

# Руководство по эксплуатации

ASpect PQ



---

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

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



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

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

Номер документа                /

Издание                         C (04/2025)

Техническая документация    Analytik Jena GmbH+Co. KG

© Copyright 2026, Analytik Jena GmbH+Co. KG

# Оглавление

<b>1 Программное обеспечение ASpect PQ.....</b>	<b>7</b>
1.1 Указания по защите данных.....	7
1.2 Запуск ASpect PQ.....	7
1.2.1 Окно Быстрый старт.....	8
1.2.2 Начало работы с рабочим листом.....	9
1.2.3 Начало работы без рабочего листа.....	10
1.2.4 Открытие ASpect PQ во втором окне.....	11
1.2.5 Блокировка ASpect PQ.....	11
1.3 Завершение работы ASpect PQ.....	11
1.4 Общие инструкции по эксплуатации.....	11
1.4.1 Рабочий интерфейс.....	11
1.4.2 Использование справки.....	12
1.4.3 Обзор строки меню, панели инструментов и строки символов.....	13
1.4.4 Наиболее часто используемые элементы управления.....	15
<b>2 Рабочие листы.....</b>	<b>18</b>
2.1 Создание нового рабочего листа.....	19
2.2 Редактирование рабочего листа.....	21
2.3 Загрузка рабочего листа.....	21
2.4 Удаление рабочего листа.....	21
<b>3 Методы.....</b>	<b>22</b>
3.1 Создание, сохранение и загрузка методов.....	22
3.1.1 Создание нового метода.....	22
3.1.2 Сохранение метода.....	23
3.1.3 Загрузка метода.....	24
3.2 Спецификация параметров метода.....	26
3.2.1 Спецификация аналитических линий (окно Метод   Строки).....	26
3.2.2 Настройка параметров плазмы и передающей оптики (окно Метод   Плазма).....	33
3.2.3 Настройка подачи пробы (окно Метод   Подача пробы).....	35
3.2.4 Оценка пиков (окно Метод   Обработка).....	36
3.2.5 Ввод параметров калибровки (окно Метод   Калибровка).....	41
3.2.6 Установка параметров статистических оценок (окно Метод   Статистика).....	46
3.2.7 Установка параметров контроля качества (окно Метод   ККК).....	48
3.2.8 Установка параметров контроля качества (окно Метод   ККК).....	51
3.2.9 Установка параметров форматов вывода данных для результатов (окно Метод   Вывод).....	53
<b>4 Последовательности.....</b>	<b>55</b>
4.1 Создание, сохранение и открытие последовательностей.....	55
4.1.1 Создание новой последовательности.....	55
4.1.2 Сохранение последовательности.....	55
4.1.3 Загрузка последовательности.....	56
4.2 Окно Послед-ть.....	57
4.3 Параметры измерений и действий в последовательности.....	58
4.4 Выбор элементов/линий для анализа проб/действия.....	61
<b>5 Данные с информацией о пробах (ID проб).....</b>	<b>63</b>
5.1 Создание, сохранение и открытие данных с информацией о пробах.....	63

