. При этом Вы можете сохранять в последовательности другие данные для разбивки последовательностей по категориям и облегчения их поиска.

Элементы в окне Сохр. послед-ть

Сохр. послед-ть

Назв.  Кат.

Назв.	Верс.	Дата	Время	Кат.	Оператор
Cd, Zn, Cu	1	10.08.2021	16:03	GR	
TestScraper	1	08.01.2021	8:06		admin

Сорт. по:

Назв. / Верс.

☒ Увеличение
☐ Уменьшение

☒ Только текущ. версия

Описание 

ОК

Отмена

Опция	Описание
Назв.	Имя последовательности
Кат.	Категория (три символа) для дальнейшей маркировки и упорядочивания методов Ввод является опциональным.
Таблица	Обзор существующих последовательностей
Сорт. по:	Параметры этой группы позволяют упорядочить список последовательностей. При активированном контрольном поле Только текущ. версия при одноименных последовательностях будет отображаться только последняя версия.
Описание	Ввод более подробных пояснений по последовательности (опция) Щелчок по значку  открывает список предварительно заданных комментариев. Управление этими комментариями осуществляется в окне Данные / Описания по умолчанию .

Сохранение последовательности

- ▶ В окне **Послед-ть** выбрать **Сохр.** и открыть окно **Сохр. послед-ть**. Или выбрать пункт меню **Файл | Сохр. | Пос-ть**.
- ▶ В окне **Сохр. послед-ть** ввести имя последовательности и выбрать другие параметры.
- ▶ Подтвердить настройки кнопкой **ОК**.
 - ✓ Последовательность сохранится в базе данных. При использовании уже существующего имени последовательности в базе данных будет создана новая версия последовательности.

См. также

 Создание предварительно заданных комментариев [▶ 168]

4.1.3 Загрузка последовательности

Вы можете загружать сохраненные последовательности и на их основе вместе с методом запускать процедуры измерения.

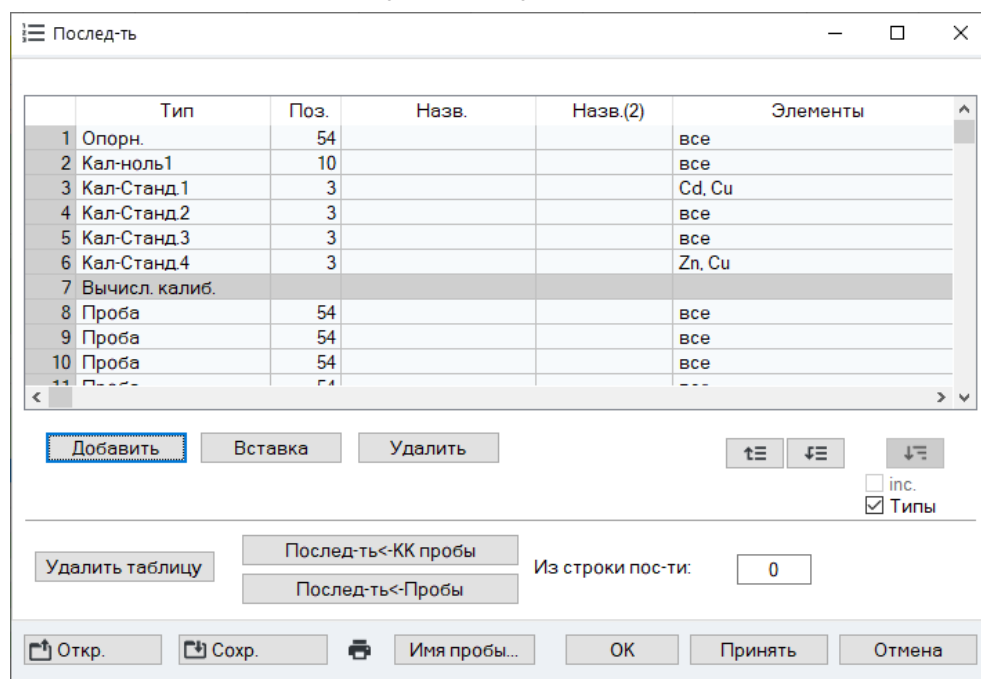
- ▶ Открыть окно базы данных последовательностей. Это можно сделать следующими способами:

- На панели инструментов щелкнуть по значку папки  рядом с полем **Посл..**
- Выбрать пункт меню **Файл | Загр. пос-ть анализов**.
- Открыть окно **Послед-ть**, щелкнув по значку , и выбрать **Откр..**
- ▶ Опционально в поле **Кат.** ограничить отображаемые последовательности, выбрав категорию. Чтобы показать все последовательности, удалить запись в поле **Кат.**.
- ▶ Или, если для последовательностей с несколькими версиями нужно показать только последнюю, активировать опцию **Только текущ. версия**.
- ▶ Выделить последовательность в списке и нажать кнопку **ОК**.
 - ✓ Откроется окно **Послед-ть** с сохраненными параметрами.

4.2 Окно Послед-ть

В окне **Послед-ть** задается порядок измерений и других операций в анализе.

Открыть окно **Послед-ть**, щелкнув по значку .



	Тип	Поз.	Назв.	Назв.(2)	Элементы
1	Опорн.	54			все
2	Кал-ноль1	10			все
3	Кал-Станд1	3			Cd, Cu
4	Кал-Станд2	3			все
5	Кал-Станд3	3			все
6	Кал-Станд4	3			Zn, Cu
7	Вычисл. калиб.				
8	Проба	54			все
9	Проба	54			все
10	Проба	54			все
11	Проба	54			---

Таблица проб и последовательностей действий

В таблице отображаются выбранные последовательности проб и действий в порядке их отработки.

Столбец таблицы	Описание
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 можно передать обозначения проб из файла информации о пробе.
Назв.(2)	Дополнительное обозначение для идентификации пробы (опция)

Столбец таблицы	Описание
Элементы	Только методы с несколькими элементами Элементы или элементные линии, анализ которых проводится в пробе или для которых выполняются специальные действия. все Определяются все заданные в методе элементы / элементные линии (настройка по умолчанию) Символ элемента Определяются только указанные элементы, например, Cu (медь), Pb (свинец). Символ элемента + указатель (при анализе нескольких линий одного элемента) Определяются только указанные элементные линии, напр., Cu1, Cu2. не символ элемента Указанные элементы не определяются, например, не Cu, Pb. не символ элемента + указатель Указанные линии элементов не определяются, например, не Cu1, Pb2.

Экранные кнопки

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

Экранная кнопка	Описание
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 строки
Удалить таблицу	Удалить всю таблицу последовательностей
Послед-ть<-КК пробы	Сохранение информации о наименованиях проб КК и их позиции в автосамплере из окна Имя 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.
Послед-ть<-Пробы	Сохранение информации о наименованиях проб и их позиции на автосамплере из окна Имя пробы Информация из таблицы ID проб заносится в таблицу последовательностей. Первая строка с новым идентификатором пробы задается в поле Из строки пос-ти.

Другие экранные кнопки и варианты ввода см. в обзоре часто используемых элементов управления.

4.3 Параметры измерений и действий в последовательности

В окне **Ред. послед-ть** задается порядок измерений и других операций в анализе. Для вызова окна выберите в окне **Послед-ть** пункт **Добавить** или **Вставка**.

Ред. послед-ть

Выбор
Кол-во строк

☒ Пробы
Число

☐ КК
☐ Опорн.
☐ Холост.
☐ КК холост. DL
☐ Калибровка
☐ Рекалибровка
☐ Спец. действие
☐ Загр. метод

Возможные измерения и действия

В зависимости от используемой техники атомизации и настроек в методе можно задавать параметры различных измерений и действий для анализа.

Опция	Описание
Пробы	Измерение количества проб, введенного в поле Число
КК	Измерение пробы КК и ее оценка в соответствии со спецификацией в методе После активации одного из параметров в списке выбрать одну из проб КК, приведенных в окне Метод / ККС . Параметры пробы КК отображаются в расположенном рядом поле.
Опорн.	Только пламенная атомизация Всегда задавать эталонную пробу как первое измерение в последовательности. В качестве эталона используется дистиллированная вода.
Холост.	Измерение холостой пробы без аналита
КК холост. DL	Измерение бланка с помощью метода значений бланка для определения пределов детектирования и количественного определения
Калибровка	Измерение стандартных проб с известной концентрацией аналита и расчет калибровки согласно спецификации в методе
Рекалибровка	Измерение калибровочной пробы, предназначенной для рекалибровки, и расчет рекалибровки
Проба-добавка	
Холост.-добавка	
Спец. действие	Эти действия не напрямую затрагивают измерение проб (см. ниже).
Загр. метод	Загрузка сохраненного метода, чтобы запустить в последовательности другой анализ

Специальные действия

В процесс измерений можно добавить следующие специальные действия:

Опция	Описание
Пламя вкл. / Пламя выкл.	Только пламенная атомизация Погасить/зажечь пламя
Очистка печи	Только техника графитовой печи Дополнительный этап отжига для очистки графитовой трубки. При этом графитовая трубка нагревается один раз до заданной температуры. Параметры этого этапа отжига задаются в окне Метод / Печь .
Формат. трубки	Только техника графитовой печи Форматирование графитовой трубки
Чистка сист.	Для гидридной техники Дополнительная промывка системы Параметры этого этапа задаются в окне Метод / Гидрид..
Загр. системы	Для гидридной техники После переустановки или очистки гидридной системы, что следует делать ежедневно после завершения работ, перед началом анализа необходимо загрузить шланги реагентами. Поэтому данное действие должно выполняться в последовательности перед первым измерением.
Лампа выкл.	Выключение ксеноновой лампы
Спящ. реж.	Переключение ксеноновой лампы в спящий режим
Время ожид.	Ожидание в течение заданного времени, после чего продолжение анализа
Пауза	Остановка выполнения анализа Теперь можно продолжить последовательность, щелкнув по значку  .
Звук. сигнал	Звуковой сигнал с ПК, например, для индикации окончания калибровки (необходима звуковая карта, динамики и активированные системные звуки Windows)
Повтор. / Пока	Повторять часть последовательности до специального действия Пока В качестве условия отмены можно указать количество проходов петель или время в минутах. Записи в файле результатов дополняются счетчиком или датой и временем в соответствии с критерием отмены. При измерении онлайн должен быть активирован параметр автом. . В ручном режиме это позволит предотвратить необходимость дозирования пробы.
Показ. калибр. диагр.	Показывать калибровочную кривую в ходе выполнения последовательности
Вычисл. калиб.	Пересчет функции калибровки
Очистка коллект.	Для гидридной техники /HydrEA-техники Нагрев золотого коллектора для удаления остатков аналита
Чистка сист.	Для пламенной атомизации Промывка пути подачи пробы
Очист.	Выполнение контролируемой очистки при анализе растворов Параметры задаются в окне Метод / Транспорт пробы .
Продувка оптики	Для contrAA 800 Выключить промывку оптики или включить продувку воздухом или аргоном

Опция	Описание
	Действие пропускается, если процесс продувки уже завершен. Время продувки применяется из окна Опции / Продувка оптики .

Установка параметров последовательности

- ▶ Открыть окно **Послед-ть** щелчком по значку .
- ▶ Выбрать **Добавить**.
Откроется окно **Ред. послед-ть** с доступными для текущего метода измерениями и действиями.
- ▶ Последовательно активировать опции и сохранить их в таблице последовательностей, нажав кнопку **Принять**.
- ▶ Подтвердить выбор последней опции кнопкой **ОК** и вернуться в окно **Послед-ть**.
Таблица последовательностей содержит все измерения и действия в порядке выбора.
- ▶ Опция: в столбце таблицы **Элементы** ввести анализируемые элементы.
- ▶ При использовании автосамплера:
Задать позицию проб на автосамплере. Позиции стандартных проб и проб КК применяются как настройки по умолчанию из метода. Здесь можно изменить позиции.

Примечание: лучше всего ввести наименования и позиции анализируемых проб в окне **Имя пробы**, а затем перенести их в таблицу последовательностей.

Обычная последовательность для процедуры измерения

Обычная последовательность содержит измерения в порядке:

1. Для пламенной атомизации Референтное измерение
2. Калибровка
3. Количество проб

Опционально пробы КК, рекалибровка или измерение скорости обнаружения добавляются между или после измерений проб.

См. также

- 📖 Окно Метод / Гидрид. [▶ 39]
- 📖 Окно Метод / Печь – спецификация параметров атомизации в графитовой печи [▶ 32]
- 📖 Параметры метода для автосамплера для пламенной атомизации и гидридной техники [▶ 43]
- 📖 Параметры метода для автосамплеров для техники графитовой печи (анализ растворов) [▶ 46]
- 📖 Окно Послед-ть [▶ 70]
- 📖 Окно Имя пробы [▶ 76]

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.

Откройте окно **Назв. пробы** щелчком по значку  в строке символов или через пункт меню **Разраб-ка метода / Назв. пробы**.

5.1 Создание, сохранение и открытие данных с информацией о пробах

Создание новой записи ID пробы

- ▶ В строке символов нажать  .
Или откройте окно **Имя пробы** посредством команд меню **Разраб. метода | Имя пробы** или **Файл | Новый файл инф. о пробе**.
Откроется окно **Имя пробы** .
- ▶ Задать настройки проб и проб КК.
- ▶ Активировать набор данных, щелкнув по ОК или Принять .
 - ✓ ID-пробы активированы и будут использоваться для следующего анализа. ID пробы можно также сохранить для последующего анализа.

Сохранение ID пробы

- ▶ В окне **Имя пробы** выбрать **Сохр..**
Или выбрать пункт меню **Файл | Сохр. | Информация о пробе**.
Откроется стандартное окно **Сохранить как** .
- ▶ В поле **Имя файла** ввести имя для набора данных.
- ▶ Сохранить ID пробы, щелкнув по кнопке **Сохр.** .
 - ✓ ID проб сохранены в формате CSV. Вы можете загрузить данные для последующего анализа или отредактировать их в табличном или текстовом редакторе.

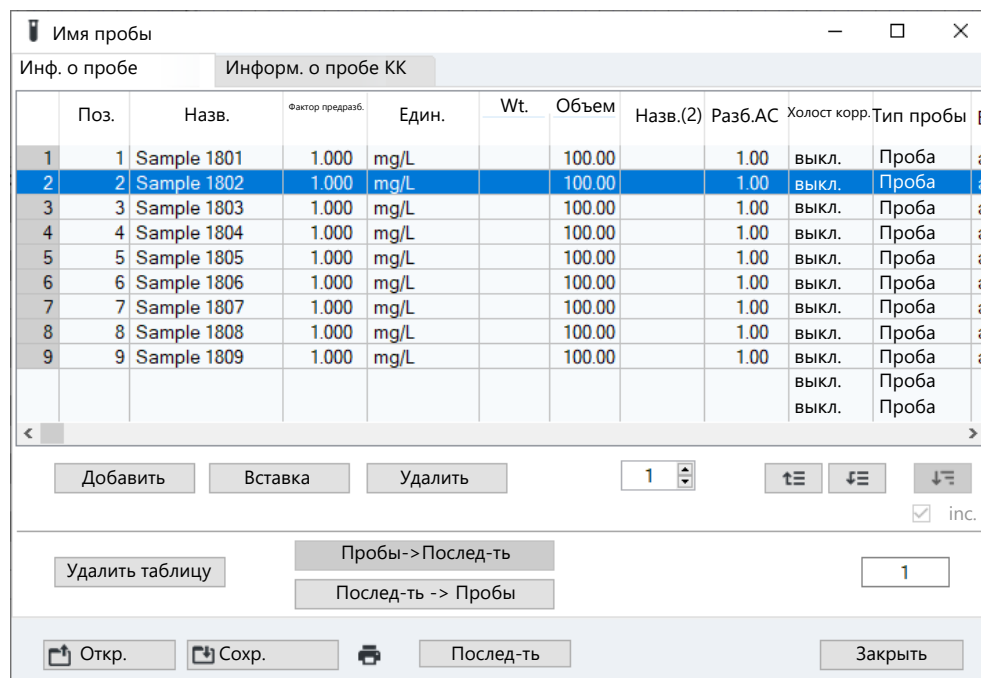
Открытие файлов информации о пробе

- ▶ Откройте ID проб. Это можно сделать следующими способами:
 - На панели инструментов щелкнуть по значку  рядом с полем **Пробы**.
 - Выбрать пункт меню **Файл | Открыть файл инф. о пробе**.
 - В окне **Имя пробы** выбрать **Откр.** .
Откроется стандартное окно **Открыть** .
- ▶ Выбрать файл в списке и нажать кнопку **Открыть** .
 - ✓ ID пробы отобразится в окне **Имя пробы**, и его можно будет использовать для последующего анализа.

5.2 Окно Имя пробы

В окне **Имя пробы** задаются параметры проб и проб КК. Наряду с наименованием и позицией на автосамплере, можно ввести важные для анализа параметры.

Открыть окно **Имя пробы**, щелкнув по значку .



	Поз.	Назв.	Фактор предразб.	Един.	Wt.	Объем	Назв.(2)	Разб.АС	Холост корр.	Тип пробы
1	1	Sample 1801	1.000	mg/L		100.00		1.00	выкл.	Проба
2	2	Sample 1802	1.000	mg/L		100.00		1.00	выкл.	Проба
3	3	Sample 1803	1.000	mg/L		100.00		1.00	выкл.	Проба
4	4	Sample 1804	1.000	mg/L		100.00		1.00	выкл.	Проба
5	5	Sample 1805	1.000	mg/L		100.00		1.00	выкл.	Проба
6	6	Sample 1806	1.000	mg/L		100.00		1.00	выкл.	Проба
7	7	Sample 1807	1.000	mg/L		100.00		1.00	выкл.	Проба
8	8	Sample 1808	1.000	mg/L		100.00		1.00	выкл.	Проба
9	9	Sample 1809	1.000	mg/L		100.00		1.00	выкл.	Проба

Вкладка Информация о пробе

Эта вкладка содержит список свойств проб.

Столбец таблицы	Описание
Поз.	Позиция пробы в дозаторе
Назв.	Имя пробы Ввод является опциональным. Макс. кол-во символов: 20
Фактор предразб.	Коэффициент предварительного разбавления – это коэффициент, на который была разбавлена исходная проба перед ее помещением в автосамплер или, при работе без автосамплера, ее подачи к атомизатору. Коэффициент необходим для расчета концентрации исходной пробы (Конц.2 в таблице результатов).
Един.	Единица измерения концентрации пробы
Wt.	Навеска в граммах (только анализ растворов) Эта масса исходной пробы, которая была добавлена в раствор при подготовке пробы. Навеска требуется для расчета концентрации исходной пробы (Конц.2). Примечание: для анализа твердых проб известные массы проб вводятся в окно результатов / Тверд. или взвешиваются.
Объем	Объем растворителя, в котором была растворена масса исходной пробы (в мл). Значение для расчета концентрации исходной пробы (Конц.2 в таблице результатов).
Назв.(2)	Следующее наименование пробы Ввод является опциональным. Макс. кол-во символов: 20
Разб.АС	Фактор разбавления автосамплера:

Столбец таблицы	Описание
	Примечание: Настройки для используемого здесь режима разбавления задаются в окне Метод / Транспорт пробы .
Холост корр.	Коррекция бланка выкл. Коррекция бланка не проводится. вкл. Для расчета концентрации исходной пробы вычитается последнее измеренное в последовательности значение бланка. Примечание: Процедура коррекции бланка задается в окне Опции / Калибровка.
Тип пробы	Выбор типа пробы Холост. или Тип пробы Данные ID пробы присваиваются очередности проб в последовательности в соответствии с типом пробы, т.е. 1. Бланк в ID пробы = 1. Бланк в последовательности 2. Бланк в ID пробы = 2. Бланк в последовательности 1. Проба в ID пробы = 1. Проба в последовательности 2. Проба в ID пробы = 2. Проба в последовательности и т. д.
Элементы	Только методы с несколькими элементами Элементы или элементные линии, анализ которых проводится в пробе или для которых выполняются специальные действия. все Определяются все заданные в методе элементы / элементные линии (настройка по умолчанию) Символ элемента Определяются только указанные элементы, например, Cu (медь), Pb (свинец). Символ элемента + указатель (при анализе нескольких линий одного элемента) Определяются только указанные элементные линии, напр., Cu1, Cu2. не символ элемента Указанные элементы не определяются, например, не Cu, Pb. не символ элемента + указатель Указанные линии элементов не определяются, например, не Cu1, Pb2.

Экранные кнопки

Опция	Описание
Добавить	Вставка количества новых строк в конце списка
Вставка	Вставка количества новых строк перед отмеченной позицией списка
Удалить	Удаление выделенной строки
Число	Поле ввода количества вставляемых или удаляемых строк
Удалить таблицу	Удаление всей таблицы или информации о пробах
Пробы КК->Послед-ть	Перенос имен проб и позиций в автосамплере в список последовательностей Определение первой строки передаваемой информации в списке последовательностей в поле ввода Из строки пос-ти.
Послед-ть -> Пробы	Перенос имен проб и позиций в автосамплере из списка последовательностей в таблицу информации о пробах

Опция	Описание
	Определение первой строки передаваемой информации в списке последовательностей в поле ввода Из строки пос-ти .

Вкладка Информ. о пробе КК Аналогично вкладке **Инф-ция о пробе** , в этой вкладке перечислены пробы КК. Таблица проб КК имеет структуру, аналогичную таблице проб. Дополнительно в столбце **Тип** содержится информация о типе КК. Столбец **Един.** не включается, так как единица уже задана в методе. Коррекция бланка для проб КК не выполняется.

Экранная кнопка

Опция	Описание
Пробы КК->Послед-ть	Перенос имен проб КК и их позиций в автосамплере в список последовательностей

Другие экранные кнопки и варианты ввода см. в обзоре часто используемых элементов управления.

См. также

- 📄 Окно метод / Транспорт пробы – спецификация подачи пробы [► 43]
- 📄 Параметры калибровки и коррекции бланка [► 176]
- 📄 Наиболее часто используемые элементы управления [► 15]

5.3 Определение информации о пробах и проб КК

Если для анализа Вам требуются дополнительные данные о пробах или пробах КК, такие как навеска или коэффициент предварительного разбавления, следует задать параметры данных в окне **Имя пробы** . Введенные здесь данные можно перенести в последовательность.

- ▶ Сохранить окно **Имя пробы / Инф-ция о пробе** , щелкнув по значку  .
- ▶ В поле **Число** указать количество анализируемых проб. Затем выбрать кнопку **Добавить** , чтобы вставить соответствующие строки в таблицу.
- ▶ Ввести в таблицу требуемую информацию для каждой пробы.
- ▶ Если записи во всех строках идентичны, щелчок по значку  позволит копировать запись выделенной ячейки во все последующие ячейки столбца. Если при этом установлен флажок в поле **inc.** (инкремент), при переносе информации в следующую строку значение каждый раз будет увеличиваться на 1. Так можно легко заполнить места в автосамплере или по порядку пронумеровать имена проб.
- ▶ Тексты из текстовых полей можно копировать в буфер обмена и снова вставлять их. Для этого можно использовать стандартные команды с клавиатуры или открывать контекстные меню правой клавишей мыши.
- ▶ После ввода всех данных в поле **Из строки пос-ти** указать строку в последовательности, начиная с которой информацию о пробе нужно перенести в последовательность. Для переноса информации выбрать **Пробы->Послед-ть** .
- ▶ Аналогично задать информацию о пробах КК в окне **Имя пробы / Информ. о пробе КК** .
 - ✓ Теперь информация о пробах будет использоваться для последующего анализа.

6 Проведение анализа и расчет результатов

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

Измерения запускаются с помощью значков на панели инструментов или через меню Процедура .

Символ	Пункт меню	Функция
	Процедура Вы-полн. пос-ть	Запуск процесса анализа
	Процедура Старт выдел. строки пос-ти...	Выполнить выделенную строку или строки в последовательности. С помощью кнопки мыши и нажатой клавиши Ctrl или Shift можно выделить несколько строк.
	Процедура Стоп	Немедленная остановка процесса анализа Функцию остановки следует использовать только для пламенной атомизации. При использовании режима Hydride/hydrEA и графитовой печи из-за резкой остановки остатки пробы остаются в системе или графитовой печи и могут привести к загрязнению.
	Процедура Прервать	Для режима Hydrid/HydrEA и режима графитовой печи Во время отработки гидридной последовательности или программы печи с помощью этой кнопки можно сообщить о прерывании программы. После распознавания регистрации прерывания цвет кнопки бледнеет. Текущая процедура обрабатывается до конца. Затем процесс анализа останавливается.
	Процедура Продолжить	Продолжить выполнение остановленной процедуры.
	Процедура Заново	Выполнить пересчет результатов, если изменились выходные данные, например, функция калибровки или метод.

6.2 Запуск процедуры измерения

После выбора метода, последовательности и, при необходимости, файлов информации о пробе, в распоряжении есть вся необходимая информация для запуска процедуры измерения.

contrAA должен быть подготовлен к измерению в соответствии с используемой техникой:

- Включена ксеноновая лампа.
- Пламенная атомизация: пламя зажигается и горит дольше, чем период разгона.
- Режим графитовой печи: установлена графитовая трубка и выполнено формирование печи.
- Гидридная техника: кювета предварительно прогрета.
- Дозатор: Пробы подготовлены и находятся на лотке автосамплера.

Сохранение результатов в ходе анализа

Результаты анализа сохраняются непосредственно во время измерения в базе данных в заданном по умолчанию пути или в самоуправляемых подпапках. На выбор их можно сохранить в новой базе данных или добавить к существующей базе данных. Однако невозможно перезаписать базу данных результатов, выбрав одно и то же имя.

При запуске процедуры измерения автоматически запрашивается цель результатов. Откроется окно **Старт Послед-ть: Имя последовательности** со следующими опциями для файла результатов:

СтартПослед-ть

Файл рез-тов

Назв.

Result name

Папка

(Стандрт)

Описание

Description

☒ Нов. файл/список

☐ Добавить к файлу/списку

End / error actions

Присоед. дату/время к имени файла рез-тов. активн. ("Опции").

Текущ. метод :
CuCr SW-Test1_PF

Версия : 1

изБаза данных

Продолж. с :
CuCr SW-Test1_PF

Версия 1

OK

Отмена

Опция	Описание
Назв.	Имя файла в базе данных результатов
Папка	Путь для сохранения файла результатов Папка по умолчанию для сохранения файлов отображается в окне Опции / Папка .
Описание	Эта запись сохраняется вместе с результатами анализа. Ввод является опциональным. Щелчок по кнопке ... позволяет выбрать пользовательские описания. Настройка этих описаний осуществляется в окне Данные / Описания по умолчанию .
Нов. файл/список	При активации 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.
End / error actions	Открывает окно опций с действиями, которые будут выполняться в конце или при преждевременном прерывании измерений. Возможные параметры зависят от техники атомизации. Примечание: параметры можно также активировать в ходе отработки последовательности.
OK	Начало измерения

Файл содержит результаты измерения и анализа, а также информацию об ID пробы и методе. Дополнительно в метод можно добавить сохранение данных калибровки. В этом случае параметры метода сохраняются в базе данных результатов. Спектры сохраняются в отдельном файле под таким же именем файла с другим расширением. База данных результатов сохраняется с расширением .tps. Файлы спектров получают расширение spk.

- Запуск процедуры измерения
- ▶ Подготовить устройство в соответствии с техникой атомизации, подготовить пробы.
 - ▶ Запустить процедуру измерения щелчком по значку  или в пункте меню **Процед. | Старт пос-ти...** открыть окно **Старт Послед-ть**.
 - ▶ Выбрать имя для файла результатов. Опционально можно сохранить результат в новом файле или добавить его в уже существующий файл. Перезаписать уже существующий файл невозможно.
 - ▶ По щелчку по кнопке **ОК** запускается процедура измерения в соответствии с настройками метода и последовательности.
 - ✓ При использовании автосамплера измерение выполняется автоматически. Если подача пробы осуществляется вручную без автосамплера, инструкции по подготовке пробы отображаются на экране.

Отображение в процессе анализа

Во время измерения результаты отображаются в реальном времени в окне процессов и результатов. Дополнительно можно открыть следующие окна просмотра:

- **Диагр. сигнал.:** Кривая сигнала измерения
- **Диагр. спектра:** Линия поглощения аналита и параллельно отображаемая спектральная область
- **Бар-график:** Значения измерения в столбчатой диаграмме
- **Окно отчета:** актуальный статус пламени или статус печи
- **Конц.пробы на кал.кривой:** положение полученной концентрации пробы в калибровочной кривой

Настроить вид этих окон можно в окне **Опции / Пос-ть анализов**. Окна просмотра можно также скрывать или открывать во время измерения:

- Щелчком по **Опции послед-ти** открыть окно **Окна рез-тов**. Там активировать параметры вида окон и выбрать **Окна рез-тов**.
- Открыть все окна просмотра, выбрав пункт меню **Дисплей | Открыть окно рез-тов** или нажав клавишу F7.
- Закрыть все окна просмотра, выбрав пункт меню **Дисплей | Закрыть окно рез-тов** или нажав клавишу F8.

Прогресс измерения документируется в списке последовательностей окна результатов. Строки с последовательными действиями отмечены в столбце таблицы следующими символами

Символ	Описание
-	Не измерено / не отработано
О	Измеряется
+	Измерено / отработано

Дополнительно во время измерения в строке символов сбоку отображаются следующие кнопки:

Экранная кнопка	Описание
Опции послед-ти	■ Задать дополнительные параметры для окончания последовательности или в случае ошибки ■ Открыть окно просмотра
Показ. метод	Открыть окно метода Метод можно только читать, но не изменять.
Послед-ть Пробы	Открыть окно последовательности Последовательность можно дополнить в ходе текущего измерения. В окне последовательности есть кнопка Имя пробы , которая позволяет также редактировать ID пробы.

Экранная кнопка	Описание
Актив. скребок	При нажатии кнопки скребок в режиме закисы азота очищает горелку в пределах статистической серии пробы между двумя измерениями.
Погасить пламя	Немедленное гашение пламени

См. также

- 📄 Создание предварительно заданных комментариев [▶ 168]
- 📄 Опции для процесса анализа [▶ 173]

6.3 Прерывание, продолжение или остановка процедуры измерения

Текущую процедуру измерения можно прервать, а затем снова продолжить. Однако при использовании режима графитовой трубки и гидридной техники текущее измерение пробы необходимо выполнить до конца и только после этого остановить. Эта процедура позволит избежать отложения остатков пробы в графитовой трубке или в гидридной системе. При использовании режима пламени работу можно прервать в любой момент без ограничений.

Остановка / прерывание процедуры измерения

- ▶ Щелчок по кнопке  или выбор пункта меню **Процед. | Стоп** позволяет немедленно остановить процедуру измерения.
- ▶ Щелчок по кнопке  или выбор пункта меню **Процед. | Прервать** прерывает процедуру измерения. После распознавания регистрации прерывания цвет кнопки бледнеет. Гидридная программа или программа печи отработываются до конца. Затем процесс анализа останавливается.

Продолжение процедуры измерения

- ▶ Щелчок по кнопке  или выбор пункта меню **Процед. | Продолжить** продолжает остановленную/ прерванную процедуру. Откроется диалоговое окно **Продолж. пос-ть** со статусом операции до прерывания.
- ▶ Выбрать одну из опций для продолжения измерения.
- ▶ При изменении метода активировать опцию **Продолжить с измененн. методом**. В результате в файл результатов записывается новый метод, и сохраняется другая версия метода.
- ▶ Нажать кнопку **ОК**.
 - ✓ Процедура измерения продолжится с выбранной опцией, результаты внесены в базу данных результатов.

6.4 Повтор действий последовательности

Отдельные действия в последовательности, отдельные измерения в статистической процедуре или специальные действия можно повторить.

- ▶ В главном окне во вкладке **Послед-ть** или **Послед-ть/Результаты** выделить строки с действием, которое необходимо повторить.
- ▶ Запустить процедуру измерения щелчком по значку  или выбрав пункт меню **Процед. | Старт выдел. строки пос-ти...**

- ▶ В окне **Старт Послед-ть** выбрать 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.
- ▶ Нажать кнопку **ОК**.
 - ✓ Запустится повтор выбранных строк последовательности.

При каждом повторе последовательности или измерения отдельных строк сохраняется новая версия метода. В этом случае проверка изменений в методе не производится.

6.5 Пересчет результатов анализа

После любого изменения параметров анализа, таких как изменение калибровочной функции или метода результаты должны быть пересчитаны, чтобы изменения вступили в силу. Также можно изменять информацию о пробе, например, имена проб или коэффициенты разбавления, и заново учитывать их при выводе результатов анализа. Параметры пересчета задаются в окне **Переделать рез-ты**.

▲ Переделать рез-ты

Старт данных

Назв.
C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectCS\EA\Results\Gra

☐ Единичн. знач.

☐ Информация о пробе изменена

☒ Спектр

Переделать вводы

Из строки
1

В строку
31

Линии текущего выбранного метода

№	Линия
1	Cu324
2	Cr357

Выбрать все

Отменить выдел.

Файл рез-тов Цель

Папка
test

Назв.

...

☒ Нов. файл/список

☐ Добавить к файлу/списку

☒ Сохр. спектр

☐ Обновление диагр. рез-тов

☐ добавить к карте КК

Описание
Калибровочная функция изменена

Калибровочная функция изменена

ОК

Отмена

Параметры в окне Переделать рез-ты

Опция	Описание
Группа Старт данных	
Назв.	Имя оригинального файла с результатами анализа

Опция	Описание
Единиичн. знач.	Результаты измерений отдельных значений проб были сохранены в исходном файле. Пересчет осуществляется исходя из отдельных значений.
Данные модифицир. пробы	Данные с информацией о пробе были изменены и должны быть учтены при пересчете.
Группа Переделать вводы	
В строку	Начальная строка в списке результатов
Из строки	Конечная строка в списке результатов
Линии текущего выбранного метода	Пересчет выбранных линий
Группа Файл рез-тов (Цель)	
Папка	Путь сохранения файла результатов
Назв.	Имя файла 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 Если активировано, пересчитанные значения будут добавлены к существующему файлу.
Сохранение спектров	Сохранение спектров отдельных значений проб с новыми результатами анализа Эта опция активна только в том случае, если спектры сохранены в исходном файле.
Обновление диагр. рез-тов	Обновление окон просмотра при пересчете
добавить к карте КК	Ввод пересчитанных значений во вкладки КК, если вкладки КК указаны в методе
Описание	Эта дополнительная запись сохраняется вместе с пересчитанными результатами анализа. Запись требуется при установленной системе управления пользователями. В списке можно выбрать пользовательские описания.

Выполнение пересчета

- ▶ Щелкнуть по значку  или выбрать пункт меню **Процед. | Заново**.
Откроется окно **Переделать рез-ты**.
- ▶ Задать параметры и выбрать имя файла.
- ▶ Нажать кнопку **ОК**.
✓ Будет выполнен пересчет.

Примечание: пересчитанные значения можно опционально сохранить в новом файле или добавить к существующему файлу результатов. Изменение оригинальных данных невозможно. Оригинальные результаты всегда сохраняются до тех пор, пока исходный файл не будет удален.

См. также

- 📄 Создание предварительно заданных комментариев [▶ 168]

6.6 Обработка измерений параллельно с выполнением анализа

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 соединение с устройством отсутствует. 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.

- ▶ Выбрать пункт меню **Файл | Старт оффлайн**.
Запустится второе окно программы.
- ▶ Открыть файл результатов текущего измерения с помощью команды | меню **Файл | Открыть рез-ты**.
Уже полученные результаты будут загружены в окно результатов.
- ▶ Загрузить другие результаты из текущего измерения щелчком по значку  или выбрав пункт меню **Вид | Обнов. список рез-тов**.
 - ✓ Дальнейшую обработку результатов можно выполнить, например, вызвав данные пробы или функцию калибровки.

Примечание: при пересчете новые полученные результаты сохраняются в новом файле. Доступ к исходному файлу требует повторного открытия файла результатов.

6.7 Просмотр результатов и процесса анализа

Примечание: в зависимости от выбранного режима работы измеренные значения представлены в единицах оптической плотности или эмиссии. В дальнейшем будут упоминаться только значения оптической плотности. Такая же информация применима и к значениям эмиссии. Для значений оптической плотности в выводе значений используется сокращение **Абс.**, для значений эмиссии – сокращение **Эмис.**.

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

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

Можно выбрать следующие вкладки:

- **Послед-ть/Результаты:** содержание вкладок Последовательность и Результаты в одной вкладке
- **Послед-ть:** отображение текущей последовательности
- **Результаты:** представление результатов измерений
- **Общий вид:** обзор результатов измерений
- **Тверд.**

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

6.7.1 Вкладка Послед-ть/Результаты

Вкладка **Послед-ть/Результаты** содержит данные обеих отдельных вкладок **Послед-ть** и **Результаты**.

6.7.2 Вкладка Последовательность

Во вкладке **Послед-ть** представлены активная последовательность и выбранные параметры из ID пробы. Во время анализа здесь можно отслеживать прогресс процедуры измерения. При этом используются следующие символы:

Символ	Описание
-	Не измерено / не отработано
0	Измеряется
+	Измерено / отработано

6.7.3 Вкладка Результаты

Во вкладке **Результаты** приведены все результаты измерений и статистические оценки. Для большей наглядности значения распределены в таблицах. Вкладки этих таблиц расположены в нижней части окна.

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

Таблица Абс./Время

Таблица содержит значения оптической плотности и статистические оценки в соответствии с настройками метода (окно **Метод / Статистика**).

Столбец таблицы	Описание
№	Номер в последовательности анализа
Назв.	Имя пробы
Линия	Аналитическая линия
Абс.	Среднее значение или медиана отдельных измеренных значений оптической плотности Для анализа твердых проб: нормированная оптическая плотность
СО(Абс.)	Стандартное отклонение оптической плотности (статистика среднего значения)
ОСО%	Относительное стандартное отклонение (статистика среднего значения)
Дата / Время	Дата и время измерения
Единичн. знач. (Абс.)	Отдельные значения измерений оптической плотности

Таблица Тверд.

Столбец таблицы	Описание
№	Номер в последовательности анализа
Назв.	Имя пробы
Норм.Абс.	Среднее значение нормированной оптической плотности (оптическая плотности/ взвешенная порция)
СО	Стандартное отклонение значений Конц. 1 (статистика среднего значения)
ОСО%	Относительное отклонение значений Конц. 1 (статистика среднего значения)
Масса	Средняя абсолютная масса аналита
Един.	Абсолютные единицы аналита
Влажн. [%]	Относительная влажность пробы
Wt. [%]	Массы отдельных объемов

Столбец таблицы	Описание
Дата / Время	Дата и время измерения
Единицн. знач. (Абс.)	Отдельные значения измерений оптической плотности

Таблица Конц.1

Таблица **Конц.1** показывает концентрацию анализируемой пробы при подаче в ААС.

Столбец таблицы	Описание
№	Номер в последовательности анализа
Назв.	Имя пробы
Линия	Аналитическая линия
Един.	Единица измерения концентрации
Конц.1	Анализируемая концентрация пробы
СО	Стандартное отклонение значений Конц. 1 (статистика среднего значения)
ОСО%	Относительное отклонение значений Конц. 1 (статистика среднего значения)
R	Диапазон значений Конц. 1 (медианная статистика)
R%	Относительный диапазон значений Конц. 1 (медианная статистика)
Cf	Доверительный интервал
Рем.	Примечания к результатам в ходе процедуры измерения
ФР	Коэффициент разбавления при превышении концентрации При превышении концентрации в окне Метод / Транспорт пробы можно активировать автоматическое разбавление с помощью автосамплера. Коэффициент разбавления этого автоматического разбавления с помощью автосамплера учитывается при расчете Конц. 1 .
Абс.	Среднее значение или медиана отдельных измеренных значений оптической плотности Для анализа твердых проб: нормированная оптическая плотность
СО(Абс.)	Стандартное отклонение оптической плотности (статистика среднего значения)
СО(Абс.)	Стандартное отклонение оптической плотности (статистика среднего значения)
Дата / Время	Дата и время измерения
Единицн. знач. (Абс.)	Отдельные значения измерений оптической плотности

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

Опция	Описание
№	Номер в последовательности анализа
Назв.	Имя пробы
Линия	Аналитическая линия

Опция	Описание
Един.	Единица измерения концентрации
Конц. 2	Концентрация оригинальной пробы с учетом данных пробы
СО 2	Стандартное отклонение значений Конц. 2 (статистика среднего значения)
ОСО%	Относительное отклонение значений Конц. 2 (статистика среднего значения)
Cf	Доверительный интервал
Рем.	Примечания к результатам в ходе процедуры измерения
Абс.	Среднее значение или медиана отдельных измеренных значений оптической плотности Для анализа твердых проб: нормированная оптическая плотность
Дата / Время	Дата и время измерения
Единиичн. знач. (Абс.)	Отдельные значения измерений оптической плотности

Таблица Рез. КК

В таблице **Рез. КК** показаны результаты проб КК: Заданное и фактическое значение концентрации, скорости возврата (не для бланка), реакции на возможные отклонения (все виды, кроме бланка).

Столбец таблицы	Описание
№	Номер в последовательности анализа
Назв.	Имя пробы
Линия	Аналитическая линия
КК для функций калибровки	RI(настр.) Наклон Хар.конц.: Характеристическая концентрация
КК для проб КК, не для бланка КК	Конц. 1 Номинальн. знач.: Номинальное 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 в ходе процедуры измерения
Абс.	Среднее значение или медиана отдельных измеренных значений оптической плотности Для анализа твердых проб: нормированная оптическая плотность
СО(Абс.)	Стандартное отклонение оптической плотности (статистика среднего значения)
Дата / Время	Дата и время измерения
Единиичн. знач. (Абс.)	Отдельные значения измерений оптической плотности

Таблица Ошибка

Если при измерениях возникли ошибки соответствующие измерения отмечаются в таблице красным цветом. В таблице **Ошибка** возникающая погрешность документируется в письменном виде.

Таблица Единичн. знач.

Таблица **Единичн. знач.** содержит отдельные значения измерения оптической плотности.

Таблица Имя пробы

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

Столбец таблицы	Описание
№	Номер в последовательности анализа
Назв.	Имя пробы
Линия	Аналитическая линия
Поз.	Позиция пробы в дозаторе
Фактор предразб.	Коэффициент предварительного разбавления – это коэффициент, на который была разбавлена исходная проба перед ее помещением в автосамплер или, при работе без автосамплера, ее подачей к атомизатору. Коэффициент необходим для расчета концентрации исходной пробы (Конц.2 в таблице результатов).
Wt.	Навеска в граммах (только анализ растворов) Эта масса исходной пробы, которая была добавлена в раствор при подготовке пробы. Навеска требуется для расчета концентрации исходной пробы (Конц.2). Примечание: для анализа твердых проб известные массы проб вводятся в окно результатов / Тверд. или взвешиваются.
Объем	Объем растворителя, в котором была растворена масса исходной пробы (в мл). Значение для расчета концентрации исходной пробы (Конц.2 в таблице результатов).
Назв.(2)	Следующее наименование пробы
Разб.АС	Фактор разбавления автосамплера: Примечание: Настройки для используемого здесь режима разбавления задаются в окне Метод / Транспорт пробы .
Холост корр.	Коррекция бланка выкл. Коррекция бланка не проводится. вкл. Для расчета концентрации исходной пробы вычитается последнее измеренное в последовательности значение бланка. Примечание: Процедура коррекции бланка задается в окне Опции / Калибровка .

Таблица Опред. пользователем

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

- ▶ Нажать кнопку **Выбрать столбцы** в правом верхнем углу таблицы.
- ▶ В окне **Выбрать столбцы** мышью выделите необходимые параметры.
- ▶ Чтобы изменить порядок просмотра, выделите параметр и переместите его в списке кнопками со стрелками на клавиатуре. Несколько одновременно выделенных параметров перемещаются вместе.
- ✓ 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

 Обзор обозначений, используемых при отображении значений [► 188]

6.7.4 Вкладка Общий вид

Во вкладке **Общий вид** представлен обзор результатов анализа. При этом можно выбрать различные варианты вывода.

Опция	Описание
Конц. 1	Анализируемая концентрация пробы
Конц. 2	Концентрация оригинальной пробы с учетом данных пробы
Абс.	Среднее значение или медиана отдельных измеренных значений оптической плотности Для анализа твердых проб: нормированная оптическая плотность
Абс. (ОСО / R)	Относительное стандартное отклонение или диапазон оптической плотности
СО	Стандартное отклонение значений Конц. 1 (статистика среднего значения)
ОСО%	Относительное отклонение значений Конц. 1 (статистика среднего значения)
LOD	Предел детектирования
LOQ	Предел количественного определения
Восстановление (Номинальн. знач.)	Уровень воспроизводимости (заданное значение)
RI (настр.)	Корреляция калибровочной кривой

При активации соответствующих флажков можно отобразить следующие типы проб:

- Пробы
- Пробы КК
- Кал-Станд.
- Друг.

Щелчок по значку  открывает окно **Печать Общий вид**, в котором, задав линии для печати и параметры, можно запустить печать. Наряду с выводом на печать на подключенный принтер, данные можно также сохранить в формате TXT, HTML или PDF и просмотреть в специальном приложении

См. также

 Печать данных результатов [► 157]

6.7.5 Вкладка Тверд.

Во вкладке **Тверд.** приведен порядок отдельных измерений во время анализа твердых проб.

Порядок выполнения калибровочных измерений и измерений пробы, установленный в последовательности, разбивается на отдельные измерения; также вводятся и редактируются их взвешенная порция, тара и состояние дозирования.

См. также

📄 Анализ твердых проб с техникой графитовой печи [► 103]

6.8 Открытие файлов результатов или их удаление из окна просмотра

Сохраненные результаты анализа можно открыть для повторного просмотра.

Открытие файла результатов

Файлы результатов хранятся в заданных папках согласно технике атомизации. Поэтому открывать можно только файлы, соответствующие выбранной в окне **Быстрый старт** технике атомизации. Линейные спектры доступны, если с файлом результатов также был сохранен файл со спектрами.

- ▶ Выбрать пункт меню **Файл | Открыть рез-ты**.
- ▶ В стандартном окне **Открыть** открыть файл. Откроется окно **Загр. рез-ты**. Здесь вместе с именем файла также выводятся имя и номер устройства, используемая аналитическая аппаратура, версия программного обеспечения и опциональное описание.
- ▶ Если на последующих операциях понадобятся данные с информацией о пробах, активировать опцию **Выделить инф-цию о пробе**. Информация о пробах требуется, например, при пересчете с измененным ID пробы.
- ▶ Нажать кнопку **ОК**.
 - ✓ Файл результатов загрузится и отобразится в окне результатов. Имя загруженного в настоящий момент файла результатов отображается в строке состояния ASpect CS.

Файл можно пересчитать или распечатать. Также можно извлечь из файла результатов метод и использовать его для следующих измерений. Если при загрузке извлекались ID проб, эти данные отображаются в окне **Имя пробы**.

Удаление текущего отображаемого списка результатов

При загрузке другого файла результатов отображаемый список результатов всегда удаляется и заменяется на новый. Текущий отображаемый список результатов можно удалить также окончательно.

- ▶ Выбрать пункт меню **Ред. | Удалить список рез-тов**.
 - ✓ Список результатов удаляется, а на экране отображается пустое главное окно для дальнейших операций.

Примечание: в программе доступен ряд функций журнала для печати результатов. Кроме того, результаты можно импортировать или экспортировать. Результаты отдельных проб можно найти в окне **Данные | Управл. данными**.

См. также

📄 Печать данных результатов [► 157]

📄 Управление данными результатов [► 163]

6.9 Данные пробы и спектры

В окне **Единиичн. Значения** можно показать отдельные значения (статистические измерения) измерения и, если сохранены, спектры по каждому измерению в окне результатов. Если с результатами анализа также были сохранены спектры, просмотреть и отредактировать отдельные спектры можно в окне **Спектр**.

6.9.1 Отображение отдельных значений проб

В окне **Единищн. Значения** можно просмотреть подробную информацию об отдельных значениях (статистические измерения), а также кривые сигналов измерения пробы. Кроме того, в этом окне доступны следующие функции:

- Просмотр спектров отдельного измерения
- Активация/отключение отдельных измерений в расчете значения анализа
- Адаптация предельных значений интегрирования для анализа площадей сигнала

Двойным щелчком по соответствующей строке пробы в таблице результатов откройте окно **Единищн. Значения**. Или можно выделить строку и выбрать пункт меню **Вид | Детальн. рез-ты**.

Единищн. Значения - [Sample 1 Cu]

Cu324 № Абс. Дата
 Тип CO Время
 Назв. OCO

№	Абс.	Конц.1 µg/L	Рем.
1	0.45092	9.11	
2	0.45520	9.22	

Удалить Показ. Спектр

Абсорбция

Номер спектра

Время [s]

Перекрыв.

OK Отмена

Данные пробы

Поле	Описание
Линия	Аналитическая линия
№	Номер измерения в таблице результатов
Тип	Тип пробы
Назв.	Имя пробы
Абс. / Эмис.	Значение оптической плотности/ эмиссии, усредненное по всем отдельным значениям
CO	Стандартное отклонение (статистика среднего значения) Отображение не зависит от выбранного для измерения статистического метода (среднее значение/медиана).
OCO	Относительное стандартное отклонение (статистика среднего значения) Отображение не зависит от выбранного для измерения статистического метода (среднее значение/медиана).
Дата / Время	Время измерения

Отображение / удаление отдельных значений

Полученные отдельные значения проб приведены в таблице.

Столбец таблицы	Описание
№	Номер отдельного значения в пределах измерения пробы
Wt.	Только анализ твердых проб Навеска порции для каждой пробы.
Абс.	Оптическая плотность отдельного значения Для анализа твердых проб: нормированная оптическая плотность
Рем.	Нет Отдельное значение включается в расчет среднего значения пробы. MAN Значение было вручную исключено из расчета значения пробы. KOR Значение было автоматически исключено из расчета значения пробы в соответствии с тестом выброса Граббса.

Кнопки и опции

Экранная кнопка/опция	Описание
Удалить / Действие	Исключение отдельного значения пробы из расчета среднего значения и повторное включение его в расчет
Показ. Спектр	Только при сохранении отдельных спектров с измерением и активированном режиме Scientific Mode (пункт меню Прочее Научный режим) Отображение измеренных зависимых от длины волны линейных спектров, из которых получается отдельное значение пробы
Переместить с номером ввода	Только стандарты калибровки При пересчете текущая проба будет заменена пробой в № позиции таблицы результатов.
	Сброс значения масштаба графика
	Увеличение масштаба графика Удерживая нажатой клавишу мыши, выделить область для увеличения рамкой
	Отображение в кривой сигналов значений сигналов
	Вставка текстового поля в график Удерживая нажатой клавишу мыши, сделать рамку и ввести в нее текст.
	Установка предельных значений интегрирования сигнала
	Переключение между линиями отдельных проб и с одной пробы на следующую в таблице результатов
Перекрыт.	Отдельные спектры отображаются в графике с наложением. Выделенный отдельный спектр отображается при этом полужирным начертанием.

На графике справа от таблицы во времени отображается кривая сигнала, а для техники графитовой печи – дополнительно кривая неспецифического фона соответствующего выделенного отдельного значения. Количество точек измерения соответствует числу измеренных спектров. Это число зависит от времени измерения и отдельно задается для каждой аналитической линии в окне **метод / Строки**. Области сигнала, лежащие за пределами диапазона интегрирования, отображаются светло-серым цветом. Области, в которых спектры содержат серьезные специфиче-

Исключение отдельных значений проб	ские структуры, отображаются в ходе процедуры корректировки с опорн. желтым цветом. В этом случае проверьте спектральную базовую линию кнопкой Показ. Спектр. По желанию можно вручную исключить отдельные значения из расчета среднего значения пробы. ▶ Отметить в таблице отдельное значение, которое нужно исключить. ▶ Нажать кнопку Удалить. Отдельное значение содержит в столбце Рем. примечание MAN. ▶ Щелчком по значку  запустить пересчет. ✓ Данные пересчитаются и добавятся к существующему файлу результатов или сохранятся в новом файле. Щелчок по кнопке Действие позволяет снова активировать выделенное отдельное значение для расчета среднего значения. Примечание: при активной опции теста выбросов Граббса можно автоматически определить и устранить выбросы из числа отдельных значений во время анализа.
Повторная установка предельных значений интегрирования	При параллельном анализе нескольких аналитических линий (анализ нескольких линий) в методе применяются параметры аналитических линий основной линии для дополнительных линий. При интегральном анализе сигнала (режим графитовой трубки) целесообразно адаптировать предельные значения интегрирования дополнительных линий под фактическую кривую пика. ▶ Выбрать , после чего щелкнуть в графике по времени начала интегрирования. Появится вертикальная линия. ▶ Щелкнуть по узкой кнопке ... и в контекстном меню выбрать пункт Установ. конец интегр. . После этого щелкнуть в графике по времени окончания интегрирования. ▶ Снова щелкнуть по кнопке ... и выбрать пункт Исп. значения в тек. методе . Крайние области сигнала, которые не будут учитываться, отображаются на графике в цвете. ▶ Закрыть окно Единиичн. Значения, щелкнув по кнопке ОК. Появится указание, что метод можно пересчитать. ▶ Щелчком по значку  запустить пересчет. ✓ Данные пересчитаются и добавятся к существующему файлу результатов или сохранятся в новом файле. Актуальные значения были сохранены в методе и их можно просмотреть в окне метод / Обработка , щелкнув по кнопке Интегр. сигнала .

6.9.2 Отображение и анализ спектров

Функция доступна только при сохранении отдельных спектров с измерением и активированном режиме Scientific Mode (пункт меню **Прочее** | **Научный режим**).

Линейные спектры отдельного значения открываются в окне **Единиичн. Значения**.

- ▶ В главном окне двойным щелчком мыши щелкнуть по строке пробы.
Откроется окно **Единиичн. Значения** .
- ▶ Выделить отдельное значение в таблице и нажать **Показ. Спектр** .
 - ✓ Откроется окно **Спектр** .

В окне **Спектр** можно выполнить следующие функции:

- Отображение отдельных спектров
- Редактирование коррекции фона
- Трехмерное отображение семейства спектральных характеристик
- Коррекция отклонений пика

В окне **Спектр** с левой стороны соответственно отображаются спектры отдельных значений проб в разных режимах просмотра. Вследствие записи измеренного значения посредством CCD-строки формируется трехмерное семейство спектральных характеристик изменений сигнала в зависимости от диапазона длины волны и времени. Делаются срезы семейства спектральных характеристик и таким образом кривые измерений рассматриваются в двухмерном режиме:

- С фиксированной длиной волны (пиксели) во времени
- В определенное время в диапазоне длин волн.

Оба режима просмотра можно активировать в графике.

Кнопки в окне Спектр

Экранная кнопка	Описание
Параметры линии	Загрузка параметров линий для коррекции фона и спектрального анализа из метода или отправка их в метод
3D диагр.	Открытие кривых спектров в дополнительном окне
	Переключение между линиями отдельных проб и с одной пробы на следующую в таблице результатов

Графическое представление с левой стороны вкладок

При представлении в диапазоне длин волн в качестве оси абсцисс задается **пиксель**. Три красных значения длины волны отображают верхний и нижний предел измеренной спектральной области, а также положение анализируемого пикселя (пики элементной линии). Опорные пиксели для коррекции фона выделены серыми линиями. Анализируемый пиксель выделен сквозной красной линией. Область обрабатываемого пикселя выделена светло-красным цветом.

При использовании метода коррекции фона IBC и IBC-m области с перманентными структурами (полосы поглощения в эталонном спектре) при отключенной коррекции перманентных структур автоматически блокируются. Эти области представлены в окне просмотра спектров серым цветом.

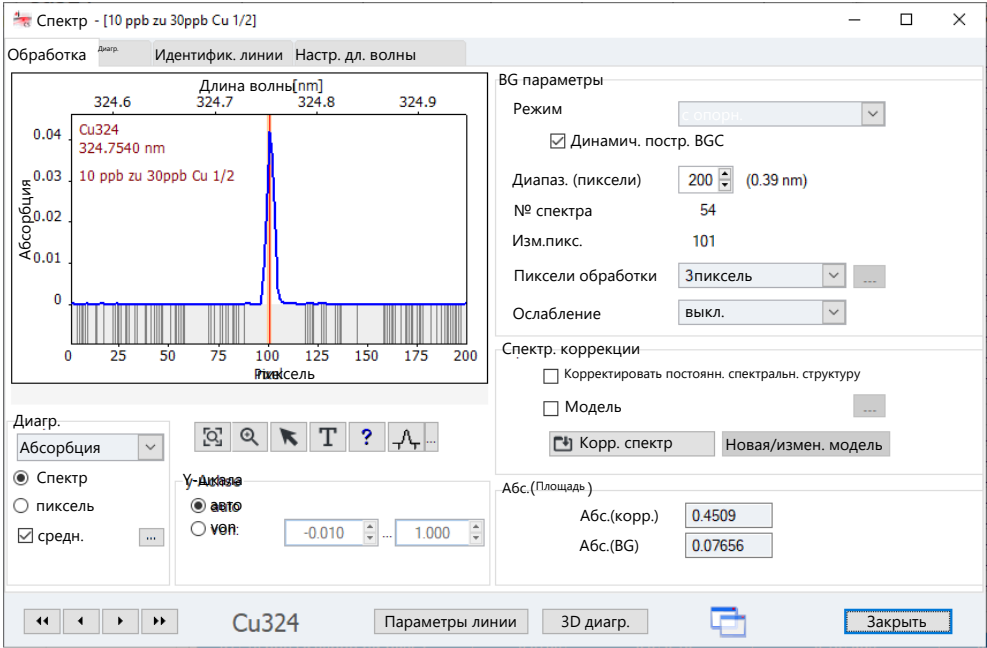
Опция	Описание
Список выбора для отображения графика	Абсорбция Опорн. энергия энерг. пробы Можно переключаться между просмотром спектра экстинкции пробы, энергетического спектра эталонного значения (только среднее значение) и энергетического спектра пробы.
Спектр	Отображение кривой спектра выбранного измерения по длине волны В поле кнопками со стрелками выбрать номер измерения для просмотра. средн. Отображается средняя кривая спектра для всех измерений. Щелчок по кнопке  позволяет ограничить область усредняемых спектров. Для этого укажите начальный и конечный спектр диапазона.
пиксель	Отображение кривой спектра на выбранном пикселе во времени В поле кнопками со стрелками выбрать номер пикселя. Эфф. Отобразится интеграл (над обрабатываемым пикселем).

Опция	Описание
	Восстановление исходных координат после масштабирования
	Увеличение масштаба графика Щелчок по значку при нажатой левой кнопке мыши позволяет выделить фрагмент спектра для увеличения.
	Отображение позиции пикселя на кривой графика При наведении курсора мыши на кривую под графиком отображается значение измерения, на котором сейчас находится курсор мыши.
	Вставка текстового поля в график Удерживая нажатой клавишу мыши, сделать рамку для текстового поля и ввести в нее текст. Двойной щелчок по существующему текстовому полю позволяет отредактировать текст.
	Идентификация линий При щелчке по графику отображается ближайшая линия из базы данных длин волн.
	Установка или удаление опорных точек для коррекции фона Точки коррекции фона можно установить щелчком мыши. Щелчок по уже выбранному пикселю удаляет точку коррекции фона. Перетаскивание мышью позволяет выбрать области соседних пикселей. Уже выбранные области при этом снова удаляются. Щелчок по значку ... открывает контекстное меню: Отметить точки корр. фона Отмечает опорные точки в окне просмотра спектров вертикальными чертами Удал. все точки корр. фона Удаляет все выбранные опорные точки Список точек корр. фона Показывает список номеров пикселей выбранных опорных точек
Y-шкала	Масштабирование графика авто Автомасштабирование: спектр отображается с оптимальным расширением ординаты. von Ручное масштабирование: пределы оси ординат вводятся в соответствующие поля.

6.9.2.1 Коррекция фона и установка параметров обрабатываемых пикселей

Параметры коррекции фона и выбора обрабатываемых пикселей задаются в окне **Спектр / Обработка**.

Для коррекции фона можно заново выбрать опорные точки. Параллельно на графике будут показаны полученные в результате изменения кривой сигнала. Среднее значение пробы на выбор будет пересчитано синхронно или, при большом объеме данных, по команде. Найденные новые опорные точки можно прямо перенести в открытый метод. Таким образом определяется идеальная коррекция фона для нового метода.



Область BG параметры

Опция	Описание
Режим	Применяемый метод коррекции фона с опорн. без опорн. IBC IBC-m
Динамич. постр. BGC	Только с опорн. Автоматический поиск опорных точек
Диапаз. (пиксели)	Входящая в анализ спектральная область Анализ спектров может осуществляться максимум по сохраненному количеству пикселей. При ограничении анализируемого диапазона пиксели слева и справа обрабатываемого пикселя распределяются симметрично.
№ спектра	Количество спектров (измерений), по которым было сформировано отдельное значение пробы
Изм.пикс.	Отображение анализируемого пикселя Анализируемый пиксель – это пиксель 101 в середине приемной строки.
Пиксели обработки	Количество пикселей, которые берутся для анализа сигнала измерения По значениям измерения этих пикселей рассчитывается интеграл, который является результатом измерений.
Ослабление	При ослаблении сигнала для формирования сигнала учитываются только пиксели слева и справа от максимального пикового значения. Сигнал пикового пикселя и, в зависимости от степени ослабления, его смежного пикселя "вырезается". Чем выше выбранная степень ослабления сигнала, тем дальше отдалены от пикового пикселя обработанные площади сигнала. Ослабление сигнала позволяет расширить рабочий диапазон калибровки. Краевые пиксели, используемые для анализа, отображаются в столбце Пиксели обработки . Проанализированные области показаны цветом слева на графике.

Область Спектр. коррекции

Опция	Описание
Корр. постоянн. структуры	Не для коррекции фона без опорн. Автоматическая коррекция перманентных структур Перманентные структуры – это спектральные структуры, возникающие в эталонном спектре и в спектре пробы, например, полосы поглощения пламенных газов. Настройка активируется при неполной компенсации этих структур.
Модель	Выбор модели для спектральной коррекции

Область Абс. (Средн.) / Абс. (Площадь)

В этой области отображается среднее значение оптической плотности **Абс.(корр.)**. При применении техники графитовой печи в сочетании с коррекцией фона с **опорн.** дополнительно происходит вывод оптической плотности фона **Абс.(BG)**.

Загрузка / отправка параметров линий

Можно взять настройки спектрального анализа для каждой аналитической линии из метода или перенести изменения из окна **Спектр** в метод.

- ▶ В окне **Спектр** выбрать **Параметры линии**.
Откроется окно **Параметры линии / Обработка**.
- ▶ В таблице линий выбрать линию, параметры которой должны быть отправлены в метод или взяты из метода.
- ▶ Активировать действие:
копир. из метода/линия – загружает исходные параметры из метода
копир. в метод/линия – обновляет измененные параметры
- ▶ Нажать кнопку **ОК**.
✓ В зависимости от настройки измененные параметры будут отправлены в метод / будут загружены исходные параметры из метода.

См. также

📖 Описание используемых алгоритмов спектральной коррекции фона [▶ 189]

6.9.2.2 Создание модели для спектральных коррекций

В процедуре осуществляется попытка по возможности выбирать для анализа линии, которые не содержат помех 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.

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

1. Идентифицируйте возможные интерференции.
2. Создайте и сохраните корректирующие спектры.
3. Создайте модель коррекции.
4. Примените параметры аналитической линии с моделью коррекции к методу.

Шаг 1: идентификация интерференций

- ▶ Создать метод с аналитической линией. При этом выбрать в методе следующие параметры:

Метод /	Активированные параметры
Обработка	Режим КФ: с опорн. Постр.КФ: динамич.

Метод /	Активированные параметры
Вывод	Сохранить с результатами: активировать параметры Метод и Спектр

- ▶ Измерить аналит в матрице.
- ▶ В окне результатов двойным щелчком щелкнуть по строке пробы. Откроется окно **Единицн. Значения**.
- ▶ Выбрать **Показ. Спектр**. Откроется окно **Спектр**.
- ▶ В окне **Спектр / Идентифик. линии** определить возможные нарушения сигнала аналита в результате наложения линий матричных элементов или молекулярных абсорбций.