5.2	Окно Имя пробы   Информация о пробе.....	63
5.3	Настройка параметров информации о пробах.....	65
<b>6</b>	<b>Проведение анализа и расчет результатов.....</b>	<b>67</b>
6.1	Обзор команд меню и кнопок для начала анализа в главном окне.....	67
6.2	Включение спектрометра и зажигание плазмы.....	67
6.3	Гашение плазмы и выключение спектрометра.....	69
6.4	Запуск процедуры измерения.....	70
6.5	Отображение и сохранение результатов в процессе анализа.....	71
6.6	Прерывание и продолжение процесса анализа.....	72
6.7	Повтор действий последовательности.....	73
6.8	Пересчет результатов анализа.....	73
6.9	Обработка измерений параллельно с выполнением анализа (режим офлайн).....	76
6.10	Отображение результатов и процесса анализа в главном окне.....	77
6.10.1	Вкладка Послед-ть/Рез-ты.....	77
6.10.2	Вкладка Послед-ть.....	77
6.10.3	Вкладка Результаты.....	78
6.10.4	Вкладка Обзор.....	81
6.11	Отображение и редактирование отдельных значений проб.....	82
6.12	Отображение и редактирование спектров интенсивности.....	84
6.12.1	Отображение спектров – окно Ред. спектр / Дисплей.....	84
6.12.2	Оценка пика и определение коррекции фона – окно Ред. спектр   Обработка.....	87
6.12.3	Устранение спектральных помех – окно Ред. спектр   Спектр. коррекции.....	89
6.13	Запись обзорного спектра.....	92
<b>7</b>	<b>Калибровка.....</b>	<b>94</b>
7.1	Графическое представление калибровочной кривой.....	95
7.2	Отображение результатов калибровки.....	96
7.2.1	Калибровка – вкладка Таблица.....	96
7.2.2	Калибровка – вкладка Остатки.....	97
7.2.3	Калибровка – вкладка LOD/ LOQ.....	97
7.2.4	Калибровка – вкладка LOD/ LOQ.....	98
7.3	Редактирование калибровочной кривой.....	99
<b>8</b>	<b>Контроль качества (КК).....</b>	<b>100</b>
8.1	Параметры вкладок КК.....	100
8.2	Вводы и пределы вкладок КК.....	101
8.3	Отображение вкладок КК.....	102
<b>9</b>	<b>Управление и мониторинг прибора и аксессуаров.....</b>	<b>104</b>
9.1	Спектрометр.....	104
9.1.1	Настройка параметров спектрометра и тестирование функций.....	104
9.1.2	Диагностика параметров устройства.....	106
9.1.3	Непрерывное измерение пика.....	106
9.1.4	Запись кривой сигнала.....	107
9.2	Плазма.....	108
9.2.1	Розжиг плазмы и настройка условий для плазмы.....	108
9.2.2	Контроль подачи проб на насос.....	110
9.2.3	Юстировка и оптимизация плазмы.....	111

9.3	Автосамплер .....	114
9.3.1	Отображение подключенного автосамплера .....	115
9.3.2	Настройка штатива для проб.....	115
9.3.3	Технические параметры автосамплера .....	116
9.3.4	Проверка функций автосамплера .....	117
9.3.5	Отображение позиций проб на автосамплере.....	118
9.3.6	Функция разбавления .....	118
9.4	Рециркуляционный охладитель .....	120
<b>10</b>	<b>Управление данными .....</b>	<b>121</b>
10.1	Функции печати в ASpect PQ.....	121
10.1.1	Печать результатов анализов .....	121
10.1.2	Печать других параметров анализа и установок .....	124
10.1.3	Шаблоны отчетов.....	125
10.2	Управление данными для всех типов данных в ASpect PQ.....	127
10.2.1	Управление методами и последовательностями.....	127
10.2.2	Управление файлами результатов .....	129
10.2.3	Экспорт файлов линий/длин волн .....	131
10.2.4	Управление моделями коррекции.....	131
10.2.5	Удаление корректирующих спектров.....	132
10.2.6	Импорт шаблонов отчета .....	132
10.2.7	Управление избранными линиями .....	132
10.2.8	Импорт, экспорт и удаление рабочих листов.....	133
10.3	Сохранение результатов в формате ASCII/CSV .....	134
10.4	Установка единиц измерения .....	134
10.5	Управление базами данных для исходных растворов и проб КК .....	135
10.6	Создание предварительно заданных комментариев .....	135
10.7	Использование буфера обмена Windows.....	136
<b>11</b>	<b>Настройка программы ASpect PQ.....</b>	<b>137</b>
11.1	Возможности отображения .....	137
11.2	Пути сохранения .....	138
11.3	Опции экспорта .....	139
11.4	Опции для непрерывного экспорта в формате ASCII.....	139
11.5	Опции для процесса анализа .....	140
11.6	Общие настройки калибровки и коррекции бланка .....	142
<b>12</b>	<b>Настройка обмена данными с внешней системой управления заданиями.....</b>	<b>144</b>
12.1	Экспорт результатов измерений .....	144
12.2	Импорт файлов с информацией о пробах.....	146
12.3	Поля экспорта результатов.....	146
12.4	Поля файлов с информацией о пробах.....	149
<b>13</b>	<b>Дополнительный модуль соответствия FDA 21 CFR Part 11 .....</b>	<b>151</b>
13.1	Управление пользователями .....	151
13.1.1	Управление пользователями – индикация и настройки.....	151
13.1.2	Настройка уровней пользователей .....	152
13.1.3	Общие настройки системы управления пользователями .....	153
13.1.4	Создание новой учетной записи пользователя.....	156
13.1.5	Изменение существующей учетной записи пользователя .....	157