Примечание: возможные возмущающие элементы или молекулярные полосы см. в книге Welz et. al.: High-Resolution Continuum Source AAS.

Шаг 2: запись и сохранение корректирующих спектров

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.

- ▶ Добавить к последовательности измерение возмущающих компонентов матрицы, которые вызывают спектральное наложение. Измерить эти компоненты в одноэлементных растворах.
- ▶ Загрузить спектр компонента матрицы в окно **Спектр / Обработка** (см. шаг 1).
- ▶ Нажать кнопку **Корр. спектр**. Откроется окно базы данных для сохранения корректирующих спектров.
- ▶ Ввести имя спектра и завершить процедуру, нажав кнопку **Сохранить**.
- ▶ Таким же образом сохранить спектры других компонентов матрицы.

Шаг 3: создание модели коррекции

- ▶ Снова открыть отображение спектра пробы с аналитом в матрице (см. шаг 1).
- ▶ В окне **Спектр / Обработка** установить флажок в поле **Модель**.
- ▶ Нажать кнопку **Новая/измен. модель**. Откроется окно **Спектр. коррекции**.
- ▶ Щелкнув по кнопке **Доб.**, открыть окно выборки уже сохраненных корректирующих спектров.
- ▶ Выделить корректирующий спектр и выбрать **Загр.**. Спектр будет загружен в окно **Спектр. коррекции**.
- ▶ Аналогичным образом загрузить другие корректирующие спектры.
- ▶ Активировать параметр **Спектр, откорр. на макс.**, чтобы убедиться, что полученный спектр пробы не содержит наложений.
- ▶ Щелкнув по кнопке **Маск.** и удерживая нажатой кнопкой мыши можно выделить области, которые не будут включаться 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.
- ▶ Для сохранения модели коррекции нажать кнопку **Сохранить** и ввести имя модели. Завершить процесс, нажав кнопку **Сохранить**.
- ▶ Выйти из окна **Спектр. коррекции**, щелкнув по **Закрыть**, и вернуться в окно **Спектр / Обработка**.

Применение аналитической линии с моделью коррекции к методу

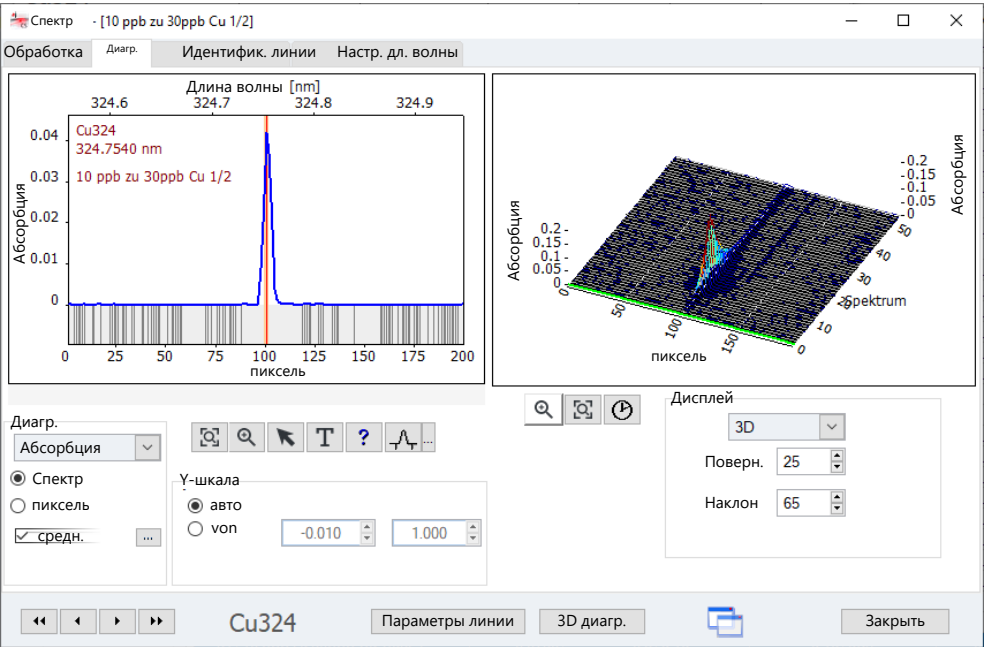
- Настройки из окна **Спектр / Обработка** можно применить к методу.
- ▶ В окне **Спектр / Обработка** выбрать **Параметры линии**.
Откроется окно **Параметры линии/Обработка** .
 - ▶ Там активировать параметр **копир. в метод/линия** и нажать **ОК** .
 - ✓ В окне **Метод / Обработка** рядом с кнопкой **Спектр. коррекции** отобразится модель.

См. также

- 📄 Окно метод / Обработка – спецификация спектральной области и коррекций фона [▶ 51]
- 📄 Вычитывание спектров (коррекция постоянных структур) [▶ 190]

6.9.2.3 Отображение спектров в режиме 3D

Трехмерное представление семейства спектральных характеристик отдельного значения пробы отображается в окне **Спектр / Диагр.** .

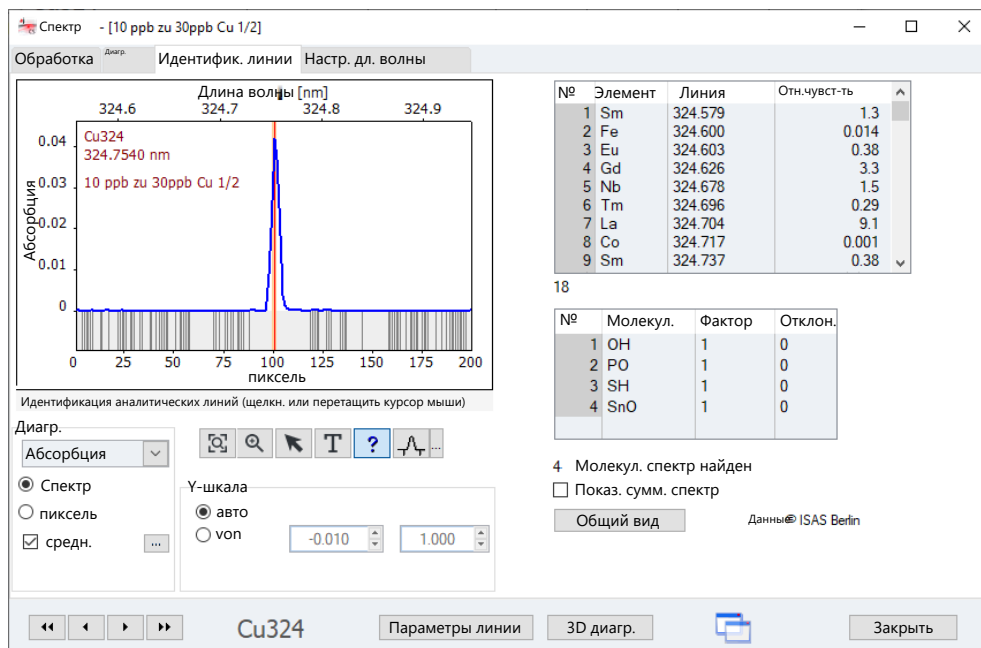


С правой стороны окна отображается трехмерное изображение семейства спектральных характеристик с переменными скосами. Спектр/пиксель, выбранный с левой стороны в графике, отображается на изображении светло-зеленым цветом.

Опция	Описание
	Увеличение масштаба графика
	Сброс графика
	Построение изображения семейства спектральных характеристик с разными скоростями
Дисплей	Выбор вида изображения

6.9.2.4 Идентификация линий

Пики спектров и молекулярные полосы в измеренных данных можно идентифицировать по базе данных спектров и линий. Эта идентификация осуществляется в окне **Спектр / Идентифик. линии**.



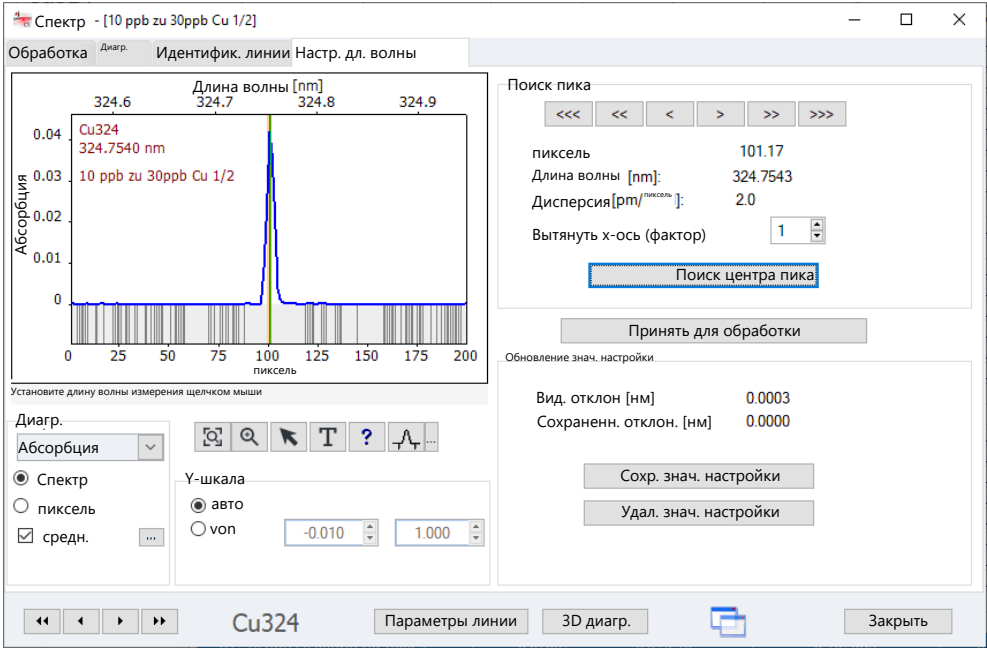
В верхнем списке содержатся записи базы данных линий, найденные в текущей спектральной области. При выборе строки курсор графика перемещается на длину волны линии.

Щелчок кнопкой мыши или перетаскивание мышью запускает поиск линий элемента в базе данных линий при выбранной позиции длины волны. Символ элемента отображается рядом с указателем мыши, соответствующая запись в списке выделяется.

В нижнем списке содержатся молекулярные полосы, найденные в отображенной спектральной области. При выборе строки в списке отображается соответствующий молекулярный спектр. В столбце таблицы **Фактор** можно ввести значение, на которое будет умножаться появившийся спектр. При этом спектр молекулярной полосы сжимается или растягивается. **Отклон.** смещает спектр на значение по у-оси. Установка флажка в поле **Показ. сумм. спектр** активирует дополнительный столбец в списке для просмотра суммы нескольких спектров. Так можно пояснить комплексные фоновые спектры.

6.9.2.5 Коррекция отклонений пика

contrAA был предварительно отъюстирован при отправке, т. е. часто используемые аналитические длины волн были проверены и отъюстированы на заводе изготовителе. Если Вы используете менее употребительные аналитические длины волн, правильность аналитической длины волны можно проверить в окне **Спектр / Настр. дл. волны**. Можно откорректировать отклонения пика в субпиксельном диапазоне, т. е. меньше дисперсии пикселей.



Полученные поправочные коэффициенты сохраняются в файле линий/длин волн и действительны для каждого последующего измерения. Однако введенные поправочные коэффициенты можно снова удалить из этого файла.

Поиск пика

Опция	Описание
Кнопки со стрелками	Смещение длины волны пика
пиксель	Выбранный в настоящий момент пиксель
Длина волны	Текущая аналитическая длина волны
Дисперсия	Спектральное разрешение на пикометре на один пиксель
Вытянуть x-ось (фактор)	Растягивание спектра
Поиск центра пика	Автоматический поиск пика и коррекция отклонения
Принять для обработки	При пересчете учитывается изменение массива длин волн при расчете позиции пика.

Массив длин волн

Опция	Описание
Вид. отклон [нм]	Новый полученный массив
Сохраненн. отклон. [нм]	Ранее сохраненный массив
Сохран. знач. настройки	Сохранение нового массива в файле линий/длин волн Значения, сохраненные в этом файле, применяются во всех последующих измерениях. Примечание: нажимать кнопку Сохран. знач. настройки только один раз!
Удал. знач. настройки	Удаление записи текущей аналитической длины волны в файле линий/длин волн

Проверка и повторное определение отклонения пика

- В окне **Спектрометр / Параметры** настроить аналитическую длину волны и запустить измерение пика.
Результаты измерений отображаются в окне **Спектр / Настр. дл. волны**.

- ▶ Путем ввода коэффициента в поле **Вытянуть x-ось (фактор)** растягивать спектр, пока кривая пика не будет хорошо видна.
- ▶ Когда пик будет отцентрирован на аналитический пиксель 101 (красная линия совпадает с пиком), пик будет обнаружен корректно. В этом случае дополнительных действий не требуется.
- ▶ Если пик расположен рядом с красной линией, выбрать **Поиск центра пика** . Или кнопками со стрелками переместить красную линию на пик.
- ▶ Сохранить новое отклонение пика, щелкнув по кнопке **Сохр. знач. настройки** . (Нажимать кнопку только один раз!)
- ▶ В окне **Спектрометр / Параметры** запустить измерение на аналитической длине волны.
- ▶ В области просмотра окна **Спектр / Настр. дл. волны** пик теперь должен быть отцентрирован на аналитический пиксель 101.
 - ✓ Новые данные сохранены в файле линий/длин волн и будут использоваться для последующих анализов.

См. также

- 📄 Экспорт файлов линий/длин волн [▶ 165]
- 📄 Измерение пика спектров на выбранной длине волны [▶ 120]

6.10 Анализ твердых проб с техникой графитовой печи

При анализе твердых проб они вводятся в графитовую трубку на графитовой платформе и атомизируются. Разложение пробы можно пропустить. По сравнению с установками анализа растворов для анализа твердых проб требуются дополнительные подготовительные работы или спецификации проб:

- Дозирование проб на платформу
- Пипетирование жидких компонентов в платформу
- Определение навески
- Очистка платформы посредством отжига
- При необходимости взвешивание платформы

Подготовку для определения навески и загрузки платформ для пробы можно провести вручную или автоматически с помощью SSA 600. Если используется SSA 600 с функцией жидкого дозирования, автосамплер также дозирует модификаторы и стандарты.

Если вышеназванные действия выполнены до начала последовательности, обработка последовательности выполняется автоматически без прерывания.

6.10.1 Функции вкладки Тверд.

Подготовка твердых проб к анализу осуществляется во вкладке **Тверд.** в главном окне. Вкладка содержит список всех выполняемых измерений. Измерения проб/стандартных проб, заданные в последовательности, разбиваются на отдельные измерения (статистические процедуры); определяется распределение проб по платформам.

Элементы таблицы

Таблица содержит следующие записи:

Опция	Описание
№	Номер отдельного измерения
Посл./Строка	Номер строки в последовательности
Глубина для поз.	Позиции платформы для проб на лотке для проб SSA 600 В режиме одного лотка: с 1 по 42, в режиме двух лотков: с 1 по 84 Примечание: Позиции назначаются программой! Платформы должны быть загружены пробами в соответствии с указанными позициями.
Тип	Тип пробы на этой платформе
Назв.	Весы для проб
Линия	Аналитическая линия
#	Номер статистического измерения
Wt.	Масса пробы в мг Если в столбце указана запись "-----", проба не взвешивается и содержит только жидкие составляющие (например, жидкий стандарт). Примечание: перед определением навески необходимо определить вес платформы.
Тара	Масса пустой платформы в мг Для проб, которые не должны взвешиваться, здесь также будет запись "-----".
Доз.	Проба дозируется на платформу, если есть запись "*".
Стд./Мод.	Если отмечено значком "*", на платформу дозируются жидкие компоненты (стандарты или модификаторы).
Обработка.	Только если в методе задана предварительная термическая обработка Если отмечено значком "*", выполняется предварительная термическая обработка платформы.

Следующие значения, если они известны, можно ввести непосредственно в таблицу проб:

- Масса навески, если подготовка пробы проводилась на внешних весах
- Тара
- Отметка платформ, дозировка для которых полностью закончена
- Отметка модификаторов, пипетирование которых выполнено
- Отметка предварительной термической обработки

Кнопки для подготовки пробы

Экранные кнопки	Описание
Тара	Определение веса пустой платформы для выделенных позиций лотка Для этого платформы переносятся на весы и после взвешивания возвращаются на свои позиции. Полученное значение веса вводится в столбец Тара .
Дозирование	Передача платформ выделенных позиций поочередно в позицию дозирования При этом появляется окно с данными о дозируемой пробе. В зависимости от установленных опций до и после этого можно выполнить дальнейшие подготовительные действия для отмеченных позиций. Если в таблице уже есть записи, соответствующая подготовка пропускается. Должна соблюдаться последовательность Тарирование – Дозирование – Взвешивание – (Дозирование) – (Взвешивание) – Пипетирование Мод./Станд.

Экранные кнопки	Описание
	с тарой Вес пустой платформы определяется перед дозированием. со взвешив. Дозированная проба взвешивается после дозирования. со вводом Мод./Станд. После взвешивания платформа передается для жидкого дозирования. Если в окне Метод / Транспорт пробы настроена опция Вес с подтверждением, шаги "Дозирование" и "Взвешивание" можно повторять произвольное количество раз. Если установлены все три опции, с помощью этой процедуры можно выполнить полную подготовку пробы. По окончании этой процедуры на лотке будут находиться загруженные платформы, полностью подготовленные для анализа. Если один из этих шагов не выполняется, соответствующий шаг запрашивается в процессе анализа.
Вес	Взвешивание платформы, на которую выполняется дозирование
Загр./Сохран.	Сохранение или перезагрузка данных взвешивания и дозирования для выбранных строк При изменениях последовательности или метода таблица проб во вкладке Тверд. создается заново. При этом введенные данные не сохраняются. Эта функция позволяет сохранить и восстановить данные.
Стд./Мод.	Поочередное перемещение платформ отмеченных позиций в позицию дозирования жидких компонентов анализа (жидкие стандарты, модификаторы) Появляется окно жидкого дозирования. На этом экране показаны жидкости и объемы, которые должны быть дозированы.
Подготов.	Отжиг или термическая обработка платформ для выделенных позиций Платформы помещаются в печь. После выполнения программы отжига и охлаждения печи платформы возвращаются на лоток. При предварительной термической подготовке сначала на платформы пипетируются соответствующие модификаторы. После этого выполняется программа печи до шага "Е/Р". После охлаждения печи платформы возвращаются на лоток. Если активирована опция Тара, платформы взвешиваются и их вес вносится в столбец Тара.

Повторное измерение пробы / коррекция записей взвешивания

Экранная кнопка	Описание
Строка(и) измер.	Повторное определение элемента в пробе или измерение последовательности отдельно по строкам в разработке метода При измерении последовательности проб по строкам началом всегда должно быть статистическое измерение 1 или измерение, следующее за последним измеренным статистическим измерением.
Подготовка ре-измер.	Создает из записей, отмеченных для повторного измерения в таблице результатов, текущую вкладку Тверд. для повторного статистического измерения. Затем эти платформы для проб можно взвешивать и соответствующим образом использовать для дозирования.
Переизмер. единичн. значен..	Запуск измерения проб, выбранных с помощью функции Тверд.

Экранная кнопка	Описание
Удал. вводы	В выбранных строках таблицы удаляются все записи выбранных позиций в столбцах, начиная от столбца Wt. и справа от него

6.10.2 Измерение твердых проб

Ручной анализ твердых проб

Если пробы вводятся в графитовую печь с помощью ручного автосамплера SSA 6 (z), массы порций следует определить с помощью отдельных весов. В этом случае значения масс вводятся вручную во вкладке **Тверд.**.

Автоматический анализ некритических по времени твердых проб

При работе с пробами, которые не являются критичными по времени, многие этапы подготовки можно объединить. Отработка некритичных по времени проб задается путем отключения опции **Последовательность выполнения для проб, чувствительных ко времени** в окне **метод / Транспорт пробы**.

При использовании SSA 600 с функцией автоматического дозирования жидкости дозирование модификаторов и стандартов можно выполнять во время отработки последовательности и подготовка вручную не требуется. На SSA 600 можно разместить максимально четыре стандарта и три модификатора. Если требуется больше стандартов или модификаторов, их следует пипетировать вручную. Во время термической предварительной подготовки модификаторы автоматически подаются на платформы с помощью модуля дозирования жидкости, а затем подготавливаются к анализу в графитовой печи.

Для автоматических анализов без вмешательства пользователя требуются платформы для пробы для каждого отдельного измерения:

Общее число платформ для проб = число анализируемых проб × число аналитических линий × число статистических измерений

Если число проб превышает число платформ, определенное в методе, после обработки платформы дозируются снова.

- ▶ Создать и активировать метод и последовательность.
- ▶ Перейти во вкладку **Тверд.** в главном окне.
В столбце **Поз.** отображается распределение проб на лотках для проб. Это распределение назначается программой не может быть изменено.
- ▶ Активировать процедуру измерения щелчком по кнопке  на панели инструментов.
- ▶ В соответствии с указаниями ПО подготовить платформы для проб. Разместить пробы и пипетировать жидкие компоненты.
Измерение начнется после того, как все пробы будут подготовлены или будет загружено заданное в методе количество платформ для проб.
- ▶ Если после первого цикла измерения еще остались пробы, выделить щелчком мыши соответствующие строки пробы в последовательности. Множественное выделение можно сделать, удерживая нажатой клавишу Shift или Ctrl.
- ▶ Продолжить измерение, нажав кнопку . Добавить результаты к уже имеющимся, для этого в окне **Старт Пос-ть** активировать параметр **Добавить к файлу/списку**.
- ▶ В соответствии с указаниями ПО снова подготовить платформы для проб. После этого измерение начнется автоматически.
 - ✓ Результаты измерений отобразятся во вкладках результатов главного окна.

Автоматический анализ твердых проб, некритичных по времени

При работе с пробами, которые легко испаряются или "растекаются" по платформе из-за высокой адгезии и увлажняют край и ручку платформы, после нанесения пробы необходима быстрая обработка платформы. Отработка критичных по времени проб задается путем активации опции **Последовательность выполнения для проб, чувствительных ко времени** в окне **метод / Транспорт пробы** .

- ▶ Создать и активировать метод и последовательность.
- ▶ Перейти во вкладку **Тверд.** в главном окне.
В столбце **Поз.** отображается распределение проб на лотках для проб. Это распределение назначается программой не может быть изменено.
- ▶ Активировать процедуру измерения щелчком по кнопке  на панели инструментов.
- ▶ Следовать указаниям по подготовке пробы на экране. Проба будет подготовлена и измерена. После этого запрос на подготовку следующей платформы будет отображаться до тех пор, пока не будут измерены все пробы.

При измерении проб, требующих быстрой обработки, необходимо постоянное присутствие пользователя.

См. также

-  Параметры метода для автосамплеров для анализа твердых проб [▶ 48]

6.10.3 Сохранение данных уже подготовленных проб

При изменении последовательности или метода выполняется повторная конфигурация таблицы твердых проб, и пробы заново распределяются по платформам. При этом имеющиеся данные взвешивания не сохраняются. Во избежание этого данные можно сохранить в буфере обмена. Для этой цели предусмотрены две ячейки памяти для связанных блоков.

- ▶ Отметьте уже подготовленные пробы.
Пробы должны находиться в связанном блоке.
- ▶ Во вкладке **Тверд.** выбрать **Загр./Сохр.** .
Откроется окно **Загр./Сохр. табл. SSA600** .
- ▶ Выбрать один из двух накопителей.
- ▶ Выбрать **Сохранить выделенн. вводы** и подтвердить следующее сообщение, нажав **ОК** .
- ▶ Выйти из окна **Загр./Сохр. табл. SSA600** , выбрав **Заккрыть** .
- ▶ После повторного создания таблицы твердых веществ в главном окне снова выбрать **Загр./Сохр.** .
- ▶ В окне **Загр./Сохр. табл. SSA600** выбрать накопитель.
- ▶ В поле списка ввести номер строки таблицы твердых проб, начиная с которой должен быть вставлен блок данных.
- ▶ Нажать кнопку **Загрузка начата из строки**.
 - ✓ Блок данных будет вставлен в таблицу твердых проб, начиная с заданной строки.

После этого пересортируйте платформы на лотке для проб в соответствии с таблицей твердых веществ.

6.10.4 Повторное измерение анализируемых твердых проб

При анализе твердых тел можно повторять как отдельные измерения, так и измерения для одного элемента в пробе.

Повтор отдельных измерений (статистических измерений)

При повторном измерении создается новая структура таблицы твердых проб во вкладке **Тверд.** . При этом существующие записи дозирования удаляются. При необходимости нужно заблаговременно сохранять данные уже подготовленных проб.

- ▶ В главном окне перейти во вкладку **Результаты** .
- ▶ Двойным щелчком по пробе с выбросом открыть окно **Единиичн. Значения** .
- ▶ Отметить выброс в таблице.
- ▶ Нажать кнопку **Отметить для ре-измер.**
- ▶ Заккрыть окно **Единиичн. Значения** .
- ▶ Таким же образом отметить выбросы всех других проб.
- ▶ Вернуться во вкладку **Тверд.** .
- ▶ Нажать кнопку **Подготовка ре-измер.**
Для отработки будет создана таблица твердых проб.
- ▶ Подготовить пробы в соответствии с расположением платформ для анализа.
- ▶ Запустить измерение, выбрав **Переизмер. единиичн. значен..** .
 - ✓ Во вкладку **Результаты** в конец таблицы добавляются результаты повторного измерения проб, основанные на повторных измерениях выбросов.

Повтор измерения элемента в пробе

- ▶ В таблице твердых проб отметить все отдельные измерения элемента в пробе.
- ▶ Нажать кнопку **Строка(и) измер.**
- ▶ В окне **Старт Послед-ть** задать новое имя файла или активировать опцию **Добавить к файлу/списку** .
- ▶ Запустить измерение кнопкой **ОК** .

Построчное измерение по таблице твердых проб (разработка метода)

В разработке метода выполнение таблицы твердых проб можно выполнить построчно.

- ▶ В таблице твердых проб отметить отдельные измерения элемента в пробе.
- ▶ Нажать кнопку **Строка(и) измер.**
- ▶ В окне **Старт Послед-ть** ввести новое имя файла или активировать опцию **Добавить к файлу/списку** .
- ▶ Запустить измерение кнопкой **ОК** .

Примечание: измерение элемента в пробе необходимо начать с Run #1 или с цикла, который следует за последним измеренным статистическим циклом.

См. также

- 📖 Сохранение данных уже подготовленных проб [▶ 107]

6.11 Промывка системы

Этапы промывки для различных систем запускаются через пункт меню **Процед. | Промывка**. Кроме этого, команды промывки в соответствующих окнах комплектующих/оборудования, как например автосамплер и гидридная система.

Пламенная атомизация

Автосамплер погружается в позицию для промывки и промывает канюлю. Если в качестве комплектующих подключен инжекционный переключатель, он открывается. Тем самым обеспечивается также промывка пути подачи пробы. Промывочный насос непрерывно подает свежий промывочный раствор.

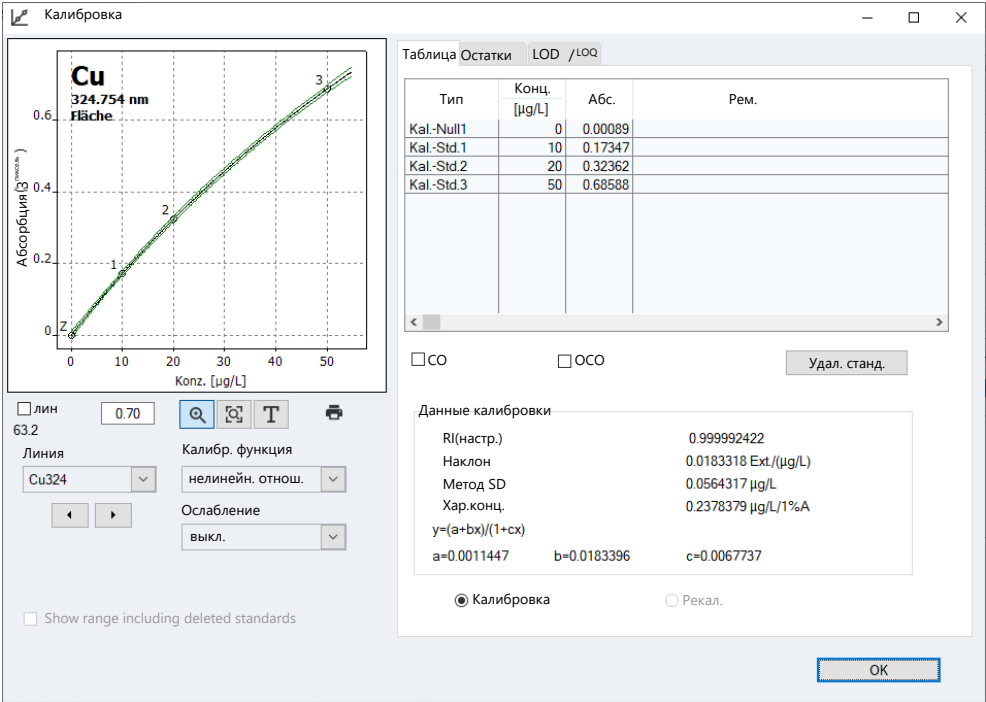
Режим гидридной техники/
HydrEA

Промывка гидридной системы кислотой (или редуцирующим агентом, если необходимо). Параметры промывки гидридной системы задаются в окне **Метод | Гидрид**.

7 Калибровка

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

Чтобы открыть окно **Калибровка**, щелкните по значку  или выберите пункт меню **Разраб-ка метода | Калибровка**.



Окно **Калибровка** содержит следующую информацию:

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

Поля выбора в окне Калибровка

Опция	Описание
Линия	Выбор аналитической линии, калибровка которой отображается
Калибр. функция	Используемая функция калибровки Функция калибровки настраивается в окне Метод / Калиб. отдельно для каждой элементной линии. Функцию можно снова выбрать в поле списка и соответственно пересчитать результаты.
Ослабление	Ослабление сигнала позволяет расширить диапазон калибровки. Ослабление сигнала задается в окне Метод / Обработка с возможностью изменения.
Show range including deleted standards	При удалении стандартов вручную график калибровочной кривой адаптируется под новый диапазон. При активированном параметре отображается весь откалиброванный диапазон.

См. также

- ОкноМетод / Калибровка - установка параметров калибровки [► 53]

📄 Окно метод / Обработка – спецификация спектральной области и коррекций фона [► 51]

7.1 Отображение 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». Статистическую достоверность можно выбрать в окне **метод / Статистика**. Выбор отображения прогноза или доверительной области осуществляется в окне **Опции / Калибровка**.

Увеличение калибровочной кривой

Щелчок по значку  при нажатой клавише мыши позволяет увеличить фрагмент калибровочной кривой. Щелчок по кнопке  возвращается калибровочную кривую к исходным размерам.

Вставка комментария

В график можно добавить текстовое поле для ввода комментария.

- Щелкнуть по букве **T** и при нажатой клавише мыши сделать на графике рамку текстового поля.
- Ввести текст в текстовое поле и нажать для подтверждения кнопку **ОК**.
 - ✓ Текст отобразится на графике.

Двойной щелчок по существующему текстовому полю позволяет отредактировать текст.

Печать калибровочной кривой

Для печати калибровочной кривой и данных калибровки щелкнуть по значку .

См. также

📄 Окно Метод / Статистика – спецификация статистических параметров [► 59]

📄 Параметры калибровки и коррекции бланка [► 176]

7.2 Отображение результатов калибровки

Результаты калибровки отображаются с правой стороны окна **Калибровка** в трех вкладках.

Вывод значений измерения калибровочных стандартов – вкладка Таблица

Во вкладке **Таблица** окна **Калибровка** выводятся пары значений стандартов (введенная концентрация / измеренное значение).

Если в методе задана опция статистической оценки, установка флажка в соответствующие поля позволяет вывести на экран отображение стандартного отклонения (**CO**), относительного стандартного отклонения (**OCO**), диапазона (**R**) и относительного диапазона (**R%**) .

Для исключения из расчета отдельных калибровочных стандартов клавишей мыши выделите в таблице стандарт и нажмите кнопку **Удал. станд..** В методах с несколькими линиями на экран выводится контрольный вопрос, следует ли удалить/ повторно активировать стандарт для всех линий или только для текущей линии.

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

Данные калибровки представлены в той мере, в какой возможен их достоверный расчет.

Параметр	Описание
RI(настр.)	Коэффициент определения
Наклон	Наклон калибровочной кривой
Метод SD	Стандартное отклонение метода
Хар.конц. / Хар.масса	Характеристическая концентрация или масса (концентрация или масса, необходимая для абсорбции 1 % световой энергии, присутствующей в атомизаторе, - соответствует оптической плотности приблизительно 0,0044)

Вкладка Остатки

На графике во вкладке **Остатки** представлены отклонения калибровочных точек от расчетной калибровочной кривой, а также пределы прогнозируемого диапазона.

Пределы детектирования и количественного определения для текущей калибровки – вкладка LOD / LOQ

Пределы детектирования и пределы количественного определения для ААС можно определить на основе текущих результатов калибровки. Значения для холостого метода и метода калибровочной кривой отображаются в этой области только в том случае, если калибровка ААС уже выполнена.

Параметр	Описание
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 метод значений бланка Измеренное стандартное отклонение бланка (проба IDL)
Вычисл.	Начало расчета пределов детектирования и количественного определения, например, после изменения калибровочной кривой

Метод калибровочной кривой

Для вычисления пределов детектирования и количественного определения по методу калибровочной кривой требуется линейная калибровочная кривая. Калибровка должна быть выполнена 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.

Стандартные инструкции по вычислению методом бланка:

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

Предел детектирования: $\text{Предел детектирования} = 3 * SD / (\text{наклон калибровочной кривой})$

Предел количественного определения: $\text{Предел количественного определения} = 9 * SD / (\text{наклон калибровочной кривой})$

Число повторов измерений и коэффициенты для расчета предела детектирования/предела количественного определения можно редактировать в окне **Опции / Калибровка**.

См. также

- Параметры измерений и действий в последовательности [► 71]
- Параметры калибровки и коррекции бланка [► 176]

7.3 Модификация калибровочной кривой

Имеющуюся калибровочную кривую можно изменить в окне Калибровка следующим образом:

- изменение действующей калибровочной функции
- отключение или активация стандартов

Для изменения калибровочной функции выберите новую модель из списка Калибровочная функция.

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.

Программа повторно вычислит калибровочную кривую и отобразит ее в измененном виде. Измененные параметры калибровки будут применены к результатам при запуске пересчета щелчком по кнопке  на панели инструментов.

См. также

- Пересчет результатов анализа [► 83]

7.4 Замена калибровочных стандартов путем повторного измерения

Вы можете заменить выбросы в калибровке, заново измерив строки последовательности, заменив нужную строку и пересчитав результаты:

- ▶ Подготовить новый стандарт для измерения. При использовании автосамплера установить стандарт на позицию, указанную в последовательности.
- ▶ Запустить соответствующий стандарт в последовательности и измерение строки последовательности, нажав кнопку  .
Значения заново измеренного стандарта отобразятся в конце таблицы проб.
- ▶ Двойным щелчком мыши щелкнуть по подлежащему замене стандарту.
Откроется окно **Единиичн. Значения** .
- ▶ Активировать опцию **Переместить с номером ввода** и ввести в текстовое поле номер строки повторно измеряемого значения.
- ▶ Закрыть окно **Единиичн. Значения**, щелкнув по кнопке **ОК**.
- ▶ Запустить пересчет щелчком по кнопке  и ввести строки, для которых необходимо выполнить пересчет.
 - ✓ При расчете калибровки соответствующий стандарт заменяется новым значением. Новая калибровка применяется для всех вычислений после повторного расчета калибровки.

8 Контроль качества (КК)

Функция контроля качества служит для отслеживания результатов измерения по методу в течение длительного периода времени. Для этой цели выбираются специальные пробы КК разных типов и включаются в серию измерений. При анализе проб КК результаты сравниваются с результатами предыдущих проб КК.

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 в пределах серии измерения.

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

Чтобы открыть окно **КК**, щелкните по значку  или выберите пункт меню **Раз-
раб-ка метода | КК**.

8.1 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.

Опция	Описание
Тип	Выбор типа пробы КК для отображения
Линия	Выбор аналитической линии для отображения
Показанные значения	Количество отображаемых значений и дата первого и последнего отображаемого значения.
Вводы	Общее количество вводов на текущей вкладке КК и дата первого и последнего значения.
x(макс.)	Это количество записей отображается в графике.
	Печать графиков контроля качества, включая буквенно-цифровые данные и измеренные значения

Область графика

Цвет	Описание
Желтое поле	Период подготовки
Светло-серая горизонтальная линия	Среднее значение, рассчитанное за период подготовки
Красные горизонтальные линии	Верхний и нижний контрольный предел (K), рассчитанный за период подготовки (3 Sigma).
Зеленые горизонтальные линии	Рассчитанные пределы предупреждений (W; 2 Sigma)
Черные маленькие кружки	Точки 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)
Дата/ Время	Дата и время измерения
Оператор	Пользователь, авторизованный в системе на момент измерения
Версия	Версия используемого метода
Удалить ввод / Активир. ввод	Выделение значения измерения как удаленного или его повторная активация.
Добавить комментарий	Ввод комментария для точки измерения, например, причины удаления.

8.2 Параметры вкладок КК

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

Тип вкладки

Для различных типов проб КК можно выбрать следующие оценки:

Тип пробы КК	Вид оценки КК
КК проба	Средн. карта
КК станд.	Средн. карта (норм.) Восстан.
КК тренд	Тренд
КК матрица	Диапазоны Точности
КК холост.	Выбор не предусмотрен. Отображается оптическая плотность бланка.

Для типа вкладки **Карты КК** (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 **Целевое значение карты** целевые величины и пределы исключения выставляются из специфических ожидаемых значений окна **Метод / ККС** и пределов проб КК.

Настройка графика

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	Точки графика соединены полигональной линией.

8.3 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	Выбор значений, сохраненных во вкладках КК Все значения Ввод каждого выполненного контроля качества. 1 знач./день Ввод только последнего контроля качества за день. 2 знач./день Ввод только первого и последнего контроля качества за день. Определение "дня": "День" соответствует одному дню по часам ПК. В течение дня любые предшествующие вводы во вкладке КК перезаписываются новыми значениями КК, а с началом нового дня создается новая запись.
Номер периода подг.	Только Контрольная карта (вкладка с правилами) Период подготовки – это количество записей во вкладке КК, которые используются для вычисления пределов контроля (C) 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.
Фактор	Только Целевое значение карты Пределы исключения вычисляются из пределов, установленных для проб КК, умноженных на коэффициент (по умолчанию 1).

Обновление карт

Если отображаемая вкладка (почти) заполнена, т. е. достигнуто максимальное количество записей, ее можно обновить. Есть разные возможности обновить период подготовки для вкладок КК.

Опция	Описание
Принять период подгот., удал. остаток	Применение периода подготовки и образование нового периода подготовки для новой вкладки.
Посл. значения -> нов. период подг-ки	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. Новые значения измерения заполняют сначала период подготовки.
Процесс	Обновление карт в соответствии с выбранными опциями

9 Управление и мониторинг прибора и аксессуаров

9.1 Спектрометр

В окне **Спектрометр** можно проверить оптические функции устройств и корректно отъюстировать спектрометр (коррекция отклонений). Можно устанавливать или выводить следующие параметры:

- Данные устройства
- Включение и выключение ксеноновой лампы
- Тестирование коррекций длин волн
- Отображение параметров считывания CCD-строки
- Запуск измерения на тестовой длине волны
- Запуск непрерывного измерения для оптимизации устройств
- Коррекция отклонений пика

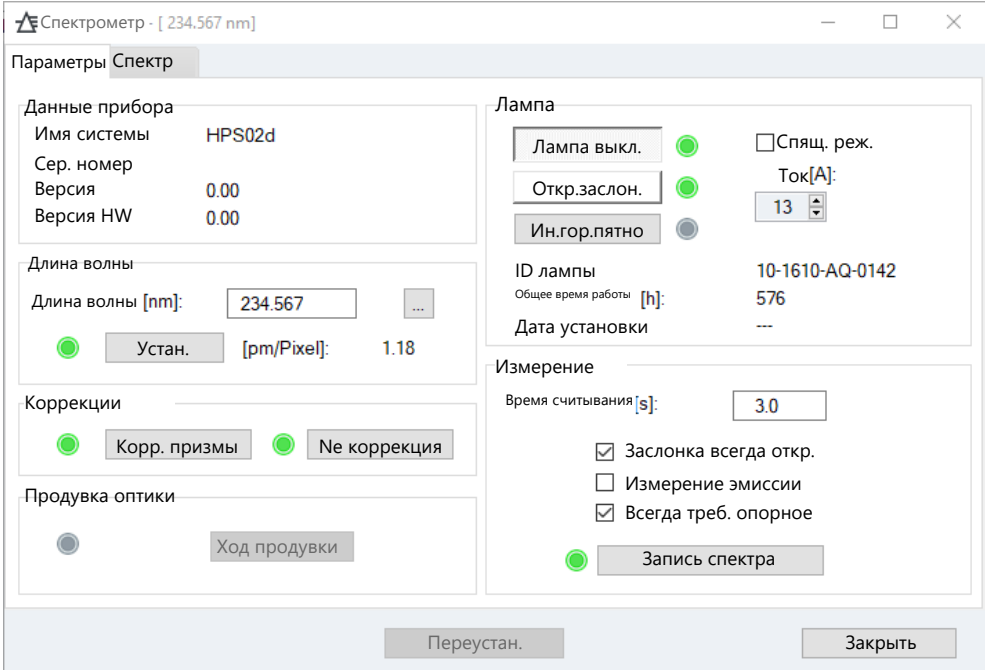
Чтобы открыть окно **Спектрометр**, щелкните по значку  или выберите пункт меню **Разраб. метода | Спектрометр**.

9.1.1 Функциональный тест устройства: contrAA

В окне **Спектрометр / Параметры** Вы можете проконтролировать основные функции устройства и запустить тестовое измерение на выбранной длине волны.

Во всех случаях: когда contrAA включен и инициализирован, все контрольные лампы должны быть активны и гореть зеленым цветом. Щелчок по соответствующей кнопке тестирует соответствующую функцию устройства. При успешном прохождении теста контрольная лампа горит зеленым.

Чтобы открыть окно **Спектрометр / Параметры**, щелкните по значку .



The screenshot shows the 'Спектрометр - [234.567 nm]' window with the 'Параметры' tab selected. The window is divided into several sections:

- Данные прибора:**
 - Имя системы: HPS02d
 - Сер. номер: [empty]
 - Версия: 0.00
 - Версия HW: 0.00
- Длина волны:**
 - Длина волны [nm]: 234.567
 - Устан. [pm/Pixel]: 1.18
- Коррекции:**
 - Корр. призмы: [checked]
 - Не коррекция: [checked]
- Продувка оптики:**
 - Ход продувки: [button]
- Лампа:**
 - Лампа выкл.: [checked]
 - Откр.заслон.: [checked]
 - Ин.гор.платно: [unchecked]
 - Спящ. реж.: [unchecked]
 - Ток[A]: 13
 - ID лампы: 10-1610-AQ-0142
 - Общее время работы [h]: 576
 - Дата установки: ---
- Измерение:**
 - Время считывания[s]: 3.0
 - Заслонка всегда откр.: [checked]
 - Измерение эмиссии: [unchecked]
 - Всегда треб. опорное: [checked]
 - Запись спектра: [checked]

At the bottom, there are buttons for 'Переустан.' and 'Заккрыть'.

Данные прибора Отображение подключенного AAS и версии установленной программы.

Длина волны / Коррекции

Опция/кнопка	Описание
Длина волны	Отображение выбранной длины волны Щелчок по значку  открывает окно Выделить: Элемент/Линия для выбора длины волны. По щелчку по кнопке Устан. монохроматор переходит на выбранную длину волны.
Корр. призмы	Проверка и при необходимости автоматическая юстировка позиции призмы
Не коррекция	Проверка коррекции длин волн с неоновыми линиями

Продувка оптики

Только contrAA 800

Щелчок по кнопке **Ход продувки** позволяет проверить статус продувки газом (продувка воздухом или аргонном). Для получения достоверных результатов измерения продувка должна быть завершена (светодиод состояния зеленого цвета). Эта кнопка активна только при активированной продувке оптики в окне **Опции / Продувка оптики**.

Лампа

Опция	Описание
Лампа выкл. / Лампа вкл.	Выключение и включение ксеноновой лампы
Откр.заслон. / Закр.заслон.	Открывание и закрывание заслонки
Ин.гор.пятно	Повторная инициализация системы для отслеживания светового пятна
Спящ. реж.	При активации ток лампы переключается в спящий режим. Это продлевает срок службы лампы.
Ток	Изменение тока лампы Изменять этот параметр можно только по согласованию с сервисной службой. Предусмотренный ток лампы является оптимальным для воспламеняемости и срока службы!
ID лампы	Идентификационный код лампы
Общее время работы	По превышению гарантированной продолжительности работы 1000 ч отображается соответствующее указание.
Дата установки	Дата последней замены лампы Если лампа не была заменена, дата не отображается.

Примечание: Информация об установленной лампе отображается только в том случае, если в окне **Опции / Вид** активирован параметр **Показ. остат. файл лампы (Спектрометр)**.

Измерение

Опция	Описание
Время считывания	Общее время измерения спектров
Заслонка всегда откр.	При активированной опции измерения в окне Спектрометр всегда осуществляются при открытой заслонке. Если системе нужно проверить с закрытой заслонкой, например, при измерении темнового тока, эту опцию нужно отключить. Примечание: настройка заслонки в этом окне не влияет на измерения за пределами этого окна. Во всех других случаях заслонка контролируется автоматически.

Опция	Описание
Измерение эмиссии	При активированной опции измеряется спектр интенсивности. Если эта функция отключена, отображается спектр экстинкции.
Всегда треб. опорное	Выполнять эталонное измерение перед каждым измерением спектра.
Запись спектра	Запуск измерения спектра с установленными параметрами

См. также

- 📖 Параметры продувки оптики [▶ 175]
- 📖 Возможности отображения [▶ 170]
- 📖 Вставка аналитических линий в таблицу линий [▶ 28]

9.1.2 Измерение пика спектров на выбранной длине волны

Запустить тестовое измерение на выбранной длине волны можно в окне **Спектрометр / Параметры**.

- ▶ Подготовить эталонный раствор и тестовый раствор с аналитом.
Инструкции по тестовому раствору см. в справочнике по элементам.
- ▶ Открыть окно **Спектрометр / Параметры**, щелкнув по значку .
- ▶ В **Длина волны** щелкнуть по значку  и в окне **Выделить: Элемент/Линия** выбрать линию.
Или ввести значение длины волны прямо в текстовое поле
- ▶ Щелчком по кнопке **Устан.** настроить длину волны.
После успешного завершения настройки рядом с настройкой появляется отметка зеленого цвета.
- ▶ В окне **Время считывания** выставить общее время измерения.
- ▶ Активировать параметр **Всегда треб. опорное**.
- ▶ Выбрать **Запись спектра** и следовать указаниям для эталонного измерения и последующего измерения пробы.
 - ✓ Результаты измерений отображаются в окне **Спектр**.

В окне **Спектр / Настр. дл. волны** можно откорректировать отклонение пика.

См. также

- 📖 Функциональный тест устройства: contrAA [▶ 118]
- 📖 Коррекция отклонений пика [▶ 101]

9.1.3 Непрерывное измерение

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

Откройте окно **Спектрометр / Спектр**, щелкнув по значку .

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

Опция	Описание
Дисплей	Опции для представления спектра

Опция	Описание
	Энергия Отображение энергетического спектра, единица измерения: импульсов в сек. Для получения по возможности результатов измерений с малым уровнем шумов время интегрирования для CCD-строки выбирается таким образом, чтобы максимальная энергия составляла ок. 30000 импульсов в сек. Абсорбция Отображение спектра экстинкции Инт-ность Отображение энергии на единицу времени, единица измерения: импульсов в сек. (мега-импульсов в сек.) По интенсивности различные пики можно сравнивать по их абсорбции независимо от времени интегрирования.
Изм.пикс.	Значения этого пикселя отображаются по порядку в соответствии с выбранным представлением. В полях Максимум , Минимум , Средн. и СО отображаются значения непрерывного измерения.
Высота горелки	Для пламенной атомизации Настройка высоты горелки
Отмет. изм пиксели	Выделение анализируемого пикселя в графике вертикальной красной линией
отметить режим	Выделение точкой значений измерения для каждого пикселя в графике
Масштабирование графика	Непосредственный ввод в текстовые поля осей значений начальной и конечной точки оси ординат и абсцисс или, после активации режима масштабирования, выбор отображаемой области нажатой левой клавишей мыши Отмена режима масштабирования – активация опции авто
[Опорн. спектр]	Запись эталонного спектра
[Старт]	Запуск непрерывного измерения

Запуск непрерывного измерения

Измерение осуществляется вручную без автосамплера. Подсоедините трубку для всасывания пробы к игле распылителя.

- ▶ Подготовить эталонный раствор и тестовый раствор с аналитом.
Инструкции по тестовому раствору см. в справочнике по элементам.
- ▶ Открыть окно **Спектрометр** щелчком по значку .
- ▶ Во вкладке **Параметры** выставить длину волны.
- ▶ Перейти во вкладку **Спектр**.
- ▶ Нажав кнопку **[Опорн. спектр]**, запустить эталонное измерение с эталонным раствором.
Если эталонный спектр уже есть, индикатор горит зеленым цветом.
- ▶ Погрузить трубку для всасывания пробы в тестовый раствор. Нажать кнопку **[Старт]**.
 - ✓ Измерение осуществляется непрерывно о нажатия кнопки **[Старт]**.

9.2 Пламя

В окне **Пламя** можно проверить отдельные функции системы горелка-смесительная камера-распылитель и индивидуально настроить параметры анализа отдельных элементов.

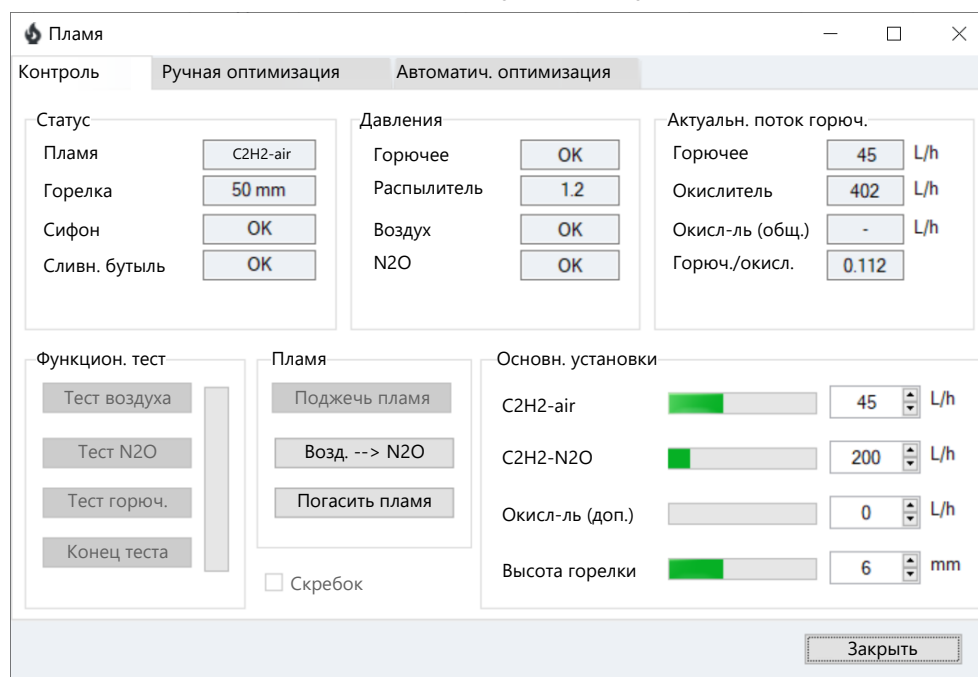
Откройте окно **Пламя**, щелкнув по значку , или выбрав пункт меню **Разраб. метода | Пламя**.

9.2.1 Проверка функции пламени

В окне **Пламя / Контроль** Вы найдете следующие функции:

- Розжиг/ гашение пламени
- Переключение окислитель - воздух или закись азота
- Индикация давлений газа/ газовых потоков
- Активация скребка
- Настройка газовых потоков

Откройте окно **Пламя / Контроль**, щелкнув по значку .



Статус

Опция	Описание
Пламя	выкл.: Пламя не горит. C2H2-Возд.: Горит пламя ацетилен-воздух. C2H2-N2O: Горит пламя ацетилен-закись азота.
Горелка	Отображение установленной горелки. Ошибка: не установлена горелка или датчик не "видит" горелку.
Сифон	Контролируется уровень наполнения сифона смесительной камеры, через которую выводится нераспыленная жидкость. Сифон всегда должен быть достаточно заполнен жидкостью для предотвращения обратного распространения пламени, в частности, при использовании пламени на закиси азота.

Опция	Описание
	ОК: сифон заполнен жидкостью до перелива. Ошибка: недостаточный уровень наполнения сифона. До перелива заполните сифон деионизованной водой. Снимите горелку и осторожно заливайте воду в гусак, пока она не станет вытекать через трубку для отходов.

Давления

Опция	Описание
Горючее	Состояние давления горючего газа на входе устройства
Распылитель	Рабочее давление на распылителе проб в бар
Воздух	Состояние входного давления воздуха Состояние отображается только в том случае, если подача воздуха открыта.
N2O	Состояние входного давления закиси азота Состояние отображается только в том случае, если подача закиси азота открыта.

Актуальн. поток горюч.

Опция	Описание
Горючее	Поток горючего газа (C_2H_2)
Окислитель	Поток окислителя через распылитель
Окисл-ль (общ.)	Общий поток окислителя (окислитель + дополнительный окислитель) Значение отображается только в том случае, если активирован дополнительный окислитель.
Горюч./окисл.	Соотношение потоков горючий газ/окислитель

Функцион. тест

Тестовые функции доступны только в том случае, если пламя погашено. Доступность тестовых функций зависит от контекста.

Экранная кнопка	Описание
Тест воздуха	Открывает электромагнитный клапан в тракте воздуха. Требование: присутствует входное давление воздуха и горючего газа. Давление распылителя, поток окислителя и общий окислитель отображаются, если в окне Метод / Пламя активирован дополнительный окислитель.
Тест N2O	Только пламя ацетилен/закись азота с горелкой 50 мм Открывает электромагнитный клапан в тракте закиси азота Требование: Присутствует входное давление воздуха и горючего газа. Отображаются давление распылителя, поток окислителя и общий окислитель (если активирован дополнительный окислитель).
Тест горюч.	Настройка заданного расхода газа (клапан пропорционального регулирования) Отображаются поток горючего газа для пламени ацетилен/воздух (для Тест воздуха) или пламени ацетилен/закись азота (для Тест N2O). Прежде, чем выбрать Тест горюч. , необходимо активировать Тест воздуха или Тест N2O .

Экранная кнопка	Описание
Конец теста	Завершение функционального теста

Пламя / Скребок

Опция	Описание
Поджечь пламя	Поджиг пламени ацетилен-воздух - Выводится поджигающий элемент, накаляется спираль. - Номинальный расход ацетилена (пропорциональный клапан) регулируется при достижении заданных значений давления распылителя и расхода окислителя. - Если пламя не зажигается в течение 10 сек., процесс прерывается. - Если пламя горит, кнопка Погасить пламя активна.
Возд. --> N2O	Переключение с пламени ацетилен-воздух на пламя ацетилен-закись азота. - Клапан окислителя (3/2-ходовой магнитный клапан) переключается с воздуха на закись азота - Настраивается поток горючего газа для пламени ацетилен-закись азота (пропорциональный клапан). - Вид кнопки изменяется на N2O --> Возд.
N2O --> Возд.	Переключение с пламени ацетилен-закись азота на пламя ацетилен-воздух - Настраивается поток горючего газа для пламени ацетилен-воздух (пропорциональный клапан). - Вид кнопки изменяется на Возд. --> N2O.
Погасить пламя	Гашение пламени - Если горит пламя ацетилен-закись азота, система переключается на пламя ацетилен-воздух и выжидает несколько секунд. - Поток горючего газа блокируется (клапан пропорционального регулирования). - Через нескольких секунд ожидания (для удаления горючего газа из смесительной камеры и горелки) подача воздуха блокируется (магнитный клапан)
Скребок	Только горелка 50 мм с установленным скребком и пламенем ацетилен-закись азота Активирует скребок для очистки горелки

Установки

В группе **Установки** можно редактировать газовые потоки.

Опция	Описание
C2H2-air	Пламя ацетилен/воздух (поток горючего газа = 40 – 120 нл/ч)
C2H2-N2O	Пламя ацетилен/закись азота (поток горючего газа = 120 – 315 нл/ч)
Окисл-ль (доп.)	Установка расхода дополнительного окислителя
Высота горелки	Высота горелки относительно оптической оси

Примечание: установленная горелка автоматически распознается сенсором горелки. Переключение между C2H2-Возд. и C2H2-N2O возможно только при горящем пламени и установленной горелке 50 мм.

См. также

📄 Окно метод / Пламя – спецификация параметров пламени [► 31]

9.2.2 Оптимизация пламени

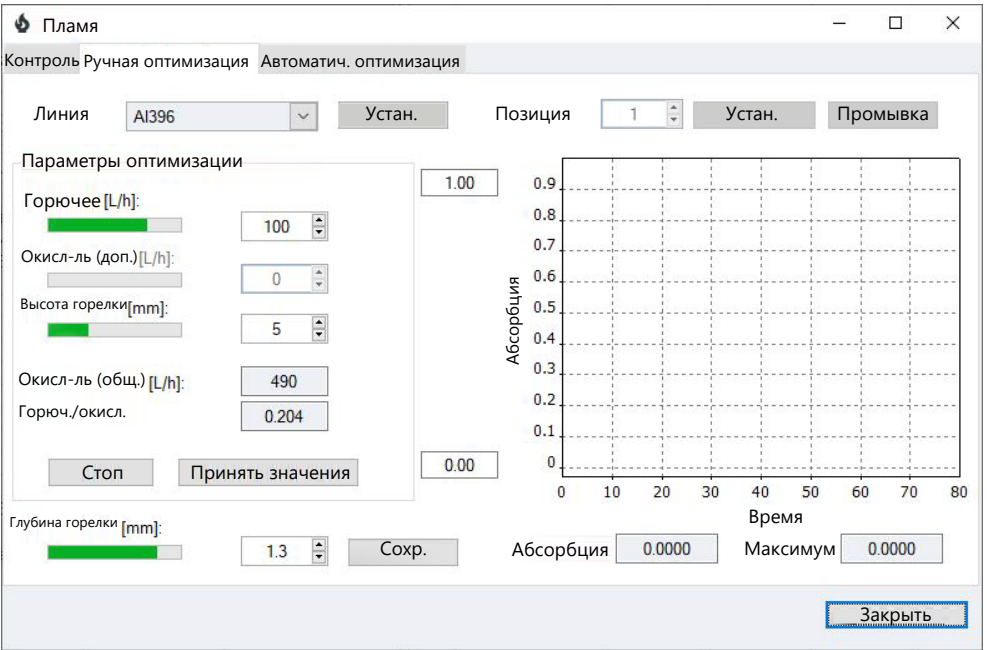
Оптимальная высота горелки, а также состав газа пламени в значительном мере зависят от аналита. Поэтому требуется единовременная точная оптимизация заданных в справочнике по элементам значений для каждого элемента. Оптимизацию можно выполнить вручную, изменяя параметры и наблюдая за кривой сигнала. Используйте также ручную оптимизацию, если активировали в методе дополнительный окислитель. Если дополнительный окислитель не используется, параметры пламени можно оптимизировать автоматически.

9.2.2.1 Оптимизация пламени вручную

Ручная оптимизация пламени для аналитической линии текущего метода осуществляется в окне **Пламя / Ручная оптимизация** . Проведение оптимизации вручную требуется в следующих случаях:

- Использование дополнительного окислителя
- Оптимизация системы горелка-смесительная камера-распылитель после очистки

Чтобы открыть окно **Пламя / Ручная оптимизация**, щелкните по значку .



Опция	Описание
Линия	Выбор аналитической линии метода
Устан.	Настройка выбранной аналитической линии
Позиция	Позиция тестовой пробы на автосамплере
Устан.	Погружение канюли автосамплера в тестовую пробу
Промывка	Забор промывочной жидкости из промывочной емкости
Горючее	Настройка потока горючего газа
Высота горелки	Регулировка высоты горелки относительно оптической оси траектории луча лампы
Окисл-ль (доп.)	Настройка потока дополнительного окислителя Воздух: 75 / 150 / 225 нл/ч N ₂ O: 60 / 120 / 180 нл/ч

Опция	Описание
Окисл-ль (общ.)	Индикация общего потока окислителя
Горюч./окисл.	Индикация соотношения потоков горючий газ/окислитель.
Глубина горелки	Только contrAA 800 D Настройка глубины горелки
Старт	Запуск измерения и непрерывная регистрация сигнала
Стоп	Завершение измерения
Принять значения	Применение полученных параметров пламени для аналитической линии к методу
График	Отображение кривой сигнала
Абсорбция	Текущая оптическая плотность
Максимум	Максимальная оптическая плотность во время текущего измерения

Ручная оптимизация с настройкой дополнительного окислителя

- ▶ Подготовить тестовый раствор.
Инструкции по подходящему тестовому раствору см. в справочнике по элементам. Указанная в нем тестовая концентрация дает оптическую плотность ок. 0,1. Используйте для оптимизации двух- трехкратную концентрацию.
 - ▶ В списке **Линия** выбрать аналитическую линию.
 - ▶ Щелчком по кнопке **Устан.** перевести монохроматор на длину волны линии.
 - ▶ Погрузить трубку для всасывания пробы распылителя в тестовый раствор.
 - ▶ При использовании автосамплера установить пробу на автосамплер и в поле **Позиция** ввести место. После этого нажать кнопку **Устан.** .
Канюля погружается в тестовый раствор и производится всасывание пробы.
 - ▶ Запустить измерение кнопкой **Старт** .
 - ▶ Выполнить шаги по оптимизации:
Примечание: при изменении параметров интенсивность сигнала может реагировать с небольшой задержкой.
 - Кнопками со стрелками изменить настройку горючего газа и наблюдать за кривой сигнала на графике и в поле **Абсорбция** . Установить максимальную оптическую плотность.
 - Аналогичным образом настроить высоту горелки, чтобы оптическая плотность была максимальной.
 - При использовании дополнительного окислителя настроить параметр **Окисл-ль (доп.)** таким образом, чтобы и здесь получить сигнал максимального уровня.
 - Только contrAA 800 D: дополнительно в поле Глубина горелки можно оптимизировать настройку глубины горелки.
 - ▶ Повторять шаги по оптимизации до тех пор, пока сигнал не перестанет существенно расти.
 - ▶ Завершить измерение, нажав кнопку **Стоп** .
 - ▶ Нажать кнопку **Принять значения**.
 - ✓ Параметры для выбранной аналитической линии будут перенесены в метод.
- Аналогичным образом найдите соответствующие параметры для всех линий, определенных в методе.