---

13.2	Изменение пароля.....	157
13.3	Просмотр, печать и экспорт журнала событий.....	158
13.4	Электронные подписи .....	159
13.4.1	Подпись результатов измерения .....	159
13.4.2	Отображение подписи.....	160
13.5	AJ File Protection .....	160
<b>14</b>	<b>Приложение .....</b>	<b>162</b>
14.1	Обзор обозначений, используемых при отображении значений.....	162

# 1 Программное обеспечение ASpect PQ

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

- PlasmaQuant PQ 9000
- PlasmaQuant 9100
- PlasmaQuant 9200

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

Помимо описания программного обеспечения, данное руководство содержит информацию по обслуживанию и уходу за устройством ИСП-ОЭС. Многие руководства по обслуживанию дополнены анимацией и видеороликами.

Описываемая версия ПО

Настоящий документ основан на версии ASpect PQ 1.4.

Использование по назначению

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

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

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

## 1.1 Указания по защите данных

Это программное обеспечение использует названия проб и позволяет предоставлять о пробе дополнительную информацию (комментарии). Название пробы служит идентификатором для результатов теста конкретного образца. В частности, в клинических условиях название пробы может использоваться для соотнесения результатов теста с физическим лицом, на котором проводилось тестирование. Персональные данные должны быть сведены к минимуму, чтобы исключить возможность получения личной информации из названий проб или опциональных комментариев. Не следует использовать прямые идентификаторы, такие как фамилии, номера национального страхования, национальные идентификационные номера, даты рождения или другие личные атрибуты. Ответственность за соблюдение действующих законов и обязательств по защите данных лежит на лицах, ответственных за обработку данных в лабораториях.

Analytik Jena может запросить предоставить файлы с результатами измерений, включая названия проб или комментарии, для проведения мероприятий, связанных с обслуживанием, таких как поддержка клиентов, устранение неполадок и рассмотрение жалоб.

## 1.2 Запуск ASpect PQ

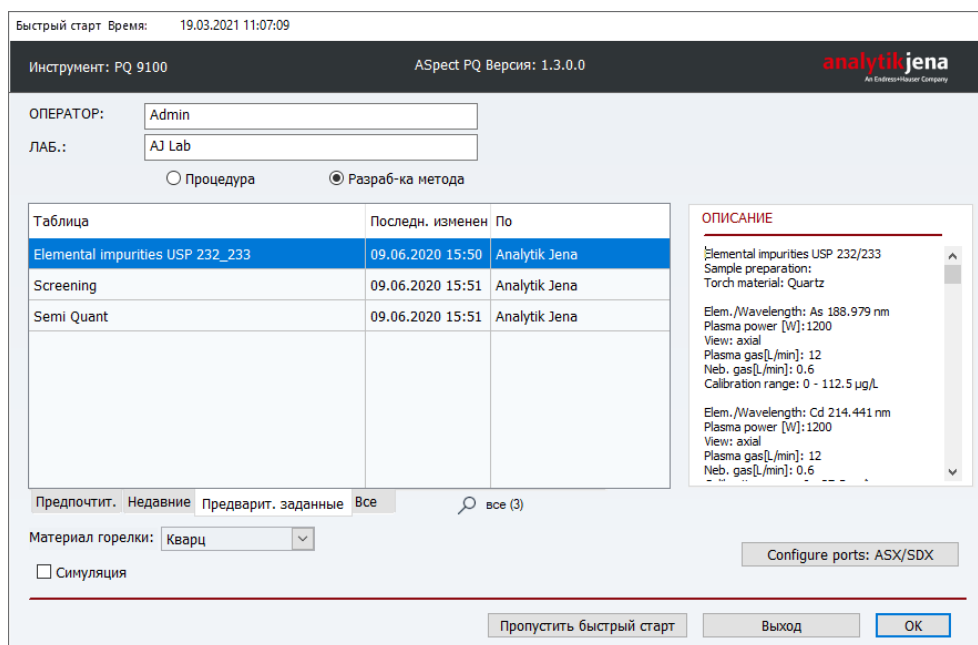
- ▶ Включите устройство и автосамплер.
- ▶ Щелкните по ярлыку ASpect PQ на рабочем столе Windows.