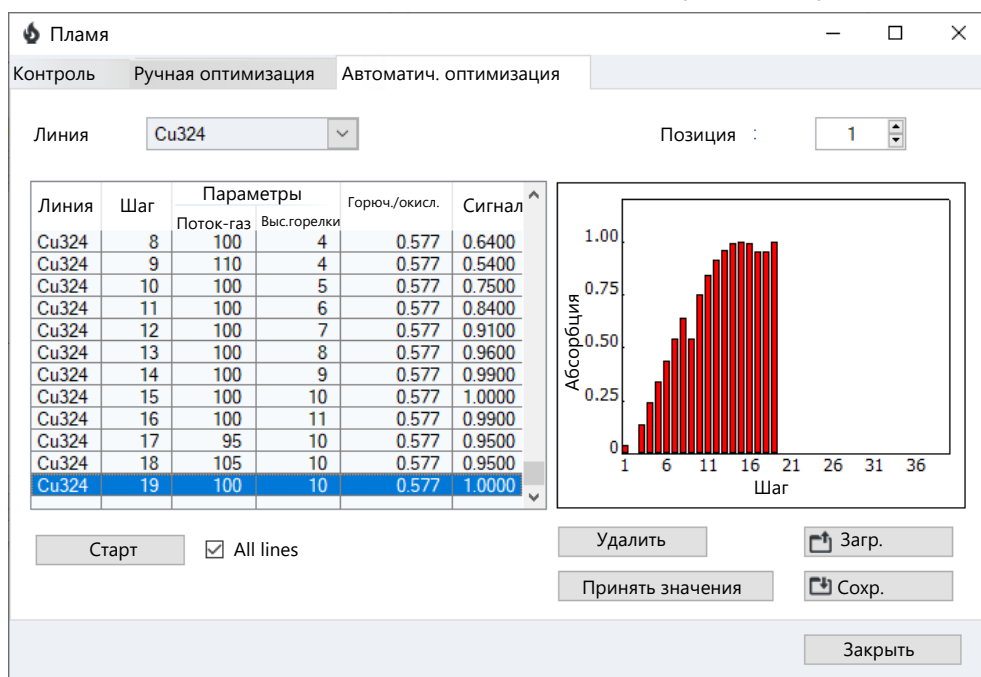
См. также

📄 Окно метод / Пламя – спецификация параметров пламени [► 31]

9.2.2.2 Автоматическая оптимизация пламени

Автоматическая оптимизация пламени осуществляется в окне **Пламя / Автоматич. оптимизация**. Используемый алгоритм оптимизации изменяет настройки потока горючего газа и высоты горелки для получения максимального уровня сигнала, пока не будет достигнут максимум либо изменение параметров не повлияет на уровень сигнала. Полученные параметры пламени можно перенести в метод или сохранить и использовать позже для другого метода.

Откройте окно **Пламя / Автоматич. оптимизация**, щелкнув по значку .



Опция	Описание
Линия	Выбор аналитической линии метода
Позиция	Позиция тестовой пробы в автосамплере
Старт	Запуск измерения и непрерывная регистрация сигнала
All lines / все основные линии	Выполнение оптимизации для всех линий метода с раствором пробы В этом случае раствор пробы должен содержать все элементы метода. Если метод содержит элементные линии, которые измеряются одновременно (настройка основных линий в окне Метод / Строки), выбор оптимизируемых линий можно ограничить опцией все основные линии .
Удалить	Удаление полученных значений
Загр.	Загрузка оптимизированных параметров пламени
Сохр.	Сохранение оптимизированных параметров пламени
Принять значения	Сохранение полученных параметров пламени для настроенной элементной линии в метод
Таблица	Отображение найденных параметров
График	Отображение кривой сигнала

Процедура

- ▶ Подготовить тестовый раствор.
Инструкции по подходящему тестовому раствору см. в справочнике по элементам. Указанная в нем тестовая концентрация дает оптическую плотность ок. 0,1. Используйте для оптимизации двух– трехкратную концентрацию. Если предполагается оптимизировать все аналитические линии/основные линии автоматически, тестовый раствор должен содержать эти элементы.
- ▶ В списке **Линия** выбрать аналитическую линию или установить флажок в поле **All lines / все основные линии**.
- ▶ При использовании автосамплера: установить тестовый раствор на автосамплер и в поле **Позиция** ввести позицию на лотке для проб.
При ручном измерении: Погрузить трубку для всасывания пробы распылителя в тестовый раствор.
- ▶ Нажать кнопку **Старт**.
Откроется окно **Автоматич. оптимизация**.
- ▶ При необходимости активировать следующую опцию:
Автоматич. сохр. данные оптимизации: если активировано, в поле **Имя файла** ввести имя файла.
Измер. доп. линии: только для анализа нескольких линий. Если активировано, отображаются также линии, дополнительно измеренные для основной линии. Однако применить к методу можно только параметры оптимизации основной линии.
Устан. оптимизир. значения автоматич. для текущего метода.: при автоматической оптимизации всех линий метода активировать эту опцию, так как после завершения оптимизации в буфере обмена будут доступны только данные последней линии.
- ▶ Подтвердить настройки кнопкой **ОК**.
- ▶ Для оптимизации отдельных линий: если не было задано до оптимизации, после успешной оптимизации щелчком по кнопке **Принять значения** примените параметры для линии к методу.
 - ✓ Параметры пламени оптимизированы, полученные значения обновлены в методе. Сохраненные значения можно загрузить позже и применить их к другому методу

См. также

- 📖 Окно метод / Пламя – спецификация параметров пламени [► 31]

9.3 Печь

В окне **Печь** задаются следующие параметры или контролируются следующие функции печи:

- Параметры программы печи, используемые в методе
- Выбор модификаторов
- Оптимизация температур атомизации и пиролиза при выполнении метода
- Покрытие графитовой трубки для метода HydrEA
- Представление программы печи в графическом виде
- Проверка функций печи

Чтобы открыть окно **Печь**, щелкните по значку  или выберите пункт меню **Разраб. метода | Печь**.

Кнопки в окне Печь

Опция	Описание
Линия	В этом поле выбрать аналитическую линию, для которой нужно показать/ изменить параметры печи.
[Проверка параметров метода]	Применение параметров печи для аналитической линии к методу.

9.3.1 Отображение программы печи

В окне **Печь / Прогр-ма печи** отображается программа печи для каждой линии. Линия выбирается в нижней области окна. Программа печи создается и редактируется в окне **Метод / Печь**.

Откройте окно **Печь / Прогр-ма печи**, щелкнув по значку .

Отображаются следующие параметры:

Опция	Описание
Шаг	Номер шага в программе печи
*	Этому полю пока еще не назначена функция.
Назв.	Имя шага программы печи
Темп.	Целевая температура шага программы
Нараст.	Скорость нагрева/охлаждения на данном шаге программы
Удерж.	Время удержания целевой температуры в пределах шага программы
Время	Общая продолжительность шага
Газ	Подача газа для продувки (Продув.) и дополнительного газа (Доб.). Возможные состояния Стоп: подача отсутствует Мин: минимальная подача (только газ для продувки) Макс: максимальная подача
Инж.	Проба будет подана в печь после этого шага.
Е/Р	Шаг для обогащения (E = Enrichment) или шаг для предварительной термической обработки (P = Pretreatment) отдельных компонентов

Кнопка **Пров. программу** позволяет проверить программу на наличие ошибок, которые делают невозможным ее выполнение. Если программа верна, индикаторная лампочка рядом с кнопкой загорится зеленым цветом. В противном случае появится сообщение об ошибке с указанием неверного шага.

См. также

 Редактирование программы печи [► 34]

9.3.2 Отображение матричных модификаторов, обогащения и предварительной обработки

В поле **Печь / Модиф.Прочее** можно просмотреть следующие специфические для линии параметры атомизации в графитовой печи:

- Использование и объем матричных модификаторов
- Обогащение в графитовой трубке путем повторяемого пипетирования и сушки
- Термическая предварительная обработка пробы

Откройте окно **Печь / Модиф.Прочее** с просмотром матричных модификаторов, щелкнув по кнопке .

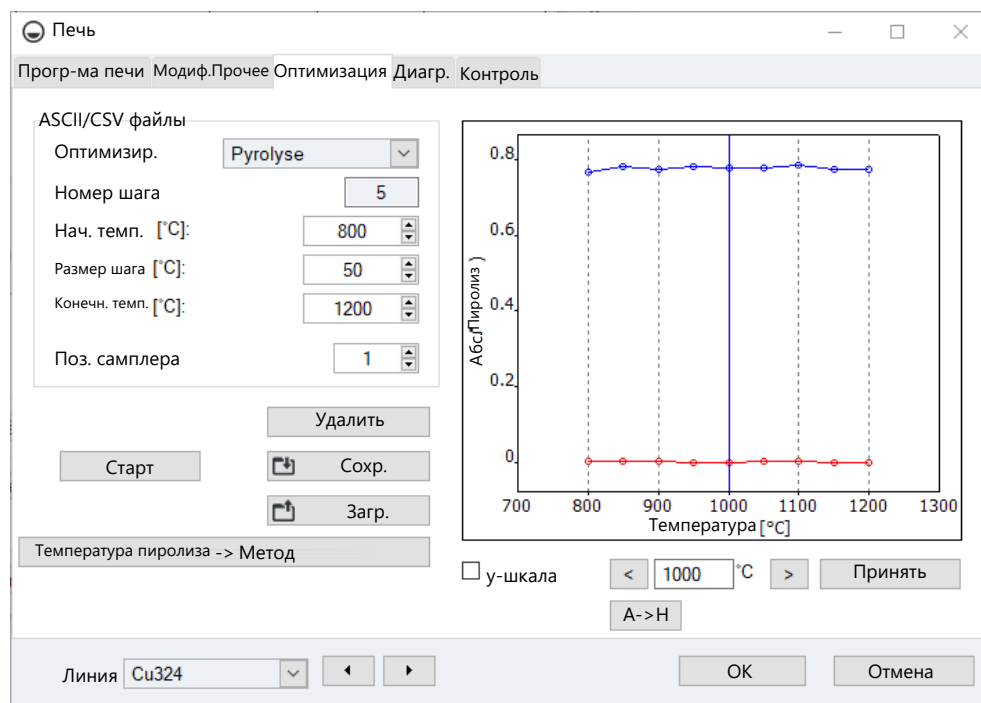
См. также

- Спецификации матричных модификаторов, обогащения и предварительной обработки [▶ 36]

9.3.3 Оптимизация программы печи

В окне **Печь / Оптимизация** путем проведения серии измерений с пошаговым увеличением конечной температуры определяется и задается оптимальная температура пиролиза и атомизации для элементной линии. Оптимизированные параметры печи для атомизации и пиролиза можно сохранить и загрузить в другие методы.

Откройте окно **Печь / Оптимизация**, щелкнув по значку .



Параметры и управляющие кнопки

Опция	Описание
Оптимизир.	Выбор параметров для оптимизации: Пиролиз или Атомизация
Номер шага	Номер выбранного шага в программе печи
Нач. темп.	Минимальная конечная температура шага программы, который должен быть оптимизирован в пределах серии измерений.
Размер шага	Величина шага, на который увеличивается температура на шаге, который должен быть оптимизирован, на один измерительный цикл.
Конечн. темп.	Максимальная конечная температура шага, который должен быть оптимизирован, в пределах серии измерений. Примечание: Можно выбрать только те параметры, которые необходимы в соответствии с текущей программой печи.
Поз. сэмплера	Позиция пробы в автосамплере, с помощью которой производится оптимизация.

Опция	Описание
Старт / Стоп	Автоматическое создание последовательности для измерения оптимизации Запуск/завершение оптимизации
Удалить	Удаление полученных значений
Сохран.	Сохранение оптимизированных параметров печи
Загр.	Загрузка оптимизированных параметров печи
Температура пиролиза -> Метод / Температура атомизации -> Метод	Передача полученных значений в текущую программу печи.

Отображение результатов

Результаты оптимизации отображаются в окне результатов.

С правой стороны окна графически отображается ход оптимизации. Отображаются кривые значений автозатуления и оптической плотности.

Опция	Описание
Красная линия	Фоновый сигнал в зависимости от температуры пиролиза и атомизации
Синяя линия	Специфическая абсорбция в зависимости от температуры пиролиза и атомизации
Вертикальный курсор	Выбранная оптимальная температура пиролиза и атомизации
Шкала Y	Масштабирование представления / фоновый сигнал
A->H/H->A	Переключение между просмотром площади сигнала (A = Area) и высоты сигнала (H = Height)
< / >	Перемещение вертикальных курсоров для температуры пиролиза или атомизации влево или вправо для определения желаемой оптимальной температуры печи

Проведение оптимизации

Для проведения серии измерений требуется автосамплер.

Шаг программы	Задача оптимизации
Температура пиролиза:	Отсутствие удельных потерь абсорбции и минимальный фоновый сигнал
Температура атомизации:	Постоянная удельная оптическая плотность

- ▶ Создать метод с программой печи для аналитической линии и сохранить его.
- ▶ Открыть окно **Печь / Оптимизация**, щелкнув по значку .
- ▶ Ввести параметры оптимизации (см. выше).
- ▶ Подготовить пробу на автосамплере.
- ▶ Запустить оптимизацию, нажав кнопку **Старт**.
Оптимизация выполняется автоматически.
Результаты измерения отображаются в главном окне и представлены в графическом виде в окне **Печь / Оптимизация**.
- ▶ Просмотреть отдельные значения пробы можно щелчком по точке измерения на графике или двойным щелчком по линии пробы в главном окне.
- ▶ Переместить вертикальный курсор кнопками **< / >** или кнопками со стрелками на оптимальную температуру.

- ▶ Нажать кнопку **Принять**.

✓ Оптимизированная температура будет перенесена в программу печи.

Повторите эту процедуру для всех других аналитических линий текущего метода.

9.3.4 Графическое отображение программы печи и нанесение покрытия на графитовую трубку

Окно **Печь / Диагр.** содержит следующие функции:

- Представление программы печи в графическом виде
- Проверка выполнения текущей программы печи
- Покрытие графитовой трубки иридием или золотом для режима HydrEA.

Представление программы печи в графическом виде

Программа печи отображается в виде графика в системе координат температуры и времени.

Опция	Описание
Черная линия	Запрограммированный график температура-время
Красная линия	Во время проверки на черную линию в отработанной части программы печи накладывается красная линия, которая показывает реализованную кривую графика температура-время.
Инж.	Шаг инжекции обозначен над диаграммой идентификатором Инж. .
Зеленый столбец	Фаза обогащения обозначается зеленым горизонтальным столбцом.
Желто-коричневый столбец	Автозануление (AZ*) обозначается желто-коричневым вертикальным столбцом.
Светло-розовый столбец	Шаг интегрирования (запись измеренного значения) обозначается светло-розовым вертикальным столбцом.

Проверка программы печи в пробном режиме

Выполнение текущей программы печи проверяется в тестовом режиме, процесс отображается графически. При выполнении этого испытания значения температуры и времени отображаются, но проба не вводится. Автозануление и интегрирование не выполняются.

- ▶ Запустить тест кнопкой **Старт** .

Ход отображается на графике. Дополнительно открывается окно **Прогр-ма печи** со следующими значениями:

Опция	Описание
Шаг	Выполненный шаг программы печи
Темп.	Текущая температура печи
Время	Время, прошедшее с момента запуска программы
Нараст.	Текущая скорость нагрева
Газ	Текущий газовый поток

Нанесение покрытия на графитовую трубку

Для режима HydrEA требуется покрытая иридием графитовая трубка. Управление процессом нанесения покрытия осуществляется в окне **Печь / Диагр.** .

При установке флажка в поле **Покр.граф.труб.** активируются параметры входа для этой процедуры.

Опция	Описание
Циклы	Количество циклов обогащения покрытия

Опция	Описание
Позиция	Позиция на лотке для проб, содержащая раствор для покрытия
Объем	Этот объем раствора для покрытия вводится в графитовую трубку при каждом шаге обогащения.
Элемент	Выбор материала для покрытия Используйте иридий (Ir) для анализа гидридообразующих элементов и золото (Au) для анализа ртути.
Старт	Запуск процесса покрытия.

Примечание: подробное описание процедуры нанесения покрытия см. в руководствах по эксплуатации HS 60 modular и HS 55 modular.

9.3.5 Другие функции печи

Окно **Печь / Контроль** содержит следующие функции:

- Данные графитовой трубки
- Форматирование графитовой трубки
- Отжиг (очистка) графитовой трубки
- Открытие / закрытие графитовой трубки
- Отображение текущей температуры охлаждающей воды

Данные графитовой трубки

Область **Трубка** содержит информацию о графитовой трубке, которая вводится при замене трубки, а затем автоматически обновляется.

Опция	Описание
Тип	Тип трубки в соответствии с настройкой в окне Быстрый старт
Макс. циклов нагрева	Количество циклов нагрева этой трубки

Примечание: при удалении трубки, которую еще можно использовать, запишите ее данные и используйте их при повторном применении трубки. Данные будут обновлены автоматически. При установке новой трубки сбросьте данные, щелкнув по кнопке **Переустан.**

Форматирование графитовой трубки

При форматировании графитовой трубки выполняются следующие функции:

- Вывод кислорода воздуха из печи и регулировка требуемого давления прижима в подвижных частях печи
- рекалибровка температуры печи,
- форматирование снова установленной графитовой трубки,
- очистка печи после пауз в работе,

Форматирование обязательно в следующих случаях:

- после включения спектрометра,
 - после закрытия открытой до этого печи.
- Запустить оптимизацию, нажав кнопку **Форматир.** .
- ✓ Откроется окно **Формат. трубки**, в котором отображены текущие измеренные данные печи. Запускается 9 температурных ступеней (300 - 1500 - 300 - 1500 - 300 - 1000 - 1600 - 2000 - 2400 °C) и измеряется контрольная температура в трубке. После последнего шага полученные данные для рекалибровки температуры трубки сохраняются.

Отжиг печи

Печь отжигается на этапе программы печи после измерения, что позволяет убрать остатки аналита. Здесь можно запустить отжиг дополнительно. Отжиг – это одно-этапная программа очистки, в ходе которой трубка обдувается максимальным потоком газа.

Опция	Описание
Темп.	Температура отжига
Нараст.	Скорость нагрева
Удерж.	Время выдержки температуры отжига
Старт	Запуск процесса отжига
	Откроется окно Чистка , в котором отображены текущие измеренные данные печи.

Другие функции печи

Опция	Описание
Темп. охл. воды	Текущая температура охлаждающей воды
Подсв.печи/Камера печи	Включение камеры печи и светодиода
	Откроется окно с изображением графитовой трубки, в котором можно наблюдать за вводом и осушением пробы. В настройках по умолчанию всегда включена камера печи. Соответствующая опция находится в окне Опции / Пос-ть анализ.
Откр. печь / Закр. печь	Открытие и закрытие графитовой печи
Температ. для откр. заслонки	Температура печи, при которой камера отключается, и открывается заслонка спектрометра. Излучение высокой энергии ксеноновой лампы проходит через графитовую трубку, и может начинаться измерение.

Тестирование печи

В поле Тест можно проверить датчики печи. Об успешном проведении теста свидетельствует зеленый индикатор, об отрицательном – красный. В случае ошибки на экран выводится соответствующее сообщение об ошибке.

- Запустить проверку датчиков щелчком по кнопке Тест .

См. также

- 📖 Опции для процесса анализа [► 173]

9.4 Гидридная система

Окно **Гидрид. система** содержит следующие функции:

- Проверка состояния гидридной системы
- Тестирование функций системы на наличие ошибок
- Повторная инициализация гидридной системы
- Загрузка трубок системы реагентами перед началом анализа
- Промывка системы, например, после завершения анализа

Чтобы открыть окно **Гидрид. система**, щелкните по значку  или выберите пункт меню **Разраб. метода | Гидрид. .**

Инициализация гидридной системы

Инициализация гидридной системы, как правило, выполняется в начале работы с ААС. Повторная инициализация может понадобиться при разрыве соединения с ААС.

- ▶ В окне **Гидрид. система** выбрать **Инициализ.** .
 - ✓ Устанавливается соединение между автосамплером, ААС и ПК.

Загрузка гидридной системы

Загрузка реагентами необходима перед началом анализов, после новой установки или после очистки гидридной системы.

- ▶ В окне **Гидрид. система** выбрать **Загр. системы.**
 - ✓ Трубки гидридной системы загрузятся реагентами.

Промывка гидридной системы

Чтобы убрать остатки в гидридной системе, ее можно промыть кислотой или редуцирующим агентом. Соответствующие параметры задаются в окне **Метод / Гидрид. .**

- ▶ В окне **Гидрид. система** выбрать **Чистка сист. .**
 - ✓ Гидридная система промывается.

См. также

 Окно Метод / Гидрид. [▶ 39]

9.4.1 Проверка функций гидридной системы

Окно **Гидрид. система / Контроль** отображает состояние отдельных управляемых модулей гидридной системы.

Откройте окно **Гидрид. система / Контроль** , щелкнув по кнопке .

Проверка насосов

Эта функция включает и отключает насосы.

Опция	Описание
Насос для реагентов	Насос для компонентов переносит реагенты и отходы гидридной системы.
Насос пробы	Насос для проб переносит жидкую анализируемую пробу.

Примечание: если ни один из двух клапанов 3 или 4 не активирован при включении одного из двух насосов, автоматически включается клапан 3, чтобы предотвратить обратный поток жидкости. Если насос для пробы включен, также включается насос для компонентов, чтобы предотвратить накопление жидкости в сепараторе газ-жидкость.

Проверка газовых путей В области **Путь газа** с помощью электромагнитных клапанов (группы электромагнитных клапанов) можно переключать все целесообразные для анализа пути аргона.

Опция **Газ -> клапан 2 -> ячейка** позволяет также включить большой газовый поток непосредственно в кювету для газовых путей, которые не направлены в кювету. При этом открывается клапан 2.

Клапаны в газовом потоке Эта функция обеспечивает переключение клапанов.

Клапан 1 включает и выключает газовый поток через наконечник загрузочного модуля.

Клапан 3 переключает поток аргона 6 л/ч на заданный путь.

Клапан 4 переключает поток аргона 25 л/ч на заданный путь.

Проверка кюветы

Опция	Описание
Высота ячейки	Настройка высоты кюветы в ходе луча
Нагрев	Включение нагрева кюветы Эту функцию можно использовать для предварительного нагрева кюветы. Кювета нагревается до температуры, введенной в поле Треб. . После включения или выключения нагрева кюветы значение ее температуры отображается в поле Текущ. .

Переключение клапанов пробы

В области **Клапаны пробы** путь пробы через пару магнитных клапанов (V6,V7) можно переключить либо к сточной бутылки, либо к реактору.

Нагрев золотого коллектора

Только системы с ртутью/гидридные системы с обогащением

В области **Коллектор** можно отобразить и изменить настройки золотого коллектора.

Опция	Описание
выкл.	Выключение нагрева и охлаждения золотого коллектора
Нагрев	Включение нагрева золотого коллектора
Остывание	Включение вентилятора золотого коллектора Золотой коллектор охлаждается.
Нагрев	Параметры температуры отжига золотого коллектора Значение устанавливается на заводе-изготовителе и может быть изменено только в том случае, если изменились термические характеристики нагрева золотого коллектора. Более высокое значение соответствует более высокой температуре отжига. Щелчок по кнопке Устан. сохраняет измененное значение гидридной системы.

Очистка датчика пузырьков

Только для HS 60 и HS 60 modular

Датчик пузырьков подает сигнал, если жидкость попала в газовый путь после сепаратора газ-жидкость. Если датчик подал сигнал об этом во время теста ошибок системы или во время измерения, газовый путь около датчика пузырьков следует очистить дополнительным газовым потоком. Процесс очистки завершен успешно, если в течение 30 с в газовом пути не появляется ни одного пузырька.

Опция	Описание
Сенсор пузырьков	Индикатор активен только во время процесса очистки датчика пузырьков.

Опция	Описание
	Красный: в газовом пути обнаружены пузырьки (жидкость). Зеленый: в газовом пути пузырьков нет.
Старт	Начало процесса очистки.

9.4.2 Проверка гидридной системы на наличие ошибок

Текущее состояние гидридной системы можно проверить в окне **Гидрид. система / Тест на ошибки**. В случае возникновения одной из перечисленных здесь ошибок и отображения на экране соответствующего сообщения об ошибке любой процесс анализа немедленно прерывается.

Чтобы открыть окно **Гидрид. система / Тест на ошибки**, щелкните по кнопке .

Подключенная гидридная система

Опция	Описание
Тип	Подключенная и инициализированная гидридная система
Версия	Версия встроенного ПО гидридной системы
Частота сети	На дисплее отображается измеренная частота сети 50 или 60 Гц. Допускаются отклонения в 2 Гц вверх и вниз, в остальных случаях выводится сообщение об ошибке Частота сети.

Проверка на наличие ошибок

Проверка на наличие ошибок запускается нажатием кнопки **Тест**. Результат этого теста обозначается контрольными лампами – зеленой (успешный тест) и красной (тест прошел с ошибками). Отрицательный результат теста может иметь следующие причины:

Опция	Описание
Давл. газа	Отсутствует давление аргона.
+24 В	Отсутствует рабочее напряжение +24 В.
Предохр. реле	Предохранительное реле не включено.
Темп-ра трансформатора	Перегрев трансформатора или неисправный датчик.
Темп-ра коллектора	Перегрев золотого коллектора или неисправный датчик.
Время нагр. золот. коллект.	Золотой коллектор не достиг заданной температуры за установленное время.
Темп-ра ячейки	Перегрев кюветы или неисправный термоэлемент.
Время нагр. ячейки	Кювета не достигла заданной температуры за установленное время.
Частота сети	Частота сети: не 50 или 60 Гц.
Сенсор пузырьков	Жидкость находится в газовом пути после сепаратора газ-жидкость.
Сенсор темп-ры ячейки	Температурный датчик кюветы неисправен.

9.5 Параметры автосамплера

9.5.1 Автосамплер для пламенной атомизации

Программное обеспечение поддерживает следующие автосамплеры для пламенной атомизации:

- AS-F и AS-FD
- AS 51s
- AS 52s

Автосамплер является дополнительным аксессуаром для пламенной атомизации. Автосамплер идентифицируется при инициализации устройства.

Окно **Автосамплер** содержит следующие функции:

- Отображение типа подключенного автосамплера
- Юстировка автосамплера
- Дополнительная промывка /повторная инициализация автосамплера
- Проведение функционального теста
- Отображение распределения проб
- Выполнение подачи реагентов

Параметры, непосредственно относящиеся к анализу (распределение на лотке для проб, разбавление, шаги смешивания и промывки) задаются в методе, последовательности и данных, определяющих пробу.

Чтобы открыть окно **Автосамплер**, щелкните по значку  или выберите пункт меню **Разраб. метода | Автосамплер**.

Инициализация автосамплера

Инициализация автосамплера обычно выполняется в начале работы с ААС в окне **Быстрый старт**. Повторная инициализация может потребоваться, если автосамплер утратил свою ориентацию, например, из-за механического удара.

► В окне **Автосамплер** выбрать **Инициализ.**

- ✓ Посредством инициализации устанавливается соединение между автосамплером, ААС и ПК.

Промывка пути подачи пробы

Путь подачи пробы от автосамплера до пламени можно промыть промывочной жидкостью автосамплера. При этом канюля погружается в промывочную емкость, в то время как промывочный насос подает свежий промывочный раствор. Если используется инжекционный переключатель SFS 6, путь подачи пробы открыт и при этом промывается полный путь пробы.

► В окне **Автосамплер** выбрать **Промывка** или пункт меню **Процед. | Промывка**.

- ✓ Путь подачи пробы промывается.



ПРИМЕЧАНИЕ

Короткое замыкание на устройстве в результате неправильного подключения автосамплера

Выключайте ААС, прежде чем подключить к нему автосамплер. Иначе возможны ошибки соединения или повреждение интерфейса.

9.5.1.1 Установка параметров автосамплера для пламенной атомизации

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

- Тип автосамплера
- Параметры промывки
- Настройки для контролируемой очистки
- Функция промывки смесительного сосуда (только автосамплер с функцией разбавления)

Параметры **Промывка** и **Управляемая чистка** применяются из текущего метода. В свою очередь, изменения в окне **Автосамплер / Параметры** обновляют записи в методе.

- Открыть окно **Автосамплер / Параметры**, щелкнув по значку .

Автосамплер

Опция	Описание
Тип	Отображение подключенного автосамплера "-": Автосамплер не подключен. AS-F / AS 51s : автосамплер без функции разбавления AS-FD / AS 52s : автосамплер с функцией разбавления
Лоток (AS-F / AS-FD)	"-": не установлен лоток. 139 поз.: лоток для проб с 129 позициями для виал Sarstedt объемом 15 мл на внешнем треке и 10 позициями для виал Sarstedt объемом 30 мл на внутреннем треке 54 поз.: лоток для проб на 54 позиций для виал Sarstedt объемом 50 мл
Лоток (AS 51s / AS 52s)	"-": не установлен лоток. 87 поз.: лоток для проб с 77 позициями для виал Sarstedt объемом 15 мл на внешнем треке и 10 позициями для виал Sarstedt объемом 30 мл на внутреннем треке 49 поз.: лоток для проб с 49 позициями для виал Sarstedt объемом 30 мл на трех треках 30 поз.: лоток для проб с 30 позициями для виал Sarstedt объемом 50 мл на трех треках
Версия	Номер версии встроенного программного обеспечения автосамплера

Промывка

Опция	Описание
Режим промывки	выкл. Режим промывки отключен. Промывка не проводится автоматически. Между пробами Промывка после каждой пробы, но не в пределах статистической серии.
Время промывки Промыв. сосуд	Время, в течение которого жидкость для промывки засасывается в промывочную емкость При этом жидкость для промывки по канюле подается через систему распылитель-смесительная камера-горелка в пламя, и промывается весь путь подачи пробы.
Циклы смесит. сосуда	Число циклов промывки смесительного сосуда Во время цикла промывки смесительный сосуд заполняется промывочной жидкостью/ разбавителем и снова опорожняется.

Управляемая чистка

Опция	Описание
Управляемая чистка	Активация управляемой очистки при превышении концентрации Ход очистки проверяется повторным измерением.
Контр.предел (Абс)	Значение, к которому сигнал должен вернуться до измерения разбавленных проб или проб с более низкой концентрацией.

Спец. функции

Во время отработки последовательности смесительный сосуд промывается автоматически. Процесс промывки смесительного сосуда можно запустить вручную, например, чтобы очистить его в конце измерения.

Опция	Описание
Объем	Ввод объема для промывки.
Старт	Запуск процесса промывки.

9.5.1.2 Технические параметры автосамплер для пламенной атомизации

В окне **Автосамплер / Техн. параметры** можно задать следующие параметры:

- глубину погружения канюли в различные виалы
- рабочую скорость дозирующего устройства.
- регулировку рычага автосамплера относительно виал

Откройте окно **Автосамплер / Техн. параметры**, щелкнув по значку .

Для отдельных типов сосудов в расчет принимаются следующие действия:

Сосуд	Действие
Виалы для пробы	Забор проб дозатором или всасывание распылителем (режим пламени)/ перистальтическим насосом (гидридный метод)
Специальные виалы	Забор или всасывание специальных проб
Смесительный сосуд	Дозирование объема аналита или разбавителя и забор проб после разбавления
Промывочный сосуд	Промывка канюли и пути подачи пробы
Подача реагентов	Запрограммированная подача реагентов к пробе

Элементы таблицы действий

Столбец	Описание
Действие	Доступные действия Забор Забор пробы из сосуда для ввода в смесительный сосуд или в пламя Разбавл. Ввод пробы в смесительный сосуд Промывка Забор промывочного раствора
Тип	Подключенная модель автосамплера
Положение	Сосуд, к которому относится действие.
Глуб.	Глубина погружения канюли в мм
Уровень скор-ти	рабочую скорость дозирующего устройства.

Столбец	Описание
	Более высокие значения увеличивают скорость работы дозатора, более низкие - замедляют ее. Рекомендуемые значения: Забор проб: средние уровни скорости Ввод в смесительный сосуд: один из двух максимальных уровней, чтобы быстрая инъекция приводила к полному перемешиванию. Кроме того, полное перемешивание поддерживается фиксированным временем ожидания перед забором из смесительного сосуда (или сосуда для пробы). Забор раствора для разбавления осуществляются с фиксированной скоростью.

Область Таблица

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

Опция	Описание
Скорость	Скорость дозирующего устройства
Глуб.	Глубина погружения канюли / дозирующей трубки Глубина погружения измеряется, начиная от самой высокой позиции рычага сэмплера.
Глубина для поз.	Позиция, в которой проверяется специальный сосуд или сосуд для проб.
Устан.	Перемещение рычага автосамплера к сосуду. Если эта опция не активирована, глубина погружения и скорость изменяются без перемещения рычага над сосудом.