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

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

### 1.2.1 Окно Быстрый старт

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



Настройки в окне Быстрый старт


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

Опция / кнопка	Описание
<b>Оператор</b>	При использовании опциональной системы управления пользователями отображается зарегистрированный пользователь. Если управление правами не используется, пользователя можно ввести здесь вручную.
<b>Лаб.</b>	Можно ввести до 30 символов. Введенное последним обозначение сохраняется и выводится в виде информации в отчетах результатов.
<b>Процед.</b>	Запуск программы для штатного режима работы. В штатном режиме отображаются только методы, активированные для штатного режима работы.  Если установлен дополнительный модуль 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ, то по умолчанию установлена опция <b>Процед.</b> . Выбрать между <b>Процед.</b> и <b>Разраб-ка метода</b> нельзя.
<b>Разраб-ка метода</b>	Полный запуск программы. В разработке метода активированы все настройки.

Опция / кнопка	Описание
Материал горелки	Выберите используемый материал горелки (кварц или керамика), чтобы настроить чувствительность оптического детектора плазмы.
Симуляция	В целях обучения или демонстрации можно использовать ASpect PQ без подключенного анализатора. При активации все функции прибора (включая сбор и обработку измеренных значений) обрабатываются в режиме симуляции.
Пропустить быстрый старт	Переход к интерфейсу ASpect PQ без выбора рабочего листа.
Настройте порты: AX/SDX	Только при подключенной системе разбавления Teledyne Cetac SDXHPLD с автосамплером ASX-560 При щелчке по кнопке занятые автосамплером и системой разбавления USB-порты настраиваются автоматически. Если установлен опциональный модуль 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ (управление пользователями), эту функцию может выполнять только пользователь с правами администратора.
Выход	Закрытие окна <b>Быстрый старт</b> и завершение работы программы ASpect PQ.
ОК	После выбора рабочего листа перейти к интерфейсу ASpect PQ.

Таблица рабочих листов

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

Вкладка	Содержание
Предпочтит.	Рабочие листы с обозначением <b>Избранное</b>
Недавние	Последние рабочие листы
Предварит. заданные	Рабочие листы Analytik Jena, которые устанавливаются вместе с ASpect PQ
Все	Все рабочие листы
	Значок лупы позволяет применить к рабочим листам фильтр по элементам. При щелчке по этому значку отображается список элементов, в котором можно выбрать элемент. Если понадобится найти другие элементы, выбор можно будет повторить. При выборе нескольких элементов отобразятся все рабочие листы, в которых содержится хотя бы один из элементов в сохраненном методе (логика ИЛИ). При этом поиск осуществляется как в методах, которые непосредственно связаны с рабочим листом, так и в методах, загружаемых в связанной последовательности.

## 1.2.2 Начало работы с рабочим листом

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

- ▶ Установите комплектующие на анализатор, после чего включите комплектующие и устройство.
- ▶ Запустите программное обеспечение.
  - ✓ Откроется окно **Быстрый старт**.

- ▶ Введите необходимые данные в поля **Оператор** и **Лаб..**
- ▶ Выберите кварцевое стекло или керамику в разделе **Материал горелки**.
- ▶ Выделите требуемый рабочий лист в таблице рабочих листов.
- ▶ Нажмите кнопку **ОК**.
  - ✓ Появится интерфейс ASpect PQ. Метод и последовательность уже загружены.

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

### 1.2.3 Начало работы без рабочего листа

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

- ▶ Установите комплектующие на анализатор, после чего включите комплектующие и устройство.
- ▶ Запустите программное обеспечение.
  - ✓ Откроется окно **Быстрый старт**.
- ▶ Введите необходимые данные в поля **Оператор** и **Лаб..**
- ▶ Выберите кварцевое стекло или керамику в разделе **Материал горелки**.
- ▶ Нажмите кнопку **Пропустить быстрый старт**.
  - ✓ Появится интерфейс Aspect PQ.

Основной ход процедуры измерения

Укажите метод и последовательность выполнения анализа и запустите процедуру измерения. Для процедуры автоматического или ручного измерения необходимо выполнить следующие действия:

- ▶ Указать **параметры** в методе (разработка метода). Загрузить метод.
- ▶ 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 начала измерения данные результатов постоянно вводятся в список результатов в главном окне. Детальное представление результатов (например, отдельные значения, спектры) можно открыть, выбрав соответствующую строку пробы. Последние полученные результаты всегда добавляются в конец таблицы; перезапись результатов невозможна.