См. также

 Настройка глубины погружения и скорости дозирования автосамплера [▶ 141](#)

9.5.1.3 Настройка глубины погружения и скорости дозирования автосамплера

Для автосамплера для пламенной атомизации и техники графитовой печи можно выполнить оптимизацию глубины погружения канюли/дозировочной трубки, а также скорости дозирования растворителей в различные сосуды.

- ▶ Открыть окно **Автосамплер / Техн. параметры**, щелкнув по значку .
- ▶ В таблице действий выделить строку таблицы.
- ▶ При определении сосудов для проб или специальных сосудов установить в поле **Глубина для поз.** позицию на лотке для проб.
- ▶ Только AS-GF и MPE 60/2: если активировано разбавление в сосудах для проб в окне **Метод / Транспорт пробы**, настроить позицию смесительных сосудов.
- ▶ Установить флажок в поле **Устан.** для перемещения рычага автосамплера в позицию сосуда.
- ▶ Наблюдать за движением рычага автосамплера и изменять параметры **Скорость** и **Глуб.** до тех пор, пока не будет достигнут желаемый результат.

Инструкции по настройке скорости см. в описании окна **Автосамплер / Техн. параметры**

См. также

-  Технические параметры автосамплеров для техники графитовой печи [► 148]
-  Технические параметры автосамплера для пламенной атомизации [► 140]

9.5.1.4 Функциональная проверка автосамплера для пламенной атомизации

Функцию подключенного автосамплера можно проверить в окне **Автосамплер / Функц. тест**.

Откройте окно **Автосамплер / Функц. тест**, щелкнув по значку .

Трекер/Ротатор

Рычаг автосамплера перемещается над его разными позициями.

Опция	Описание
Виала №	Перемещение в позицию сосуда для проб, выбранную в соответствующем списке
Промыв. поз.	Перемещение в позицию промывочного сосуда
Смесит. поз.	Только автосамплер с функцией разбавления Перемещение в позицию смесительного сосуда

Дозир.устр-во

Только для автосамплера с функцией разбавления

Этот тест проверяет функции модуля разбавления (модуль дозирования жидкостей).

Опция	Описание
Скорость	Скорость дозирования
Объем	Подлежащий забору объем пипетирования
Забор	Забор выбранного объема с заданной скоростью дозирования.
Разбавл.	Дозирование объема с заданной скоростью дозирования.
Клапан к бутыл.	Клапан переключает поток между бутылкой с разбавителем и пробой. При переключении клапана должен раздаваться различимый на слух щелчок.
Переустан.	Сброс настройки объема.

Рычаг

Рычаг автосамплера опускается в позицию, заданную в области **Трекер/Ротатор**.

- В поле **Глуб.** настроить глубину, на которую будет опускаться рычаг автосамплера.

Насосы

При установке соответствующего флажка или снятии флажка включаются насосы автосамплера.

Опция	Описание
Промыв. насос	Насос для подачи в промывочный сосуд
Насос смесит. сосуда	Только автосамплер с функцией разбавления Насос для опорожнения смесительного сосуда

Тестовые программы

Эти тесты осуществляются с предварительно настроенными программами сухого выполнения. Виалы, которые используются во время теста, должны быть пустыми! После завершения тестовой программы отображается сообщение об успешном завершении теста.

Запуск выбранной тестовой программы выполняется кнопкой **Старт**.

Опция	Описание
Тест. программа 1	Перемещение в позицию 1 и погружение в сосуд Промывка канюли Перемещение в позицию 33 и погружение в сосуд Промывка канюли Перемещение в позицию 42 и погружение в сосуд Промывка канюли
Тест. программа 2	Выполнение тестовой программы 1 Ввод 5 мл разбавителя в смесительный сосуд Промывка канюли Опорожнение смесительного сосуда Ввод 5 мл разбавителя в смесительный сосуд Промывка канюли Опорожнение смесительного сосуда
Тест. программа 3 Только для AS-F и AS-FD	Погружение в каждую позицию

Тест на ошибки

Автосамплер проверяется на наличие ошибок датчика. При возникновении одной из перечисленных здесь ошибок любое измерение прерывается (соответствующее сообщение об ошибке отображается на экране). Запуск теста на ошибки выполняется кнопкой **Тест**. Успешное проведение теста обозначается зеленым контрольным кружком; отрицательный результат теста обозначается красным кружком.

Если тест не пройден, возможны следующие причины ошибки:

Ошибка	Описание
Уровень промыв. бутyli	Только AS 51s / AS 52s Слишком низкий уровень заполнения в емкости для промывочного раствора
Уровень бутyli с разбавителем	Только AS 52s Слишком низкий уровень заполнения в емкости для раствора для разбавления
Трекер/Ротатор	Шарнирный привод рычага автосамплера и вращающий привод лотка неисправны.
Идентифик. лотка	Лоток для проб не распознается.
Дозир. шприц (привод)	Ошибка дозирующего устройства.
Дозир. шприц (объем)	Дозирующим устройством был забран слишком большой объем.

Настр. смплера

Щелчок по кнопке **Настр. смплера** открывает окно поднастройки автосамплера.

См. также

📖 Регулировка автосамплера [► 144]

9.5.1.5 Регулировка автосамплера

Автосамплеры предварительно настроены на заводе. Повторная настройка требуется только в редких случаях (например, после ненадлежащей транспортировки), если рычаг автосамплера больше не погружается в сосуд по центру. Поднастройка выполняется под управлением компьютера в окне **Настр. смплера**.

В окне **Настр. смплера** доступны следующие опции и кнопки.

Поз. настройки

Рычаг автосамплера можно отрегулировать на следующие позиции:

Опция	Описание
Позиции для смеш.	Только автосамплер с функцией разбавления Смесительный сосуд
Лоток	Позиция 1 на лотке для проб
Промыв. поз.	Промывочный сосуд

Настройка

Для настройки позиций предоставляются согласованные опции.

Опция	Описание
Глуб.	С помощью этого поля можно погрузить канюлю в соответствующий сосуд или извлечь из него. Это позволяет лучше оценить позицию относительно центра сосуда. Глубина погружения является здесь параметром, который можно оптимизировать для позиции промывки.
Рычаг	Щелчком по кнопке повернуть рычаг автосамплера Или переместить рычаг кнопками со стрелками влево/вправо на клавиатуре.
Лоток смплера	Щелчком по кнопке повернуть лоток для проб. Или переместить лоток кнопками со стрелками вверх/вниз на клавиатуре.
Шаги	
Сохран.	Сохранение новых параметров для выбранной позиции

Промыв. насос

Только автосамплеры с более новой версией встроенного ПО

Здесь можно настроить скорость, с которой насос будет подавать раствор в промывочную емкость.

- ▶ В списке **Уровень** выбрать скорость (1 ... 24).
- ▶ Сохранить настройку, нажав кнопку **Сохран.** .
✓ Настройка сохранится.

Регулировка автосамплера

- ▶ Установить сосуд для проб на позицию 1 лотка для проб.
- ▶ Открыть окно **Автосамплер / Функция тест**, щелкнув по значку . Выбрать **Настр. смплера** .
- ▶ Выбрать позицию для настройки.
- ▶ Отрегулировать глубину погружения таким образом, чтобы можно было хорошо оценить позицию относительно сосуда.
- ▶ Поднастроить позицию рычага автосамплера кнопками.
- ▶ Дополнительно для **Лоток**: поднастроить позицию лотка для проб кнопками.
- ▶ Сохранить новые параметры позиции во встроенное ПО, нажав кнопку **Сохран.** .

- ▶ Повторить предыдущие шаги для еще не отрегулированных позиций.
- ✓ Новые позиции сохраняются во встроенном ПО автосамплера.

9.5.1.6 Обзор позиций автосамплера для пламенной атомизации

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

Чтобы открыть окно **Автосамплер / Позиции**, щелкните по значку .

Для просмотра можно выбрать режимы **все позиции** или **только спец. позиции**.

Примечание: для просмотра этого окна в текущем методе должна быть загружена хотя бы одна линия.

9.5.1.7 Подача реагентов к пробе

В окне **Автосамплер / Доб. реагент** при использовании автосамплера можно автоматически добавить реагент к пробам. Реагент должен находиться в сосуде для проб на лотке для проб. Вкладка **Доб. реагент** отображается только в том случае, если активирован метод с соответствующей последовательностью.

- ▶ Загрузить лоток пробам в соответствии с последовательностью. Поставить реагент на свободную позицию лотка.

- ▶ Открыть окно **Автосамплер / Доб. реагент**, щелкнув по значку .

- ▶ Нажать кнопку **Поз. из пос-ти**.
Позиции проб будут перенесены из последовательности в таблицу для проб окна.

- ▶ Ввести наименование реагента в поле **Назв.** и позицию лотка в поле **Позиция**.

- ▶ Активировать опцию **Фактор учета**, если для коэффициента разбавления пробы следует учитывать добавление реагента.

- ▶ Для проб, в которые нужно добавить реагент, в таблице для проб ввести объем проб и добавляемый объем реагента.

- ▶ Выделить пробы в таблице щелчком мыши. Множественное выделение можно выполнить, удерживая нажатой кнопку Ctrl или Alt.

- ▶ Запустить добавление реагента, нажав кнопку **Начать доб.**.

✓ Начнется подача реагента. Все обработанные пробы отмечаются значком "*".

9.5.2 автосамплер для техники графитовой печи

Программное обеспечение поддерживает для техникой графитовой печи следующие автосамплеры:

- AS-GF: автосамплер без функции разбавления
- MPE 60: автосамплер с функцией разбавления
- MPE 60/1: автосамплер без функции разбавления

Для техники графитовой печи автосамплер является обязательным. Подключенный автосамплер распознается во время инициализации прибора.

Параметры, непосредственно относящиеся к анализу (распределение на лотке для проб, разбавление, шаги смешивания и промывки) задаются в методе, последовательности и данных, определяющих пробу.

Чтобы открыть окно **Автосамплер**, щелкните по значку  или выберите пункт меню **Разраб. метода | Автосамплер**.

Окно **Автосамплер** содержит следующие функции:

- Отображение типа подключенного автосамплера
- Юстировка автосамплера
- Дополнительная промывка /повторная инициализация автосамплера
- Проведение функционального теста
- Отображение распределения проб
- Выполнение подачи реагентов

Параметры, непосредственно относящиеся к анализу (распределение на лотке для проб, разбавление, шаги смешивания и промывки) задаются в методе, последовательности и данных, определяющих пробу.

Чтобы открыть окно **Автосамплер**, щелкните по значку  или выберите пункт меню **Разраб. метода | Автосамплер**.

Инициализация автосамплера

Инициализация автосамплера обычно выполняется в начале работы с ААС в окне **Быстрый старт**. Повторная инициализация может потребоваться, если автосамплер утратил свою ориентацию, например, из-за механического удара.

- ▶ В окне **Автосамплер** выбрать **Инициализ.**
 - ✓ Посредством инициализации устанавливается соединение между автосамплером, ААС и ПК.

Промывка трубки с пробой

Промывочная жидкость подается через дозатор автосамплера по трубке для пробы и выводится в промывочный сосуд.

- ▶ В окне **Автосамплер** выбрать **Промывка** или пункт меню **Процед. | Промывка**.
 - ✓ Трубка с пробой промывается.



ПРИМЕЧАНИЕ

Короткое замыкание на устройстве в результате неправильного подключения автосамплера

Выключайте ААС, прежде чем подключить к нему автосамплер. Иначе возможны ошибки соединения или повреждение интерфейса.

9.5.2.1 Указание подключенного автосамплера для техники графитовой печи

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

- Тип автосамплера
- Параметры промывки
- Настройки для контролируемой очистки
- Функция промывки смесительного сосуда (только автосамплер с функцией разбавления)

Параметры **Промывка** и **Управляемая чистка** применяются из текущего метода. В свою очередь, изменения в окне **Автосамплер / Параметры** обновляют записи в методе.

- ▶ Открыть окно **Автосамплер / Параметры**, щелкнув по значку .

Автосамплер

Опция	Описание
Тип	Отображение подключенного автосамплера "-": автосамплер не подключен AS-GF / MPE 60: автосамплер для техники графитовой печи
Лоток	"-": не установлен лоток 89 поз.: Для MPE Лоток для проб с 77 сосудами для проб (объемом = 2 мл), 4 специальными сосудами для проб (объемом = 5 мл) и 8 специальными сосудами для проб (объемом = 2 мл) 108 поз.: Для AS-GF Лоток для проб со 100 сосудами для проб (объемом = 1,5 мл) и 8 центральными сосудами для разбавителя, специальных проб, стандартов, модификаторов и т. д. (объемом = 5 мл)
Версия	Номер версии встроенного программного обеспечения автосамплера

Промывка

Опция	Описание
Режим промывки	выкл. Режим промывки отключен. Промывка не проводится автоматически. Между пробами Промывка после каждой пробы, но не в пределах статистической серии Между измерениями Промывка после каждого измерения, в том числе в пределах статистической серии Между компонентами Промывка после переноса каждого компонента (модификатор, стандарт, проба и т.д.) в графитовую трубку
Циклы промывки Промыв. сосуд	Число циклов промывки на одну промывку, от 1 до 5

Управляемая чистка

Опция	Описание
Управляемая чистка	Активация управляемой очистки при превышении концентрации Ход очистки проверяется повторным измерением.
Контр.предел (Абс)	Значение, к которому сигнал должен вернуться до измерения разбавленных проб или проб с более низкой концентрацией.

Промывка смесительного сосуда MPE 60

В автосамплере MPE 60 с функцией разбавления можно промывать смесительный сосуд.

Опция	Описание
Пром. смесит. сосуда	Промывка смесительного сосуда отдельно от измерения последовательности.
Объем	Объем промывочного раствора
Циклы смесит. сосуда	Число циклов промывки смесительного сосуда
Старт	Промывка смесительного сосуда

9.5.2.2 Технические параметры автосамплеров для техники графитовой печи

В окне **Автосамплер / Техн. параметры** можно задать следующие параметры:

- глубину погружения канюли в различные виалы
- рабочую скорость дозирующего устройства.
- регулировку рычага автосамплера относительно виал
- Автоматическая регулировка глубины при заборе объема во время анализа
- Выравнивание автосамплера относительно печи с графитовой трубкой

Чтобы открыть окно **Автосамплер / Техн. параметры**, щелкните по значку .

Для отдельных типов сосудов в расчет принимаются следующие действия:

Опция	Описание
Виалы для пробы	Забор проб дозатором
Специальные виалы	Забор специальных проб
Смесительный сосуд	Дозирование объема аналита или разбавителя и забор проб после разбавления
Графитовая трубка	Ввод проб или специальных проб в графитовую трубку

Элементы таблицы действий

Столбец	Описание
Действие	Доступные действия: Забор Забор пробы из сосуда для проб, специальной виалы или смесительного сосуда Разбавл. Ввод пробы в смесительный сосуд Ввод пробы / Разбавл.: спец. Ввод пробы или специальной пробы в графитовую трубку.
Тип	Подключенная модель автосамплера
Положение	Сосуд, к которому относится действие.
Уровень скор-ти	рабочую скорость дозирующего устройства. Более высокие значения увеличивают скорость работы дозатора, более низкие - замедляют ее. Рекомендуемые значения: Забор проб: 3 Дозирование в смесительный сосуд: 9 Ввод в графитовую трубку: 1 Забор разбавителя и разделяющего воздушного сегмента осуществляются с фиксированной скоростью.

Область Таблица

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

Опция	Описание
Скорость	Скорость дозирующего устройства
Глуб.	Глубина погружения канюли / дозирующей трубки Глубина погружения измеряется, начиная от самой высокой позиции рычага сэмплера.
Глубина для поз.	Позиция, в которой проверяется специальный сосуд или сосуд для проб.

Опция	Описание
Устан.	Перемещение рычага автосамплера к сосуду. Если эта опция не активирована, глубина погружения и скорость изменяются без перемещения рычага над сосудом.

Автоматич. корр. глуб.

Автоматическая коррекция глубины, на которую дозирующая трубка погружается в виалу для пробы или специальную виалу, для нового объема, что обеспечивает оптимальное погружение дозирующей трубки согласно уровню наполнения виал и минимизирует опасность загрязнения пробы.

Опция	Описание
Автоматич. корр. глуб.	Автоматическая коррекция глубины погружения дозирующей трубки с учетом уровня наполнения виал
Виалы для пробы	Открывает окно Позиции сэмплера, объемы и глуб. для настройки различных конфигураций и объемов отдельных сосудов. Настройки учитываются при автоматической коррекции глубины

Другие функции

Опция	Описание
Опорожн. смес. сосуд	Только для MPE 60/2 и AS-GF Кнопка активна, если в окне Подача проб в качестве смесительных сосудов заданы виалы для проб. Щелчок по кнопке активирует эти позиции для повторного использования.
Откр. печь / Закр. печь	Открытие и закрытие печи для замены графитовой трубки
Настр. сэмплера на печь	Запуск поддерживаемого ПО выравнивания автосамплера по отношению к печи с графитовой трубкой

См. также

- 📖 Настройка глубины погружения и скорости дозирования автосамплера [► 141]
- 📖 Автоматическая коррекция глубины для автосамплеров для техникой графитовой печи [► 149]
- 📖 Выравнивание автосамплера относительно графитовой печи [► 151]

9.5.2.3 Автоматическая коррекция глубины для автосамплеров для техникой графитовой печи

Автоматическая коррекция глубины погружения дозирующей трубки в сосуды для проб и специальные сосуды предотвращает ненужное загрязнение дозирующей трубки. Дозирующая трубка погружается в автосамплер лишь настолько глубоко, насколько это необходимо для забора пробы. Глубина погружения автоматически регулируется с увеличением забора.

Глубина погружения, заданная в окне **Автосамплер / Техн. параметры** для виал для проб и специальных виал, сначала применима ко всем виалам на лотке для проб.

Объемы заполнения или размеры сосудов, отличающиеся от стандартных, можно задавать отдельно и, таким образом, учитывать при автоматической коррекции глубины.

- Открыть окно **Автосамплер / Техн. параметры**, щелкнув по значку .

- ▶ Активировать параметр **Автоматич. корр. глуб.** и выбрать **Вials для пробы** . Откроется окно **Позиции сэмплера, объемы и глуб.** .
- ▶ Выполнить отдельные настройки для каждой виалы для пробы/ специальной виалы.
- ▶ Закрыть окно, нажав кнопку **ОК** .
 - ✓ Все настройки сохраняются и учитываются при запуске следующей последовательности.

Для отдельных специальных сосудов и сосудов для проб можно задать следующие параметры:

Опция	Описание
Позиция	Настройка позиции виалы на лотке для проб Для каждого заменяемого сосуда должны быть выполнены отдельные настройки.
Объем	Показывает общий объем пробы, уже забранный из сосуда Можно вводить недостающий объем пробы в не полностью заполненный сосуд. Значение обновляется программой после каждого забора пробы.
Глуб.	Показывает дополнительную глубину, которая соответствует уже забранному объему пробы в данный момент. Это значение пересчитывается после каждого забора пробы. Общая глубина погружения является суммой указанной глубины погружения (окно Автосамплер / Техн. параметры) и указанной здесь дополнительной глубины. На основе этого значения глубина вычисляется из забранного объема.
Диаметр	Показывает диаметр виалы Если диаметр виалы отличается от отображаемого значения, установить флажок в поле Диаметр и ввести значение в это поле.
Удалить объемы	Сброс значений объемов для всех специальных виал или виал для проб на 0
Переустан.	Сброс всех объемов и значений глубин для виал на 0, сброс диаметров на их последние сохраненные кнопкой ОК значения

Максимальная глубина погружения (автоматическая коррекция)

Максимально допустимая глубина погружения задается для того, чтобы избежать ударов дозирующей трубки о дно сосуда и ее искривления.

Опция	Описание
Виала для пробы	Максимальные настройки глубины погружения применимы к виалам для проб и специальным виалам.
Глуб.	Максимальная глубина погружения в виалу для проб или в специальную виалу
Позиция	На этой позиции лотка для проб тестируется глубина погружения для выбранного типа виалы.
Устан.	Дозирующая трубка погружается в виалу в соответствии с глубиной, заданной в поле Глуб. . Глубину погружения можно проверить визуально. Внимание! Если установлен флажок в поле Устан. , дозирующая трубка погружается непосредственно на заданную глубину. Убедитесь, что путь автосамплера не заблокирован.
Сохран.	Сохранение измененной глубины погружения для типа виалы.

См. также

📄 Технические параметры автосамплеров для техники графитовой печи [▶ 148]

9.5.2.4 Выравнивание автосамплера относительно графитовой печи

Точная настройка положения AS-GF относительно печи осуществляется с программной поддержкой. При этом автосамплер выравнивается таким образом, чтобы дозирующая трубка оптимально опускала пробы в графитовую трубку, не касаясь при этом сменного модуля дозатора. Также настраивается глубина инъекции для пробы.

- ▶ Открыть окно **Автосамплер / Техн. параметры**, щелкнув по кнопке .
- ▶ Нажать кнопку **Настр. смплера на печь**.
 - ✓ Запустится мастер выравнивания автосамплера. Следуйте указаниям на экране.

9.5.2.5 Функциональная проверка автосамплера для техники графитовой печи

Функцию подключенного автосамплера можно проверить в окне **Автосамплер / Функц. тест**.

Откройте окно **Автосамплер / Функц. тест**, щелкнув по значку .

Трекер/Ротатор

Рычаг автосамплера перемещается над его разными позициями.

Опция	Описание
Виала №	Перемещение в позицию сосуда для проб, выбранную в соответствующем списке
Промыв. поз.	Перемещение в позицию промывочного сосуда
Смесит. поз.	Только автосамплер с функцией разбавления Перемещение в позицию смесительного сосуда
Поз. к трубке	Перемещение в позицию графитовой трубки

Дозир.устр-во

В ходе этого теста проверяется дозатор.

Опция	Описание
Скорость	Скорость дозирования
Объем	Подлежащий забору объем пипетирования
Забор	Забор выбранного объема с заданной скоростью дозирования.
Разбавл.	Дозирование объема с заданной скоростью дозирования.
Клапан к бутыл.	Клапан переключает поток между бутылкой с разбавителем и пробой. При переключении клапана должен раздаваться различимый на слух щелчок.
Переустан.	Сброс настройки объема.

Рычаг

Рычаг автосамплера опускается в позицию, заданную в области **Трекер/Ротатор**.

- ▶ В поле **Глуб.** настроить глубину, на которую будет опускаться рычаг автосамплера.

Тестовые программы

Эти тесты осуществляются с предварительно настроенными программами сухого выполнения. Вials, которые используются во время теста, должны быть пустыми! После завершения тестовой программы отображается сообщение об успешном завершении теста.

Запуск выбранной тестовой программы выполняется кнопкой **Старт**.

Программа	Описание
Тест. программа 1	■ Забор объема из позиции 1 ■ Забор объема из позиции 41 ■ Дозирование объема в графитовую трубку ■ Промывка дозирующей трубки два раза
Тест. программа 2	Только автосамплер с функцией разбавления ■ Забор раствора разбавителя из бутылки для хранения ■ Забор объема из позиции 10 ■ Дозирование объема в смесительный сосуд ■ Забор объема из смесительного сосуда ■ Дозирование объема в графитовую трубку ■ Промывка дозирующей трубки ■ Опорожнение смесительного сосуда ■ Промывка и опорожнение смесительного сосуда
Тест. программа 3	Погружение в каждую позицию

Тест на ошибки

Автосамплер проверяется на наличие ошибок датчика. При возникновении одной из перечисленных здесь ошибок любое измерение прерывается (соответствующее сообщение об ошибке отображается на экране). Запуск теста на ошибки выполняется кнопкой **Тест**. Успешное проведение теста обозначается зеленым контрольным кружком; отрицательный результат теста обозначается красным кружком.

Если тест не пройден, возможны следующие причины ошибки:

Ошибка	Описание
Уровень промыв. бутылки	Только MPE 60 Слишком низкий уровень заполнения в емкости для промывочного раствора
Уровень бутылки с разбавителем	Только MPE 60 Слишком низкий уровень заполнения в емкости для раствора для разбавления
Трекер/Ротатор	Шарнирный привод рычага автосамплера и вращающий привод лотка неисправны.
Идентифик. лотка	Лоток для проб не распознается.
Дозир. шприц (привод)	Ошибка дозирующего устройства.
Дозир. шприц (объем)	Дозирующим устройством был забран слишком большой объем.

Настр. смплера

Щелчок по кнопке **Настр. смплера** открывает окно поднастройки автосамплера.

См. также

📖 Регулировка автосамплера [► 144]

9.5.2.6 Обзор позиций автосамплера для техники графитовой печи

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

Чтобы открыть окно **Автосамплер / Позиции**, щелкните по значку .

Для просмотра можно выбрать режимы **все позиции** или **только спец. позиции**.

Примечание: для просмотра этого окна в текущем методе должна быть загружена хотя бы одна линия.

9.5.3 Автосамплер твердых проб

Для выполнения автоматизированной процедуры анализа твердых проб используется SSA 600. Окно **Тверд. сэмплер** содержит следующие функции:

- Функциональный тест
- Выравнивание графитовой печи

Автосамплер для твердых проб можно использовать с функцией жидкого дозирования и без нее, поэтому функциональный тест и настройка зависят от автосамплера, указанного в методе.

Чтобы открыть окно **Тверд. сэмплер**, щелкните по значку  или выберите пункт меню **Разраб. метода | Автосамплер**.

Возврат платформ для проб

Все платформы для проб, расположенные на разных позициях автосамплера или в графитовой печи, можно перенести обратно на лоток для проб.

- ▶ В окне **Автосамплер** выбрать **Переустан..**
 - ✓ Платформы будут перенесены обратно на свои места на лотках для проб.

Инициализация автосамплера

Инициализация автосамплера обычно выполняется в начале работы с ААС в окне **Быстрый старт**. Повторная инициализация может потребоваться, если автосамплер утратил свою ориентацию, например, из-за механического удара или при нажатии кнопки останова на автосамплере.

- ▶ В окне **Автосамплер** выбрать **Инциализ..**
 - ✓ Посредством инициализации устанавливается соединение между автосамплером, ААС и ПК.

Выравнивание захвата относительно графитовой печи

Захват автосамплера необходимо выровнять относительно печи с программной поддержкой. Для этого потребуются приспособление для настройки из комплекта поставки автосамплера.

- ▶ В окне **Автосамплер** выбрать **Настр.** и следовать указаниям на экране.
 - ✓ После завершения процедуры настройки автосамплер выровнен относительно печи.

Подробное описание процедуры настройки приведено в руководстве по эксплуатации "Автосамплер для твердых проб SSA 600".



ПРИМЕЧАНИЕ

Короткое замыкание на устройстве в результате неправильного подключения автосамплера

Выключайте ААС, прежде чем подключить к нему автосамплер. Иначе возможны ошибки соединения или повреждение интерфейса.

9.5.3.1 Функциональная проверка автосамплера для твердых проб

Функцию подключенного автосамплера можно проверить в окне **Автосамплер / Функция. тест**.

Откройте окно **Автосамплер / Функция. тест**, щелкнув по значку .

Доступны следующие опции функциональной проверки:

Опция	Описание
Статус/Кнопки	Отображение состояния автосамплера и кнопки автосамплера, нажатой с момента последнего запроса, соответствующим цветом (зеленый, оранжевый, красный) С помощью кнопки Обновление выполняется повторный запрос состояния или обновление отображения кнопок.
Перемест. в позицию	Выбор и перемещение в позицию из списка Поз. При этом не выполняется подъем или опускание платформы.
Поверн. лоток	Поворот лотка для проб на выбранную позицию
Транспорт	Перенос платформы из стартовой позиции (из) в позицию назначения (к) Если активирована кнопка Взять платформу , захват поднимает платформу. Если активирована кнопка Освободить платф. , захват опускает платформу в место назначения.
Захват	Открытие и закрытие захвата Опускание канюли
Весы	Определение веса платформы, расположенной на лотке в установленной позиции (Поз.) Взвешив. с тарой Перед взвешиванием платформы выполняется тарирование весов. #1 показывает вес тары. #2 содержит вес платформы (с дозированной пробой, если есть). Внутр. калибровка Во время этой калибровки заново определяется внутренняя калибровочная кривая весов. Для этого сначала выполняется повторная инициализация весов, определяется нулевая точка и затем взвешивается внутренний вес. Калибровочная кривая весов рассчитывается из точки нуля и внутреннего веса.
Круг	Автосамплер перемещает 2 платформы (позиции 1 и 2) туда и обратно между лотком для проб, весами и печью. Количество циклов транспортировки можно задать в поле Циклы .

9.5.3.2 Настройка автосамплера для твердых проб

Окно **Тверд. самплер / Настройка** содержит следующие функции:

- Контроль и настройка перемещения в отдельные позиции
- Выравнивание автосамплера относительно графитовой печи

- Автосамплер с дозирующим устройством: Автоматическая коррекция глубины для забора матричных модификаторов и специальных жидких проб
- Тестирование жидкого дозирования

Чтобы открыть окно **Тверд. самплер / Настройка**, щелкните по значку .

В этом окне доступны следующие опции:

Опция	Описание
Поз. настройки	Выбор позиции на автосамплере
Кнопки в области Настр. позицию	Выравнивание захвата относительно выставленной позиции
Открыть захват/Закрыть захват	Открытие и закрытие захвата с программным управлением, например, для смены наконечника захвата

Только автосамплер с функцией жидкого дозирования:

Опция	Описание
Ниже канюля	Опускание канюли
Группа Автоматич. корр. глуб.	Автоматическая коррекция глубины погружения в вials для проб
Промывка	Промывка дозирующей трубки с предварительно заданным и подтвержденным кнопкой  количеством циклов промывки
Тест жидк. дозир.	Проверка жидкого дозирования
Сменить шприц диспенсера	Перемещение поршня шприца дозатора вниз для замены

Проверка и настройка отдельных позиций

- ▶ В таблице **Поз. настройки** выбрать позицию.
- ▶ В области **Настр. позицию** выбрать **Переместить к**. Автосамплер переместится на выбранную позицию.
- ▶ Поместить платформу в эту позицию и проверить положение платформы.
- ▶ Откорректировать позицию кнопками в области **Настр. позицию**.
- ▶ Сохранить измененные настройки кнопкой **Сохр.**.

Выравнивание захвата относительно графитовой печи

Захват автосамплера необходимо выравнивать относительно печи с программной поддержкой. Для этого потребуются приспособление для настройки из комплекта поставки автосамплера.

- ▶ В окне **Автосамплер** выбрать **Настр.** и следовать указаниям на экране.
 - ✓ После завершения процедуры настройки автосамплер выровнен относительно печи.

Подробное описание процедуры настройки приведено в руководстве по эксплуатации "Автосамплер для твердых проб SSA 600".

Промывка системы

Только автосамплер с функцией жидкого дозирования:

При промывке системы растворитель набирается из бутылки и прокачивается по всему пути через дозирующее устройство к дозирующей трубке и выводится в промывочный сосуд.

- ▶ В текстовом поле **Циклы промывки** задать количество повторов.
- ▶ Сохранить, нажав кнопку .
- ▶ Запустить процесс промывки кнопкой **Промывка**.

Автоматическая коррекция глубины для дозирующего устройства

Обычно коррекция глубины в автосамплере твердых проб производится автоматически, т.е. при увеличении объема, забранного из сосудов для дозирования, глубина погружения регулируется соответствующим образом. Начальные объемы, отличающиеся от установленных в методе, можно откорректировать в этом окне. Настройки выполняются аналогично настройкам автосамплера для техники графитовой печи.

См. также

📄 Автоматическая коррекция глубины для автосамплеров для техникой графитовой печи [► 149]

10 Управление данными

В данном разделе приведена следующая информация по следующим темам:

- Функции печати
- Управление методами, последовательностями и ID проб
- Управление относящимися к устройству данными
- Определение единиц концентраций и содержания
- Управление часто используемыми базовыми растворами и пробами КК

10.1 Информация о функциях печати

Программное обеспечение 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 используются шаблоны отчетов. По умолчанию установлен набор шаблонов отчетов. При необходимости шаблоны отчетов можно адаптировать согласно индивидуальным требованиям с помощью конструктора отчетов Report-/Print module List & Label.

10.1.1 Печать данных результатов

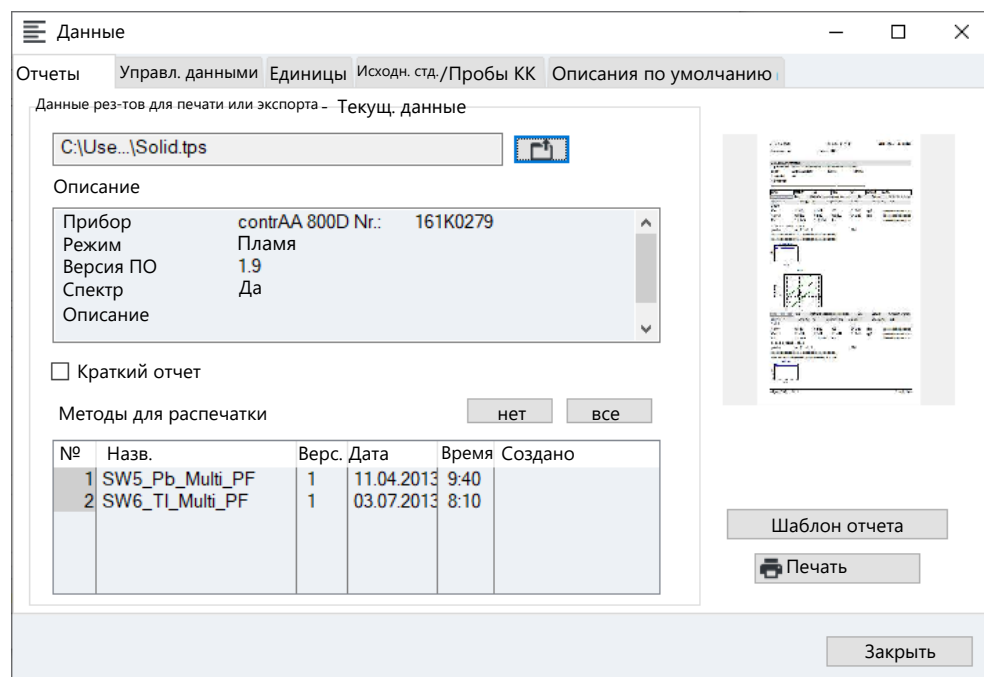
Программное обеспечение предоставляет различные возможности вывода на печать данных измерений:

- 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 **Общий вид**. 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.

- ▶ Открыть окно **Данные / Отчеты**, щелкнув по значку . Или открыть окно, перейдя в пункт меню **Прочее | Данные или Файл | Печать | Отчет**.
- ✓ Отображаются имя текущего файла, информация о файле (список Описание), а также все версии методов, которые использовались для создания текущего файла результата.



- ▶ Чтобы распечатать сохраненный файл, выбрать  и в стандартном окне **Открыть** выбрать нужный файл.
- ▶ В таблице щелчком мыши отметить все версии методов, которые необходимо распечатать.
Щелчок мыши при нажатой клавише Ctrl или Shift позволяет отметить несколько версий методов. При выборе значения **все** будут выбраны все версии. Выбор значения **нет** снимает все выделения.
- ▶ Щелчком по кнопке **Печать** открыть окно **ASpect CS Отчет**.
- ▶ В списке **Вывод на** выбрать формат вывода. Выбрать **Параметры** и задать специальные параметры формата вывода.
- ▶ Установить флажок в поле **Сохранить настройки**, если нужно сохранить выбранный носитель данных по умолчанию для этого шаблона печати.
- ▶ Запустить процесс печати щелчком по кнопке **Печать**.
✓ Вывод будет осуществлен на выбранный носитель.

Примечание:

Используйте для вывода на печать настройку **Предварительный просмотр**. При нажатии кнопки **Печать** страницы для печати 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.

- ▶ В главном окне выбрать вкладку результатов, которую необходимо распечатать.
- ▶ Выбрать пункт меню **Файл | Печать | Активн. окно**.
Откроется окно **Формат отчета с результатами**.
- ▶ Выбрать объем печати.
полный вывод: результаты с графиками сигнала
компактный вывод: результаты в режиме компактного просмотра
- ▶ Продолжить, как описано выше в разделе "Печать полного отчета".

Примечание: если в окне **Формат отчета с результатами** установить флажок в поле **Всегда использовать этот тип отчета о результатах**, при следующем выводе на печать результатов это окно больше не будет показываться, и автоматически будет использоваться последний тип отчета результатов. Снова сбросить эту настройку можно в окне **Опции / Вид**.

Печать выбранных файлов

- ▶ В главном окне перейти во вкладку **Общий вид**.
- ▶ В нижней области этой вкладки щелкнуть по значку  или выбрать пункт меню **Файл | Печать | Активн. окно**.
- ▶ Откроется окно **Печать Общий вид**.
- ▶ Выделить все необходимые линии и параметры для печати щелчком мыши и нажать **ОК** для подтверждения.
Откроется окно **ASpect CS Отчет**.
- ▶ Продолжить, как описано выше в разделе "Печать полного отчета".

См. также

 Возможности отображения [▶ 170]

10.1.2 Печать других параметров анализа и установок

Можно распечатать следующие параметры и установки анализов:

- Метод
- Последовательность
- Файлы результатов и обзор результатов
- ID пробы
- КК (Вкладки КК)
- Калибровка
- Позиции автосамплера

Печать параметров производится из соответствующего окна.

- ▶ Открыть/активировать окно в интерфейсе программы.
- ▶ В окне выбрать .
Или выбрать команду меню **Файл | Печать | Активн. окно**.
✓ Откроется окно **ASpect CS Отчет**.
- ▶ В списке **Вывод на** выбрать формат вывода. Выбрать Опции и задать другие параметры формата вывода.
- ▶ Запустить процесс печати щелчком по кнопке **Печать**.

10.1.3 Адаптация шаблонов отчета

Использование режима разработки отчета

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

- ▶ Выбрать пункт меню **Файл | Отчет режим разработки**.
- ▶ Открыть окно, шаблон отчета которого необходимо изменить.
- ▶ Выбрать пункт меню **Файл | Печать | Активн. окно**.
✓ Откроется конструктор отчетов.
- ▶ Внести изменения и сохранить шаблон отчета.

- ✓ Шаблон изменен и теперь его необходимо привязать к соответствующему содержанию печати (см. в "Управление шаблонами отчетов").

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 о работе с конструктором отчетов и его функциям приведена в руководстве `designer_deu.pdf` / `designer_eng.pdf` на установочном диске программы.

Окно Шаблон отчета

В окне **Шаблон отчета** можно редактировать шаблоны и назначать их окнам программного обеспечения. Одному окну можно назначить несколько шаблонов с помощью файловой маски, из которой при запуске печати выбирается нужный шаблон. Имена предлагаемых стилей при этом следует выбирать таким образом, чтобы они могли определяться с помощью шаблона поиска.

- ▶ Открыть окно **Данные / Отчеты**, щелкнув по значку .
- ▶ Щелчком по **Шаблон отчета** открыть одноименное окно.

Шаблон должен быть готов для следующих окон:

Имя	Описание
Рез-ты	Содержание вкладки Результат в главном окне
Результаты компактно	
Рез-ты (Общий вид)	
Калибровка	Окно Калибровка : калибровка анализа
Метод	Окно Метод : параметры метода
Метод/Рез-ты	Весь отчет
Назв. пробы	Окно Назв. пробы / Инф. о пробе : файлы информации о пробе
Поз. сэмплера	Окно Автосамплер / Позиции : заполнение автосамплера
Карта КК	КК : данные вкладок КК
Информ. о пробе КК	Окно Автосамплер / Информ. о пробе КК : информационные данные проб КК

Имя	Описание
Таблица SSA600	Содержание вкладки Тверд. в главном окне
Послед-ть	Окно Послед-ть : последовательность:

Изменение назначений	Новый/отредактированный шаблон отчета необходимо снова назначить соответствующей функции печати. ▶ Отметить в списке окно, шаблон отчета которого необходимо изменить. ▶ Щелчком по кнопке Модиф. открыть диалоговое окно для назначения файлов. ▶ Назначение одного шаблона отчета: активировать параметр Использ. файл шаблона отчета (*.lst) , нажать на значок  и выбрать файл шаблона. ▶ При запуске печати предлагать несколько шаблонов одновременно: активировать параметр Разрешить выбор файла и ввести имя маски с использованием шаблона поиска в текстовом поле. ▶ Подтвердить настройки кнопкой ОК. ✓ Новый шаблон отчета отображается в окне Шаблон отчета .
Редактирование шаблона отчета	Здесь можно выбрать шаблон отчета и отредактировать его в конструкторе отчетов. ▶ Щелчком мыши выбрать в списке шаблон отчета. ▶ Открыть окно конструктора отчетов, выбрав Ред. . ✓ Вы можете отредактировать шаблон отчета. Подробная информация о конструкторе отчетов приведена в файле Designer.pdf на установочном диске.
Восстановление стандартных настроек	Можно восстановить настройки, которые были заданы при установке программы. ▶ Нажать кнопку Устан. по умолч..

10.2 Управление всеми типами файлов

В программном обеспечении накапливаются следующие данные:

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

Вышеприведенные данные собраны в окне **Данные /Управл. данными** . Окно открывается по щелчку по кнопке  или при выборе пункта меню **Прочее | Данные**.

10.2.1 Управление методами и последовательностями

Методы и последовательности сохраняются в базе данных отдельно. База данных методов получает обозначение "method.tps". База данных последовательностей получает обозначение sequ.tps. Методы и последовательности обозначаются в дальнейшем тексте настоящего раздела как «записи данных».

Элементы в окне базы 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
Ground Cd Zn Cu	2	27.07.2021	14:39	KK	
SW-Test_Scraper	1	08.01.2021	8:34	KK	admin

Сорт. по: Назв. / Верс. ☒ Увеличение ☐ Уменьшение

☒ Только текущ. версия ☒ Сохранить данные калибровки

Описание

OK Отмена

Опция/отображение	Описание
Назв.	Ввод имени метода или последовательности или отображение выбранного метода или последовательности.
Кат.	Дополнительный идентификатор для поиска метода/последовательности в базе данных В качестве обозначения категории можно ввести максимально 3 символа. Список можно ограничить, введя название категории в поле Кат. . Если нужно показать наборы данных всех категорий, удалите ввод в поле Кат. .
Список наборов данных	Сохраненные наборы данных с именем, версией, датой, временем, категорией и пользователем
Сорт. по:	Упорядочивание списка по различным признакам В зависимости от выбранной опции, упорядочить список можно по возрастанию или по убыванию.
Описание	Ввод или просмотр дополнительных комментариев, например, по использованию наборов данных. Создавать предустановленные комментарии можно в окне Данные / Описания по умолчанию .
Только текущ. версия	При создании нескольких 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. 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.

Примечание

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

Открытие системы управления данными

► Открыть окно **Данные / Управл. данными** , щелкнув по значку  .

	▶ В списке Тип выбрать тип набора данных для обработки: Метод или последовательность.
Экспорт записей данных	Экспорт позволяет предоставлять наборы данных другим устройствам/компьютерам. Вы можете одновременно экспортировать несколько записей данных в общий файл. Обозначение файлов экспорта получают следующие расширения: Записи данных метода – .met, записи данных последовательности – .seq. ▶ Открыть окно базы данных, выбрав Экспорт данных спектра . ▶ Выделить наборы данных мышью и выбрать Экспорт данных спектра . ▶ В стандартном окне Сохранить как ввести имя файла и нажать кнопку Сохранить . При этом появится окно базы данных с экспортированными файлами. ▶ Закрыть окно базы данных, нажав кнопку Закрыть .
Импорт записей данных	Импорт позволяет загружать в базу данных записи данных с других устройств/компьютеров. Файл импорта может содержать несколько наборов данных, из которых можно выбрать тот, что необходимо загрузить. ▶ Щелчком по кнопке Импорт открыть окно Выбор файлов для импорта . ▶ Выбрать файл для импорта и нажать 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. ▶ В окне базы данных выделить мышью наборы данных для импорта и нажать кнопку Импорт . Наборы данных будут импортированы в базу данных. Если метод/последовательность с таким же именем уже существует, будет создана новая версия набора данных. В окне базы данных появляются текущие версии имеющихся записей данных. ▶ Закрыть окно базы данных, нажав кнопку Закрыть . ✓ Теперь импортированные наборы данных можно использовать в программе.
Удаление записей данных	Используя функцию удаления, можно удалить записи данных из базы данных. ▶ Открыть окно базы данных, выбрав Удалить . ▶ Выделить наборы данных для удаления. ▶ Нажать 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	Или: открыть окно базы данных для удаления наборов данных можно, выбрав пункт меню Файл Удалить Метод или Файл Удалить Последовательность . Затем действуйте, как описано выше.

10.2.2 Управление данными результатов

Во время измерения данные результатов сохраняются в базе данных. При каждом запуске последовательности создается новый файл базы данных, однако измерения можно также добавлять к уже существующему файлу. Данные результатов сохраняются с расширением .TPS.

Дополнительно в ходе измерений генерируется файл спектров с таким же именем TPS-файла и расширением .SPK. Этот файл содержит измеренные спектры и требуется для просмотра и анализа спектров в окне **Спектр** . Вся другая информация,

необходимая для анализа и оценки, сохранена в TPS-файле. При добавлении измерений к существующему TPS-файлу в соответствующий SPK-файл тоже добавляются спектры. При управлении в окне **Данные** TPS-файл импортируется, копируется или удаляется одновременно с SPK-файлом.

- ▶ Открыть окно **Данные / Управл. данными**, щелкнув по значку .
- ▶ В списке **Тип** выбрать пункт **Рез-ты**.

Импорт данных результатов

Данные результатов можно импортировать в программное обеспечение. В процессе импорта данные включаются в папку результатов активной техники атомизации в файловой структуре программного обеспечения.

- ▶ В окне **Быстрый старт** выбрать технику атомизации, для которой нужно импортировать данные.
- ▶ В окне **Данные / Данные** выбрать **Импорт**.
Откроется окно **Выбрать файлы результатов**.
- ▶ Выделить TPS-файлы мышью и нажать кнопку **Откр.**
- ▶ Выбрать подпапку для сохранения результатов и нажать кнопку **ОК**.
✓ TPS-файлы и соответствующие SPK-файлы (при наличии) будут скопированы в папку результатов активной техники атомизации.

Экспорт данных результатов

С помощью этой команды можно копировать один или несколько файлов результатов в другую папку.

- ▶ В окне **Данные / Данные** выбрать **Экспорт**.
Откроется окно **Экспорт** с обзором имеющихся TPS-файлов. Файлы представлены в виде списка с именем, размером и временем последнего изменения.
- ▶ Выделить щелчком мыши TPS-файлы.
- ▶ Выбрать **Экспорт – Поиск папки**.
- ▶ Выбрать папку назначения и нажать **ОК** для подтверждения.
✓ TPS-файлы и SPK-файлы копируются в папку назначения.

Удаление файлов результатов

Вы можете удалить данные результатов навсегда.

- ▶ В окне **Данные / Данные** выбрать **Удалить**.
Откроется окно **Экспорт** с обзором имеющихся баз данных результатов.
- ▶ Выделить щелчком мыши TPS-файлы.
- ▶ Нажать кнопку **Удалить** и подтвердить появившийся контрольный вопрос об удалении файлов, нажав **ОК**.
✓ Данные будут окончательно удалены.

Поиск результатов отдельных проб

Можно осуществлять поиск отдельных проб по известным именам проб в базах данных.

- ▶ В окне **Данные / Данные** выбрать **[Поиск пробы]**.
Или выбрать пункт меню **Прочее | Поиск пробы**.
Откроется окно **Поиск пробы**.
- ▶ В поле **Тип пробы** ввести имя пробы.
Если введенная последовательность символов является частью имени, установить флажок в поле **Поиск подстроки**.
- ▶ Ограничить время измерения, установив флажок в поле **Дата**.

- ▶ Нажать кнопку **Старт**.
В таблице отобразятся все результаты, содержащие пробы с введенным обозначением.
- ▶ Чтобы открыть один из показанных файлов результатов, выделить файл в списке и нажать 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 анализатором. Чтобы использовать файл линий/длин волн на другом компьютере:

- ▶ Открыть окно **Данные / Управл. данными** , щелкнув по значку  .
- ▶ В списке **Тип** выбрать параметр **Линии/файл длины волны** и нажать кнопку **Экспорт** .
- ▶ Выбрать папку для сохранения файла и нажать кнопку **ОК** .
 - ✓ Файл с именем lines.dat сохранен в выбранной папке.

10.2.4 Управление моделями коррекции

Модели коррекции используются для коррекции фона наложений спектра аналита компонентами матрицы. Их можно переносить с одного устройства на другое. Файлы моделей коррекции имеют расширение .MOD.

- ▶ Открыть окно **Данные / Управл. данными** , щелкнув по значку  .
- ▶ В списке **Тип** выбрать пункт **Корр. модели** .

Импорт моделей коррекции

Команда позволяет импортировать модели коррекции в программное обеспечение.

- ▶ Нажать кнопку **Импорт** .
- ▶ Выбрать модель коррекции MOD и нажать кнопку **Откр.** .
Откроется окно **Импорт Корр. модель** .
- ▶ Нажать кнопку **Импорт**.
 - ✓ Модель коррекции сохраняется в базе данных.

Экспорт моделей коррекции

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

- ▶ Нажать кнопку **Экспорт данных спектра**.
- ▶ В окне **Экспорт Корр. модель** выделить мышью модель. Можно выбрать несколько элементов.
- ▶ Нажать кнопку **Экспорт**.
- ▶ В окне **Сохранить как** ввести имя и папку хранения и нажать кнопку **Сохранить** .
 - ✓ Файл с моделью коррекции будет сохранен.

Удаление моделей коррекции

Эта команда позволяет удалять ненужные модели коррекции.



ПРИМЕЧАНИЕ

В результате удаления моделей коррекции методы могут стать непригодны для использования

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

- ▶ Нажать кнопку **Удалить**.
- ▶ В окне **Корр. модели** выделить модель.
- ▶ Нажать кнопку **Удалить**.
 - ✓ Модель коррекции удалится из базы данных.

10.2.5 Удаление корректирующих спектров

Ненужные корректирующие спектры можно удалить из базы данных.

- ▶ Открыть окно **Данные / Управл. данными**, щелкнув по значку .
- ▶ В списке **Тип** выбрать параметр **Корр. спектр** и нажать кнопку **Удалить**.
- ▶ В окне базы данных **Корр. спектр** выделить спектр и нажать кнопку **Удалить**.
 - ✓ Проверяется, используется ли спектр в модели коррекции. Если нет, корректирующий спектр удаляется.

10.2.6 Импорт шаблонов отчета

Шаблоны отчетов печати, которые были созданы на сторонних устройствах, необходимо импортировать в программное обеспечение посредством системы управления данными.

- ▶ Открыть окно **Данные / Управл. данными**, щелкнув по значку .
- ▶ В списке **Тип** выбрать параметр **Шаблон отчета** и нажать кнопку **[Импорт]**.
- ▶ В окне **Откр.** выбрать файл отчета LST и нажать кнопку **Откр.**.
 - ✓ Шаблон отчета импортирован в программное обеспечение. Теперь назначьте шаблон отчета содержимому печати в окне **Данные / Отчеты**.

См. также

-  Адаптация шаблонов отчета [▶ 159]

10.2.7 Управление рабочими листами

Управление рабочими листами осуществляется в окне **Данные / Управл. данными**. Можно выполнить импорт и экспорт рабочих листов. Опционально можно указать сохраненные методы и последовательности. Ненужные рабочие листы можно удалять. Рабочие листы имеют расширение .WST.

- ▶ Открыть окно **Данные / Управл. данными**, щелкнув по значку .
- ▶ В списке **Тип** выбрать параметр **Таблица**.

- Импорт рабочих листов
- ▶ Нажать кнопку **Импорт**.
 - ▶ В окне **Импортир. раб. табл.** выбрать **Импорт**. Для импорта методов и последовательности активировать параметр **включая послед-ть и метод(ы)**.
 - ▶ В окне **Импортир. раб. табл.** выбрать рабочий лист и нажать кнопку **Откр.**.
 - ✓ Рабочий лист будет импортирован.
- Экспорт рабочих листов
- ▶ Нажать кнопку **Экспорт**.
 - ▶ В окне **Экспортир. раб. табл.** выделить рабочий лист щелчком мыши. Для экспорта методов и последовательности активировать параметр **включая послед-ть и метод(ы)**.
 - ▶ Нажать кнопку **Экспорт**.
 - ▶ В окне **Сохранить как** выбрать папку и имя файла экспорта и нажать кнопку **Сохранить**.
 - ✓ Рабочий лист будет экспортирован.
- Удаление рабочего листа
- ▶ Нажать кнопку **Удалить**.
 - ▶ В окне **Удалить** выделить рабочий лист и нажать кнопку **Удалить**.
 - ✓ Рабочий лист будет удален.

10.3 Управление единицами измерения

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

- ▶ Открыть окно **Данные / Единицы**, щелкнув по значку .

Таблица содержит обзор доступных единиц измерения.

Столбец таблицы	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 Для отдельных единиц необходимо ввести коэффициент.
Тип	тверд.: единица измерения для твердых проб жидк.: единица измерения для жидких проб (раствор)

Кнопки управления отдельными записями.

Экранная кнопка	Описание
Добавить	Добавление строки в конец списка
Вставка	Добавление строки над выбранной строкой в списке
Удалить	Удаление только заданных пользователем единиц измерения. Предпочтительные варианты удалить нельзя.
Сохранить	Сохранение изменений и введенных значений

10.4 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. std./ Пробы КК**. Можно добавлять записи в базу данных, удалять их или редактировать. Стандартные маточные растворы и контрольные пробы доступны в разработке метода.

- ▶ Открыть окно **Данные / Исходн. std. / Пробы КК**, щелкнув по кнопке .
- ▶ Выбрать параметры **Исходн. стандарт** или **Пробы КК**.
- ▶ В таблице ввести или отредактировать параметры маточного стандартного раствора:

Столбец	Описание
Назв.	Наименование стандарта/пробы КК Макс. 20 символов
Един.	Единица измерения стандарта/пробы КК
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 щелчком по кнопке Концентрация открыть одноименное окно и в нем назначить концентрацию каждому элементу.

Кнопки управления записями:

Экранная кнопка	Описание
Добавить	Добавление строки в конец списка
Вставка	Добавление строки над выбранной строкой в списке
Удалить	Удаление выделенной строки
Сохран.	Сохранение изменений и введенных значений
Концентрация	Открытие области ввода для элемента и концентрации выбранной строки

10.5 Создание предварительно заданных комментариев

Для следующих процессов 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 **Примечан.**.

Часто используемые комментарии уже сохранены в программе. Можно создавать новые комментарии, редактировать их или удалять.

- ▶ Открыть окно **Данные / Описания по умолчанию**, щелкнув по значку .
- ▶ Выбрать необходимый процесс в списке **Выбрать категорию**.
- ▶ Щелчком по кнопке **Ред. шаблон** открыть список комментариев.

- ▶ Создать новый комментарий, нажав кнопку **Нов.** .
В окне **Ввести описания по умолчанию** ввести новый комментарий.
Поле **Назв.** : имя, с помощью которого можно будет выбрать комментарий.
Поле **Текст**: ввод собственного комментария.
- ▶ Нажатие кнопки **Модиф.** позволяет отредактировать примечание, кнопки **Удалить** – удалить примечание из раскрывающегося списка.

10.6 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.**.

Ред.	
Копир. только видим. столб.	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.

- ▶ Выделить пробы в таблице списка результатов.
Удерживая нажатой клавишу Ctrl или Shift, выберите пробы, нажав на строку пробы.
Выделить все строки проб можно с помощью пункта меню **Ред. | Выдел.все.**
- ▶ Если нужно также скопировать строку-заголовок, активировать пункт меню **Ред. | Загол. столбца** .
- ▶ Выбрать соответствующий пункт меню, чтобы скопировать результаты в буфер обмена.
 - ✓ Теперь результаты можно вставить в приложение, например, в редактор электронных таблиц.

Копирование графиков в виде снимка экрана

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

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

11 Параметры - настройка ASpect CS

В окне **Опции** выполняются следующие настройки, которые действительны для всей работы программного обеспечения:

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

Произведенные настройки сохраняются после выхода из программы и ее перезапуска.

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

Сброс настроек

Кнопка **Устан. по умолч.** сбрасывает все параметры и сохраненные положения окон на значения по умолчанию.

11.1 Возможности отображения

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

Открыть окно **Опции / Вид** можно с помощью пункта меню **Прочее | Опции**.

Элементы в окне Опции / Вид

Опция	Описание
Показ. панель инстр.	Отображение панели инструментов с кнопками для процедуры измерения.
Показ. панель икон.	Отображение строки символов с крупными значками для быстрого доступа и выбор положения строки символов. Положение строки символов также можно изменить, перетаскив строку мышью, при этом настройка не будет сохранена до следующего запуска.
Скрыть окно событий	Не показывать окна событий (например, время задержки). Вместо этого сообщения отображаются в строке состояния главного окна.
Кал. табл. столбец за столбцом	Перевернутое отображение калибровочной таблицы для определения стандартов. Отдельные калибровочные стандарты расположены по столбцам, а выбранные аналитические линии – по строкам.
Скрывать окно рез-тов автоматич.	Окна результатов скрываются при открытии выпадающих списков (например, окно Метод) , чтобы исключить перекрытие окон. После закрытия выпадающих списков окна результатов отображаются снова.
Показ. остат. файл лампы (Спектрометр)	В окне Спектрометр отображается продолжительность работы ХВО-лампы (только для блоков питания лампы, начиная с версии 4). При запуске программы выводится сообщение о превышении гарантированного ресурса 1000 часов.
Показывать указание по рекомендуемому виду пламени	Пламенная атомизация: при проверке параметров метода проверяется, используется ли для анализа элемента рекомендуемый в справочнике по элементам вид пламени. Если вид пламени отличается, выводится соответствующее сообщение.
Показ. инструм.	Над кнопками и заголовками столбцов в таблицах появляются небольшие вспомогательные тексты (всплывающие подсказки).
Сигнал нет и Фон	Выбор цветов сигнала для графического представления. Щелчок по кнопке  открывает окно выбора цвета.

Опция	Описание
Научный режим	Активация отображения спектров. Если этот параметр отключен, функции представления и редактирования данных спектров недоступны.
Разрешить хран. экрана	Включение в перерывах экранной заставки Windows.
Спрашивать о типе отчета о результатах (краткий или полный) при печати	При печати окон результатов в пункте меню Файл Печать Активн. окно можно выбрать полный или компактный отчет. Щелчок по этой кнопке всегда сбрасывает выбор Всегда использовать этот тип отчета о результатах , что позволяет снова выбрать тип отчета.

11.2 Пути сохранения

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

Открыть окно **Опции / Папка** можно с помощью пункта 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
Экспорт/Импорт	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.
Инф. о пробе	Путь по умолчанию для импорта и экспорта данных метода и последовательностей и экспорт данных результатов в виде файлов CSV Этот путь может быть изменен. Для выбора новой папки щелкните по значку  . При экспорте и импорте также можно выбрать другой путь.
Результаты	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 для запрограммированных данных

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

11.3 Параметры ASCII/CSV-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.

Открыть окно **Опции / ASCII/CSV экспорт** можно с помощью пункта меню **Прочее | Опции**.

Функции в окне Опции /
ASCII/CSV экспорт

Опция	Описание
Десятичн. разделитель	Определяет разделитель десятичных разрядов.
Разделитель списка	Указывает символ, с помощью которого разделены элементы списка.
Экспорт рез-тов	все Экспорт всей таблицы результатов. только выдел. поля Заданный пользователем экспорт результатов. Щелкнуть по кнопке  и в окне Выбор поля выделить мышью все поля/столбцы для экспорта.

Уведомление по электронной почте

Кнопка **E-mail-уведомление** открывает окно настройки интерфейса электронной почты. Этот интерфейс автоматически рассылает электронные сообщения в конце процесса анализа или при его прерывании в результате неисправности.

Опция	Описание
Сервер (SMTP)	Имя/ адрес SMTP-сервера
Порт	Номер порта, используемый для SMTP (обычно порт 465 или 587).
Адреса E-Mail	Ваш полный адрес электронной почты
Наимен. счета	Имя пользователя для авторизации на SMTP-сервере
Пароль	Идентификатор для авторизации на SMTP-сервере. Идентификатор сохраняется в зашифрованном виде.
Адреса получателей	Можно внести до трех получателей электронного сообщения.
Активир. уведомление e-mail	Если активировано, по окончании процесса анализа всегда или только при возникновении ошибок автоматически будут рассылаться электронные сообщения указанным получателям. В случае преждевременного прерывания работы по ошибке сообщается причина ошибки.
Послать тест. e-mail	Отправка тестового электронного сообщения указанным получателям.

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**.

Открыть окно **Опции / ASCII/CSV экспорт** можно с помощью пункта меню **Прочее | Опции**.

Экспорт данных результатов

Флажок в поле **Послед. ASCII экспорт данных результатов** активирует функцию экспорта. Данные сохраняются по заданному по умолчанию пути для экспорта/импорта (окно **Опции / Папка**).

Можно выбрать следующие имена файлов:

Опция	Описание
Имя метода.csv	Имя файла соответствует обозначению метода. Данные сохраняются по заданному по умолчанию пути для экспорта/импорта (окно Опции / Папка).
Имя файла результатов.csv	Имя файла соответствует обозначению файла результатов. Данные сохраняются по заданному по умолчанию пути для экспорта/импорта (окно Опции / Папка).
другое	Имя файла и путь к нему можно задать произвольным образом. Данные будут постоянно записываться в этот файл, пока не будет задано новое имя или не будет выбрана другая опция для наименования. Щелкнуть по значку  и в окне Сохранить как ввести папку для хранения и имя файла.
Создать отдельный файл для каждой пробы (общее число строк и имя пробы добавляется к имени файла)	Номер строки списка результатов и обозначение пробы добавляются к имени файла. Недопустимые символы заменяются символами нижнего подчеркивания (например, Test methode-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-Sample-AI309-02.csv.

11.5 Опции для процесса анализа

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

Открыть окно **Опции / Пос-ть анализов** можно с помощью пункта меню **Прочее | Опции**.

Отмена последовательности после следующих ошибок

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

Опция	Описание
Отклонение оптич. системы	Останавливается при ошибочной настройке длины волны (Некоррекция).
Неправ. калиб. функция	Останавливается, если вычисление калибровочной функции невозможно.

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.

Окно дисплея

В ходе процесса анализа могут появляться окна просмотра с кривыми сигнала и другой информацией по измерению.

Опция	Описание
Диагр. сигнал.	Зависимая от времени кривая сигнала измерения
Диагр. спектра	Записанная спектральная область
Бар-график	Столбцовая диаграмма измеренных значений оптической плотности или эмиссии
Шкалирование макс. знач. сигнала	Установка максимального значения по оси значений измерения для отображения кривой сигнала. Этот параметр можно также установить с помощью функции меню Вид Шкала .
Окно отчета	Информация о статусе используемого атомизатора
Конц.пробы на кал.кривой	Текущая калибровочная и рекалибровочная кривая После измерения пробы вычисление неправильной концентрации по данным оптической плотности/эмиссии указывается дополнительными красными линиями. При дополнительной калибровке отображается пересчитанная калибровочная кривая.
Камера печи	Изображение камеры печи с графитовой трубкой Таким образом можно непосредственно наблюдать за расположением пробы в печи и процессом сушки. При достижении температуры открывания заслонки камера печи отключается.

Прочее

Опция	Описание
Уже сохран. спектр	Данные спектров всегда сохраняются при измерении, независимо от параметров метода (окно метод / Вывод).
Присоед. дату/ время к имени файла рез-тов	При запуске измерения актуальная дата и экранное время автоматически добавляются 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.
Извлечь компоненты при охлаждении	При охлаждении графитовой трубки автосамплер выполняет забор следующей пробы. Эту опцию можно использовать для ускорения последовательности измерения.
Звук после окончания фазы охлаждения	В конце фазы охлаждения графитовой трубки раздается звуковой сигнал.
Стоп после перегрева трансформатора	Активировано: при перегреве трансформатора для режима графитовой трубки программа измерения останавливается и не продолжается.