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

### 1.2.4 Открытие ASpect PQ 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 Офлайн Ступень программы**.

### 1.2.5 Блокировка ASpect PQ

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

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

## 1.3 Завершение работы ASpect PQ

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



### ПРИМЕЧАНИЕ

При завершении работы ASpect PQ во время горения плазмы после запроса плазма будет погашена автоматически!

#### См. также

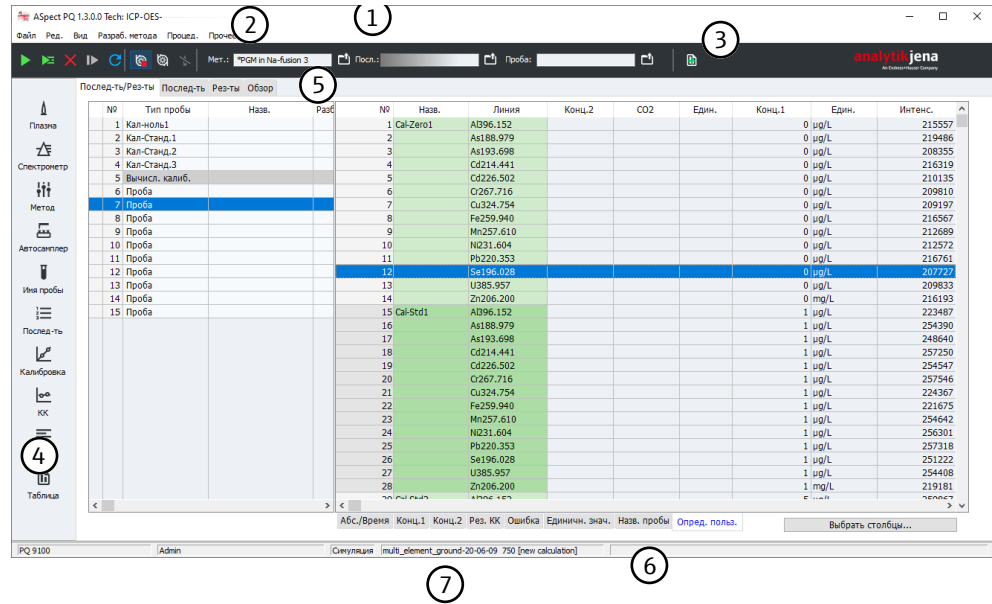
- 📖 Включение спектрометра и зажигание плазмы [▶ 67]


## 1.4 Общие инструкции по эксплуатации

### 1.4.1 Рабочий интерфейс



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

Основные компоненты рабочего интерфейса



№	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 отображаются последовательность и результаты измерений.
6	Некоторые основные вкладки содержат дополнительные подвкладки, расположенные в нижней области окна.
7	В панели состояния внизу выводится информация о подключенном приборе, зарегистрированном пользователе и имени отображаемой в данный момент базы данных результатов.

См. также

-  Отображение результатов и процесса анализа в главном окне [▶ 77]
-  Окно Быстрый старт [▶ 8]