Опция	Описание
	Деактивировано: при перегреве трансформатора программа прерывается. После охлаждения трансформатора выполнение прерванной программы возобновляется.
Настр. дл. волны перед каждым измерением	Повторная настройка длины волны перед каждым отдельным измерением. Тем самым улучшается сходимость результатов (по умолчанию: активировано).
После откр. печи треб. форматирования	Если после открывания печи или включения устройства не было проведено форматирование, при запуске последовательности измерения выводится сообщение об его отсутствии.
Обновить данные рассеянн. света для строк ниже	При запуске последовательности уровень диффузного света для линий ниже выбранной длины волны (нм) обновляется один раз в день. Дополнительно можно записать значения диффузного света вручную при следующем запуске измерения. Для этого нажмите кнопку [Переуст. значения] .
Очистка смеси-тельной камеры при гашении пламени	При гашении пламени смесительная камера промывается.
Активир. трубку и детектир. сушки (после перезапуска)	Камера печи распознает тип трубки и завершение фазы сушки. При активации этого параметра требуется перезапуск программы.

11.6 Параметры продувки оптики

Только contrAA 800

В окне **Опции / Продувка оптики** задаются параметры продувки спектрометра contrAA 800. Продувка оптики защищает спектрометр от загрязнений. Продувка аргоном дополнительно улучшает пределы чувствительности в коротковолновой УФ-области.

Открыть окно **Опции / Продувка оптики** можно с помощью пункта меню **Прочее | Опции**.

Опция	Описание
Продувка оптики	выкл.: продувка оптики не выполняется. Воздух: продувка воздухом Аргон: продувка аргоном
Время стабилизации аргона	Спектрометр продувается аргоном. Время, необходимое для того, пока после запуска продувки аргоном воздух в спектрометре не будет вытеснен аргоном и установятся стабильные оптические условия.
Время drive out аргона	Спектрометр продувается воздухом. Время, необходимое для вытеснения аргона из спектрометра.
Activate optics purging at software startup	Продувка оптики всегда начинается с включением устройства.

Если включена продувка оптики, в строке символов главного окна появляется сообщение о продувке оптики и оставшемся времени до завершения стабилизации продувки. При запуске процедуры измерения (последовательности) в ходе периода стабилизации на экран выводится сообщение об еще продолжающемся периоде продувки.

11.7 Параметры калибровки и коррекции бланка

Градуировка

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 конц.2 сначала рассчитывается исходная концентрация бланка (конц.2_{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: $\text{Conc2}_{\text{Sample}} = (\text{Conc1}_{\text{Sample}} - \text{Conc1}_{\text{Blank}}) * \text{DF}_{\text{Sample}}$

- На основе конц.2: $\text{Conc2}_{\text{Sample}} = (\text{Conc1}_{\text{Sample}} * \text{DF}_{\text{Sample}}) - \text{Conc2}_{\text{Blank}}$

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 **Коррекция хол. знач. базируется на Conc1.**

Предел детектирования/предел количественного определения

Можно задать коэффициенты и количество повторных измерений для предела детектирования/предела количественного определения. Расчетные пределы детектирования/пределы количественного определения отображаются в окне **Калибровка**. Если настройки нужно применить к имеющимся результатам, результаты нужно пересчитать. Коэффициенты и количество повторных измерений выводятся в окне **Калибровка** и в отчетах печати калибровки и измерений результата/бланка. Для редактирования настроек пределов детектирования/пределов количественного определения выберите **LOD / LOQ**. Предусмотрены следующие стандартные настройки:

Параметр	Значение
Фактор LOD	3
Фактор LOQ	9
Повторы	11

12 Дополнительный модуль соответствия FDA 21 CFR Part 11

Дополнительный модуль соответствия FDA 21 CFR Part 11 для ASpect CS содержит следующие функции согласно требованиям FDA по ведению электронных записей и электронным подписям (21 CFR Part 11):

- Управление пользователями
- Электронные подписи
- Audit trail (журнал событий)
- AJ File Protection для защиты файлов от преднамеренных и непреднамеренных манипуляций с данными

В системе управления пользователями предусмотрены один уровень администратора и четыре уровня пользователей. Для пользователя с правами администратора доступны следующие функции:

- Гибкое конфигурирование системы (задание логинов и паролей, ведение журнала событий, осуществление подписей, организация директорий данных)
- Регистрация пользователей на соответствующих пользовательских уровнях с пошаговой моделью прав пользователей
- Предоставление паролей
- Назначение персонализированных рабочих директорий для методов, последовательностей и событий для пользователей
- Просмотр и экспорт Audit Trails (журнала событий)

При установленной настроенной системе управления пользователями активируется пункт меню **Система** в ASpect CS, который обеспечивает доступ к функциям системы управления пользователями.

Любые изменения пользовательских данных после закрытия соответствующего окна будут постоянно сохраняться в закодированной базе данных.

Примечание: для соответствия требованиям безопасности при работе с операционными системами Microsoft Windows они должны быть соответствующим образом сконфигурированы. Это относится к правам доступа к файлам и другим настройкам, которые должны быть выполнены авторизованным системным администратором.

12.1 Управление пользователями

12.1.1 Иерархия и доступ к функциям

В системе управления пользователями предусмотрены один уровень администратора и четыре уровня пользователей.

Иерархическая структура уровней пользователей имеет следующий вид:

Администратор > уровень 1 > уровень 2 > уровень 3 > уровень 4.

Отдельным пользовательским уровням назначены следующие функции

Уровень администратора	Этот пользователь имеет полное право доступа к ASpect PQ и любым функциям системы управления пользователями.
Уровень 1	Пользователи уровня 1 имеют неограниченный доступ ко всем функциям ASpect PQ, кроме доступа к системе управления пользователями.

Уровень 2

Аналогично уровню 1, за исключением:

- Удаление методов (логин M1)
- Удаление последовательностей (логин P1)
- Удаление вкладок с правилами КК (логин Q1)
- Удаление файлов результатов (логин R1)

Уровень 3

Аналогично уровню 2, за исключением:

- Сохранение методов (создание методов в базе данных методов) (логин M2)
- Сохранение последовательностей (создание последовательностей в базе данных методов) (логин P2)
- Сохранение отклонений пика (логин W1)

Уровень 4

Аналогично уровню 3, за исключением:

- Изменения параметров метода (логин E1)

Этот пользователь может загружать только уже созданные методы и последовательности и выполнять измерения.

Функция	Логин*	Админ.	Уровень 1	Уровень 2	Уровень 3	Уровень 4
Использование системы управления пользователями		+	-	-	-	-
Удаление методов	M1	+	+	-	-	-
Удаление последовательностей	P1	+	+	-	-	-
Удаление вкладок с правилами КК	Q1	+	+	-	-	-
Удаление файлов результатов	R1	+	+	-	-	-
Сохранение методов	M2	+	+	+	-	-
Сохранение последовательностей	P2	+	+	+	-	-
Изменение отклонений пика	W1	+	+	+	-	-
Изменение шаблонов отчета	L1	+	+	-	-	-

Функция	Логин*	Админ.	Уровень 1	Уровень 2	Уровень 3	Уровень 4
Изменение методов	E1	+	+	+	+	-
Загрузка методов и последовательностей		+	+	+	+	+
Выполнение измерений		+	+	+	+	+

*Логин используется в указаниях по использованию.

12.1.2 Управление пользователями – индикация и настройки

Систему управления пользователями можно настроить при ее первом запуске после установки или позже. Это могут выполнить пользователи с правами администратора.

Для каждого пользователя создается учетная запись, в которой хранится его профиль. Если учетная запись пользователя больше не нужна, ее можно деактивировать или заблокировать. Учетные записи пользователей удалить нельзя.

- ▶ Открыть пункт меню **Система | Управл. польз.** или запустить систему управления пользователями соответствующей кнопкой в стартовом меню Windows.
- ▶ Авторизоваться с профилем администратора.
 - ✓ Откроется окно **User Management**.

Окно User Management

Окно содержит список зарегистрированных логинов пользователей с соответствующими именами. В правой части окна отображаются подробные данные профиля выбранного пользователя.

Элементы отображения и управления

Опция	Описание
User ID	Логин пользователя
Full name	Полное имя пользователя
User level	Администратор, от уровня 1 до уровня 4 (электронная подпись)
E-signature	Yes: пользователь авторизован для электронной подписи данных результатов. No: пользователь не авторизован для электронной подписи.
Status	Активно: логин можно использовать (зеленый круг). Заблокировано: логин деактивирован и не может быть использован (красный круг).
Passwd. protect.	Активно: для входа в систему требуется пароль (ключ). Не активно: войти в систему можно без пароля (перечеркнутый ключ).
Valid until:	Indefinitely: неограниченный срок действия пароля. Date/ days: пользователь должен сменить пароль по истечении указанного периода времени.

Экранные кнопки

Экранная кнопка	Описание
New ...	Создание нового пользователя Откроется окно Add user data .
Modify ...	Изменение пользовательских данных для выделенной строки таблицы Откроется окно Modify user data для выделенного пользователя. Окно можно также открыть двойным щелчком кнопкой мыши по пользователю.
Preferences	Изменение конфигурации системы управления пользователями
Audit trail	Открытие журнала событий
?	Справка
Exit	Завершение работы программы

12.1.3 Общие настройки системы управления пользователями

В окне **Preferences** доступны следующие параметры настройки системы управления пользователями:

- Политика паролей
- Логин и журнал событий
- Значения подписей
- Используемые директории данных

Эти настройки будут действительны для вновь созданных учетных записей пользователей и поэтому должны быть выполнены после установки и до создания учетных записей пользователей.

- ▶ В окне **ASpect CS User Management** выбрать **Preferences**.
Откроется окно **Preferences**.
- ▶ Слева выбрать область параметров, которую нужно изменить.
- ▶ Выполнить настройку.
Щелчок по кнопке **Default settings** восстанавливает умолчания для выбранной области параметров. Это не затрагивает настройки других областей.
- ▶ Для подтверждения настроек нажать кнопку **OK**.

Зарегистр.

Настройки политики логина и пароля

Опция	Описание
Number of login attempts:	Количество неправильных вводов пароля (макс. 10) При превышении попыток ASpect CS по истечении периода ожидания будет закрыт и для повторного входа в систему потребуются его перезапуск. В файл журнала событий будет добавлена запись (предупреждение).
Disable account after failed login attempts	Блокировка пользователя при превышении максимального количества попыток авторизации.
Minium user name length:	Минимальное количество символов для новых имен пользователей Максимальное количество символов: 10
Enforce login with password	Для новых имен пользователей должен быть назначен пароль.
Password and user ID must be different	Назначать можно только пароли, содержащие как буквы, так и цифры. Эта политика также применяется при изменении пароля.

Опция	Описание
Password and user ID must be different	Назначать можно только те пароли, которые отличаются от имени пользователя. Эта политика также применяется при изменении пароля.
"User must change password at next login" is active	Новые пользователи должны изменить свой пароль при первом входе в систему.
Password expires in	По истечении этого срока пользователю при входе в систему будет предложено изменить пароль. После этого пароль будет продлен на период, указанный в руководстве. Значение принимается по умолчанию и может быть задано индивидуально для каждого пользователя (максимум 999 дней).
Minium password length:	Минимальное количество символов для новых паролей Количество символов: от 3 до 10

Folders

Можно указать рабочую директорию ASpect и директорию для файла журнала событий.

Опция	Описание
ASpect working directory	Рабочая директория ASpect CS Рабочая директория содержит базы данных методов и последовательностей, а также файлы результатов. Рабочая директория была задана при установке ASpect CS и может быть изменена здесь.
Audit trail	Путь к журналу событий Путь можно изменить.
User database	Путь к базе данных пользователей Этот путь можно изменить только с помощью установочной программы.
AJ File Protection	Опциональная программа дополнительной защиты AJ File Protection. Она защищает файлы от преднамеренных и непреднамеренных манипуляций с данными, например, их удаление и изменение. При установленной программе AJ File Protection кнопка активна и показывает статус защиты соответствующим цветом. Зеленый – защита файлов активна; красный – драйвер защиты файлов не активен. Щелчок по кнопке открывает окно со списком защищенных директорий.

Audit trail

В этой области действий задаются активация журнала событий, использование методов и основные сроки действия калибровок.

Опция	Описание
Inactive (no entries)	Записи не добавляются в журнал событий.
Active	Записи добавляются в журнал событий.
Allow measuring only with saved methods	Если активировано, измерение возможно только в том случае, если метод был загружен и больше не изменялся с момента его последнего сохранения.
Calibration validity period [h:mm]:	Если активировано, можно задать период действия калибровки. Для пользовательского уровня 3 и 4 калибровка должна обновляться перед запуском измерения. Для других уровней отображается указание.

Signatures

В списке показаны значения подписей и соответствующий пользовательский уровень, который можно выбрать при подписании.

Экранная кнопка	Описание
Add	Добавление нового значения подписи Щелчок по кнопке открывает окно Edit list of signature meanings , в котором можно выбрать новое значение подписи и действительный пользовательский уровень.
Modify	Редактирование выделенного значения подписи
Delete	Удаление выделенного значения подписи

12.1.4 Создание новой учетной записи пользователя

Создать новую учетную запись пользователя могут только пользователи с правами администратора. Конфигурация нового пользователя с соответствующими правами осуществляется в окне **Add user data**.

Параметры в окне Add user data

Опция	Описание
User ID	Логин, который пользователь использует при входе в систему. Верхний и нижний регистр букв не проверяются. Минимальная длина логина зависит от общих настроек в системе управления пользователями.
Full name	Полное имя пользователя Это имя используется как часть электронной подписи. Макс. кол-во символов: 32
Description	Поле для комментариев Ввод является опциональным.
User level	Выбор пользовательского уровня с соответствующими правами
Password ...	Установка пароля При вводе пароля учитывается регистр. Если диалоговое окно с паролем подтверждается без ввода пароля, защита паролем отменяется. Минимальная длина и другие параметры пароля задаются в общих настройках системы управления пользователями. Максимальная длина пароля: 20 символов
Значок замка	Защита паролем активна.
Значок открытого замка	Возможен вход без пароля.
Password never expires	Если активировано, пароль действителен в течение неограниченного периода времени. Если деактивировано, срок действия пароля истекает по истечении указанного времени. Значение по умолчанию принимается из политики назначения паролей. Пользователь также может обновить пароль до этого.
User-specific working directory	Для пользователя создается собственная рабочая директория по следующей схеме: \ASpect-рабочая директория\имя пользователя. Структура директории создается при первом входе пользователя в систему.
Use e-signature	Пользователь имеет право электронной подписи документов. При этом ему доступны подписи его пользовательского уровня и более низких пользовательских уровней.
View audit trail	Пользователь может открывать журнал событий.

Опция	Описание
Disable user ID	Деактивировать учетную запись пользователя Имя пользователя можно временно деактивировать. Деактивация учетной записи пользователя, в отличие от ее удаления, не позволяет повторно присваивать это имя пользователя новым пользователям.
User must change password at next login	При следующем входе в систему пользователю будет предложено изменить пароль.

Определение данных пользователя

- ▶ В окне **User Management** выбрать **New ...** .
Откроется окно **Add user data** .
- ▶ Выполнить настройки параметров и настройки в соответствующих полях и нажать кнопку **OK** для подтверждения.
 - ✓ Новая учетная запись пользователя появится в окне **ASpect CS User Management**.

См. также

- 📄 Общие настройки системы управления пользователями [▶ 181]
- 📄 Иерархия и доступ к функциям [▶ 178]

12.1.5 Изменение существующей учетной записи пользователя

Свойства учетной записи пользователя можно изменить.

- ▶ В окне **User Management** выделить учетную запись пользователя и нажать кнопку **Modify ...** .
Откроется окно **Modify user data** с настройками учетной записи.
- ▶ Выполнить необходимые настройки и нажать кнопку **OK** .
 - ✓ Изменения будут применены и вступят в силу при следующей авторизации пользователя.

См. также

- 📄 Создание новой учетной записи пользователя [▶ 183]

12.1.6 Изменение пароля

В зависимости от условий соглашения в учетной записи пользователь должен менять назначенный пароль через регулярные промежутки времени.

- ▶ В **ASpect CS** выбрать пункт меню **Система | Измен. пароль** .
Откроется окно **Измен. пароль** .
- ▶ Ввести старый пароль и два раза новый пароль и нажать кнопку **OK** для подтверждения.
 - ✓ При правильном вводе появится сообщение **Пароль изменен!**.

12.2 Просмотр, печать и экспорт журнала событий

Журнал событий содержит запись определенных системных событий и дополнительно всех предупреждений и сообщений об ошибках. Для просмотра журнала событий требуются соответствующие права в учетной записи.

Чтобы открыть журнал событий, выберите пункт меню **Система | Журнал** или в системе управления пользователями выберите **Audit Trail**.

Доступны следующие функции журнала событий:

- Дисплей
- Обновление
- Экспорт в виде CSV-файла (только если журнал событий был вызван из окна системы управления пользователями)

В журнале событий документируются следующие параметры:

Столбец таблицы	Описание
Тип	Отображение типа события В журнале событий сохраняются и обозначаются символами следующие типов событий: информация, предупреждение, ошибка, вход в систему и выход из системы
Дата/Время	Дата и время записи (экранное время) Кнопки со стрелками [+] и [-] позволяют упорядочить записи в шапке таблицы обоих столбцов по возрастанию или по убыванию даты и времени.
Time zone	Часовой пояс, к которому относится время записи (система управления Windows)
Name	Обозначение события, подробности см. в поле Description
Category	Категория события Категория USRMGMNT обозначает все записи, сделанные системой управления пользователями. Все другие категории записываются ASpect CS .
User	Пользователь, зарегистрированный на момент записи
Description	Более подробная информация о причине выделенной записи

Обновление журнала событий Щелчок по кнопке **Refresh** позволяет обновить список записей в журнале событий. Это может потребоваться в том случае, если к уже открытому отображению журнала событий будут добавлены дополнительные записи.

Экспорт журнала событий Записи журнала событий можно экспортировать в CSV-файл (требуются права администратора). Функция экспорта доступна только в том случае, если журнал событий был открыт в системе управления пользователями.

- ▶ Щелчком по кнопке **Export** открыть окно **Сохранить как**.
- ▶ Указать папку сохранения и имя файла и нажать кнопку **ОК** для подтверждения.
 - ✓ Файл журнала событий будет экспортирован.

Применение фильтра к журналу событий К журналу событий можно применить фильтр по определенным наименованиям, категориям или пользователям. Также можно ограничить период записей.

- ▶ Выбрать **Filter** и в окне Filter audit trail задать фильтр поиска.
- ▶ Щелчок по кнопке **Reset filter** снимает фильтр.

Печать журнала событий Журнал событий можно распечатать. После того, как к журналу был применен фильтр, на печать выводятся только отфильтрованные записи.

- ▶ Запустить печать текущего окна просмотра журнала событий, нажав кнопку **Print** .
Откроется окно печати
- ▶ В открывшемся окне в списке **Direct to** выбрать формат вывода.
- ▶ Запустить процесс щелчком по кнопке **Start** .
✓ Журнал событий будет выведен на печать в выбранном формате вывода.

12.3 Электронные подписи

ASpect CS позволяет подписывать данные результатов электронным способом. Подпись является завершением работы над файлом, при последующих изменениях файла подпись становится недействительной. Значения подписей создаются в общих настройках системы управления пользователями. Подписывающийся пользователь должен обладать соответствующими разрешениями в своей учетной записи.

В процессе подписи файлы шифруются, им присваивается статус подписи и передаются данные пользователя, поставившего свою подпись. Кроме того, создается зашифрованный файл подписи с тем же именем, что и файл результата, но с расширением файла *.sig. Этот файл содержит контрольные суммы файла результатов, включая (при наличии) файл спектра.

Файл может быть подписан несколькими пользователями.

12.3.1 Подпись результатов измерения

Файлы результатов измерений можно снабдить электронной подписью после измерения или при последующей загрузке файла авторизованными пользователями в окне **Подпис.** .

Параметры в окне Подпис.

Опция	Описание
Имя пользователя	Логин текущего пользователя Имя пользователя можно изменить. Это позволяет поставить подпись другим пользователям.
Пароль	Пароль пользователя
Значение	Значение подписи Список значений подписей задается администратором системы управления пользователями.
Коммент.	Дополнительные примечания (макс. 256 символов)
Подпис.	Подпись документа с выполненными ранее настройками

Подписывание результатов

- ▶ Показать результаты измерений для подписи в главном окне программы.
- ▶ Выбрать пункт меню **Система | Подписать рез-ты**.
- ▶ Ввести имя пользователя и пароль.
- ▶ Выбрать значение подписи.
- ▶ Нажать кнопку **Подпис..**
✓ Появится вопрос, следует ли поставить подпись или отменить процесс.
Успешная установка подписи будет подтверждена.

См. также

- 📖 Общие настройки системы управления пользователями [▶ 181]

12.3.2 Отображение подписи

При предварительном просмотре или распечатке подписанных данных результатов в конце отчета добавляется раздел **Signatures**. Этот раздел содержит все электронные подписи, принадлежащие этому файлу:

Опция	Описание
Issued by	Полное имя и логин пользователя, подписавшего файл
Signed on	Дата/время подписи
Status	Статус подписи может иметь одно из следующих значений: Valid Подпись и данные о результатах полные и без ошибок. Вычисленные контрольные суммы файлов не отличаются от контрольных сумм, сохраненных в файле подписей на момент подписания. Invalid (missing or invalid signature file) Файл подписи, принадлежащий записи данных, не найден или неправильный. Invalid (TPS data) Файл результатов был изменен после его подписания. Сравнение вновь вычисленных и сохраненных контрольных сумм показывает различия. Invalid (SPK data) Файл с данными спектра был изменен после его подписания. Сравнение вновь вычисленных и сохраненных контрольных сумм показывает различия.
Meaning	Значение подписи
Comment	Опциональный комментарий к подписи

12.4 AJ File Protection

Опциональная программа AJ File Protection защищает файлы от преднамеренных и непреднамеренных манипуляций с данными, например, их удаление и изменение. При этом драйвер-фильтр разрешает доступ к директории специально авторизованым для этого приложениям, в то время как доступ другим приложениям блокируется. Функция сканирования вирусов, а также профессиональных приложений репликации, синхронизации или создания резервной копии не затрагивается при соблюдении Microsoft-стандартов.

AJ File Protection устанавливается и настраивается системным администратором. Для установки требуются права администратора.

Подробное описание установки и настройки программы см. на установочном диске.

В сочетании с отдельными правами на автоматическое сохранение и экспорт, программа AJ File Protection обеспечивает полную защиту данных – от создания методов, получения данных, оценки и до архивирования.

13 Приложение

13.1 Обзор обозначений, используемых при отображении значений

Примечание	Значение	Относится к	Издание
> KAL	Среднее значение пробы больше рабочего диапазона калибровочной кривой	Средние значения	Окно процесса и результата
< KAL	Среднее значение пробы меньше рабочего диапазона калибровочной кривой	Средние значения	Окно процесса и результата
< LOD	Значение пробы меньше предела детектирования	Средние значения	Окно процесса и результата
< LOQ	Значение пробы меньше предела количественного определения и больше предела детектирования	Средние значения	Окно процесса и результата
OCO !	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
RI(настр.) или R	Коэффициент детерминации регрессии R^2 (настр.) или R (в зависимости от выбора в окне Опции / Калибровка) калибровочной кривой ниже заданного минимального значения	Калибровочная кривая	Окно процесса и результата Окно калибровочной кривой
MAN	Отдельное значение пробы или отдельное значение стандарта было вручную исключено из расчета средних значений пробы	Отдельные значения пробы	Окно отдельных значений пробы
KOR	Отдельное значение пробы или отдельное значение стандарта было автоматически исключено из вычисления средних значений пробы по тесту выбросов Граббса	Отдельные значения пробы	Окно отдельных значений пробы

13.2 Описание используемых алгоритмов спектральной коррекции фона

Спектральная коррекция фона проводится отдельно для каждого спектра. Получают разрешенный во времени сигнал экстинкции с числом значений оптической плотности, которое зависит от времени измерения. Отдельная оптическая плотность рассчитывается для каждого обрабатываемого пикселя (окно **Метод / Обработка**, столбец **Обраб.пикселей**) и суммируется с числом обрабатываемых пикселей. По сигналу экстинкции, в зависимости от ААС, рассчитывается значение высоты, площади или среднее значение.

13.2.1 Коррекция фона "без опорн."

Расчет опорного значения	Опорное значение формируется путем нахождения среднего значения статично установленного пикселя измерительного диапазона. Если статичный пиксель не установлен, среднее значение будет находится по всем пикселям диапазона, причем диапазон +/-10 пикселей от анализируемого пикселя не учитывается. Отдельно записанный эталонный спектр не требуется.
Расчет спектров экстинкции	$\text{Коррэкст} = \lg(I_0 / I_{\text{peak}})$ I_0 Среднее значение пикселей внутри просвета, за исключением анализируемого пикселя +/- 10 пикселей I_{peak} Анализируемые пиксели
Предельные диапазоны	Структуры пламени и другие молекулярные структуры, входящие в отдельный эталонный спектр, не компенсируются. В результате неравномерного CCD-освещения спектр экстинкции может показывать падающую или восходящую базовую линию. Эта коррекция соответствует широкополосной D2-коррекции ААС линий.

13.2.2 Коррекция фона "с опорн."

Расчет опорного значения	Отдельные спектры экстинкции рассчитываются из отдельных спектров пробы и среднего нормированного эталонного спектра. Средний нормированный эталонный спектр получают, поделив площади (суммы) отдельных эталонных спектров на площадь эталонного спектра по среднему значению (нормирование). В заключение производится повторное усреднение нормированных отдельных спектров.
Расчет спектров экстинкции	Из-за флуктуации источника света и атомизатора полученные спектры экстинкции показывают более или менее сильно наклонные и искривленные базовые линии с различными значениями смещения. Поэтому на следующем этапе настраивается базовая линия для каждого отдельного спектра. Для этого устанавливаются опорные точки, через которые прокладывается полином. Полином настройки – максимум полином второго порядка. Порядок определяется по количеству и распределению опорных точек, причем опорные точки, расположенные на расстоянии менее 10 пикселей друг от друга, объединяются в одну группу. Настроенная базовая линия вычитается из спектров экстинкции. После этого можно прямо определить оптическую плотность. Опорные точки можно устанавливать статично или динамично (автоматически). Статично: опорные точки устанавливаются вручную или из списка в области центральный пиксель +/-0.5 x диапазон измерения.

Динамично: поиск опорных точек осуществляется по алгоритму.

- Цель: идентификация пикселей, которые не отличаются значительным образом от шумов базовой линии. Для этого градиенты рассматриваемого пикселя относительно ± 3 соседних пикселей рассчитываются один под другим и тестируются на предмет смены градиента.
- Опорные точки отдельных спектров объединяются в одну группу. Если определенный UGK-пиксель находится с определенной периодичностью, то он берется за опорную точку для спектра среднего значения.
- Дополнительные условия: если все опорные точки расположены с одной стороны анализируемого пикселя, на экран выводится ошибка. При одностороннем присоединении экстраполяция полинома может вызвать серьезные ошибки. Алгоритм поиска опорных точек распознает градиент только тогда, когда разность экстинкции между четырьмя соседними пикселями превышает определенное значение ($> 2 \times 10^{-4}$ /пикселей).
- Область анализируемого пикселя ± 10 пикселей исключается из поиска.

Предельные диапазоны

С перекрывающимися структурами по всей спектральной области в алгоритме будут принципиальные проблемы, ведь в этом случае шумы базовой линии не преобладают в какой-либо области. Здесь осуществляется динамичная регулировка частоты, т. е. решающий критерий постепенно расшатывается. Если это не даст достаточное количество опорных точек, будут установлены статичные пиксели, сохраненные по умолчанию в таблице линий.

13.2.3 Коррекция фона IBC и IBC-m

Коррекция фона **IBC** (IBC= итерационная коррекция фона) основана на итеративной фильтрации спектров интенсивности. Коррекции фона шире пика аналита уменьшаются. Алгоритм пригоден для комплексных спектральных фонов.

IBC-m – это специальный интерактивный алгоритм фильтра для определения широкополосных молекулярных структур.

13.2.4 Вычитывание спектров (коррекция постоянных структур)

Область применения

Мультивариантная коррекция структур пламени и других интерференций, которые могут быть в эталонном спектре и спектре пробы в разной интенсивности.

Предположения

- Суммарный спектр – это взвешенная сумма спектров чистых субстанций и шума.
- Другие диапазоны длины волны (например, дополнительные полосы аналита, отсутствующие в спектре коррекции), отсутствуют или отключаются.
- Отсутствие смещения длины волны или лишь очень незначительное смещение между спектром пробы и спектром коррекции, так как они приводят к искусственным помехам.

Спектр структуры пламени рассчитывается из эталонного спектра по формуле Экст_{корр} = $\lg(I_0/I_{0-\text{смещение}})$, для других молекулярных коррекций требуются спектры чистых субстанций.

Основой расчета является мультивариантная классическая калибровка:

$$y = X \cdot b + e$$

m – число длин волн/пикселей

n – число спектров чистых субстанций

y – суммарный спектр ($m \times 1$)

X – матрица спектров чистых субстанций ($m \times n$)

b – вектор коэффициентов

$b(\text{оценочно}) = X + y$ с $X = (X^* X)^{-1} X^* y$ (псевдо-инверсия)

Тогда продукт из спектра чистой субстанции и коэффициент можно будет вычесть из спектра пробы:

$y_N = x_N - \sum (b_i x_i)$, с $i = 1 \dots$ кроме N (индекс исследуемого спектра)

См. также

📖 Создание модели для спектральных коррекций [► 98]

13.3 Папка для хранения файлов ASpect CS

Папки, используемые для хранения файлов, различаются в зависимости от опций установки и используемой версии Windows. Следующая таблица содержит папки, используемые по умолчанию. Папки, используемые в текущей установке, отображаются в окне Опции / Папки.

Рабочая директория и под-папки

Диск:>Пользователи>Общие>Общие документы>Analytik Jena>ASpect CS

Тип	Папка	Файлы
Результаты	C:\User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\<Technik>\Results	*.tps – список результатов *.spk – данные спектров
Данные методов, последовательностей и спектров коррекции	C:\User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\<Technik>\meth	*.tps
Результаты оптимизации (например, оптимизация программы печи)	C:\User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\<Technik>\lopt	*.tps
Параметры по умолчанию	C:\User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\<Technik>\tables	*.dat
Идентификационные файлы проб, файлы единиц измерения и экспортированные файлы (*.csv)	C:\User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\user	*.tps; *.csv
Шаблоны отчетов	C:\User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS\user\Reports	*.lst – шаблон *.jpg – файл предварительного просмотра
Опции и значения регулировки	C:\User\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect CS	*.cfg; *.ini

Данные пользователя (и под-папки)

Диск:>ProgramData>Analytik Jena>ASpectCS

Тип	Папка	Файлы
Списки линий	C:\ProgramData\Analytik Jena\ASpectCS\<Technik>\tables	Lines.dat
Данные устройства и предустановленные комментарии	C:\ProgramData\Analytik Jena\ASpectCS	*.dat: *.tps
Данные системы управления пользователями и журнала событий	C:\ProgramData\Analytik Jena\ASpectCS\UserMgmt	Usrlrv.tps – база данных пользователей Eventlog*.tps – журнал событий

Программа

Диск:>ProgramData | Analytik jena>ASpect CS или

Диск:>Programme(x86)>Analytik Jena>ASpectCS

Тип	Папка	Файлы
Конфигурация устройств и систем	C:\Program Files (x86)\ASpectCS	ASpectCS.ini

Метод: FL – пламя; EA – графитовая печь; EAS – графитовая печь для твердых проб; HS – гидридный; HF – HydrEA

Перед полным восстановлением (приложения и данные) необходимо дополнительно выполнить установку ASpect CS.

Указания по отображению папок и расширению имен файлов

Некоторые папки могут быть скрытыми. Может быть отключено также отображение расширений имен файлов. Чтобы показать скрытые файлы, папки и расширения, выберите в Windows Explorer пункт меню **Вид**.