1.4.2 Использование справки

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

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

### 1.4.3 Обзор строки меню, панели инструментов и строки символов

#### Функции строки меню

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

Пункт меню	Описание
<b>Файл</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Создание, открытие и сохранение методов, последовательностей и данных с информацией о пробах</li> <li>■ Открытие файлов результатов</li> <li>■ Удаление методов и последовательностей</li> <li>■ Экспорт данных спектров</li> <li>■ Печать активного окна или отчета</li> <li>■ Запуск режима печати отчета</li> <li>■ Запуск программы в режиме офлайн или онлайн</li> <li>■ Откройте окно <b>Быстрый старт</b></li> <li>■ Завершение работы программы</li> <li>■ Непосредственный вызов последних открытых методов и последовательностей</li> </ul>
<b>Ред.</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Копирование и вставка содержимого текстовых полей и областей ввода</li> <li>■ Копирование выделенных строк списка результатов в буфер обмена</li> <li>■ Удаление содержимого списка результатов</li> </ul>
<b>Вид</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Открытие и закрытие окон, отображающих графики и информацию во время процесса анализа, например, кривые сигналов.</li> <li>■ Выбор шкалы оси сигнала для графиков</li> </ul>
<b>Разраб. метода</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Открытие окон, обходимых для разработки методов</li> <li>■ Запись обзорного спектра</li> </ul>
<b>Процед.</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Запуск, приостановка и отмена процесса измерения</li> <li>■ Пересчет результатов</li> <li>■ Удаление калибровки</li> <li>■ Гашение плазмы</li> <li>■ Промывка системы</li> </ul>
<b>Система</b>	<p>Доступно при установленном опциональном модуле 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Конфигурирование системы управления пользователями</li> <li>■ Изменение пароля</li> <li>■ Просмотр контрольного журнала (Audit Trail)</li> <li>■ Подписывание результатов</li> </ul>
<b>Прочее</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Открытие окон <b>Данные</b> и <b>Опции</b></li> <li>■ Открытие списка линий</li> <li>■ Поиск проб</li> <li>■ Печать текущего вида экрана</li> <li>■ Проверка и проведение обслуживания (рециркуляционный охладитель)</li> <li>■ Блокировка рабочего места</li> </ul>
<b>?</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Просмотр справки и информации о версии ПО</li> </ul>






#### Панель инструментов






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

Инструменты	Описание
	Запуск процедуры измерения
	Измерение выделенных строк в последовательности
	Прерывание текущей процедуры измерения
	Продолжение прерванного последовательного измерения
	Пересчет результатов
	Запуск/ остановка насоса ИСП-ОЭС
	
	Ускорение насоса (промывка пути подачи пробы)
	Гашение плазмы (быстрое отключение)
	Открыть файлы Сохраненные методы, последовательности или идентификаторы проб можно загрузить в программу и использовать для текущего анализа.
	Создать новый рабочий лист
<b>Пров. плазму</b>	Активировать плазма-камеру Программа постоянно отображает изображение с камеры с записью плазмы. Возможные нарушения, такие как образование кольцевой плазмы в процессе зажигания, быстро распознаются.  Изображение с камеры можно обрезать с помощью команды меню <b>Установки   Обрез.изоб.камеры</b> в окне камеры.

Строка символов

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

Значок	Описание
	Контроль атомизации: <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Розжиг/гашение плазмы</li> <li>▪ Настройки газовых потоков</li> <li>▪ Проверка насоса для подачи пробы на распылитель</li> <li>▪ Юстировка передающей оптики</li> <li>▪ Оптимизация мощности плазмы и газа в распылителе</li> </ul>
	Проверка функций спектрометра: <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Данные устройства</li> <li>▪ Тестирование коррекций длин волн</li> <li>▪ Запуск измерения на тестовой длине волны</li> <li>▪ Запуск непрерывного измерения для оптимизации устройств</li> </ul>
	Открыть окно метода
	Настройка автосамплера
	Открыть окно с информацией о пробах

Значок	Описание
	Открыть окно последовательности
	Открыть окно калибровки
	Открыть окно с данными контроля качества
	Открытие системы управления данными
	Управление рабочими листами, открытие сохраненных рабочих листов



#### 1.4.4 Наиболее часто используемые элементы управления

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

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

Основные кнопки

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

Экранная кнопка	Описание
ОК	Закрывает окно и применяет настройки
Отмена	Закрывает окно, отклоняет изменения
Принять	Применяет настройки, не закрывая окно
Закреть	Закрывает окно, настройки не сохраняются
Откр.	Открывает выбранное окно для загрузки файла или блока данных
Сохран.	Открывает выбранное окно для сохранения файла или блока данных
	Открывает диалоговое окно выбора, например, для выбора пути
	Открывает окно <b>Печать</b> . Из этого окна можно распечатать содержимое активного окна или экспортировать файл

Таблицы

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

Исходные...      Таблица калибровки

В некоторых окнах значения вводятся непосредственно в таблицы. В зависимости от типа записи, ячейка таблицы функционирует как область ввода, раскрывающий 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 столбцам таким образом, чтобы курсор превратился в двойную стрелку. Отрегулируйте ширину столбца, удерживая левую кнопку мыши.

В областях ввода дополнительно доступны следующие функции:





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

Кнопки в таблицах

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

Графики

В графиках с помощью правой кнопки мыши можно открыть контекстное меню, чтобы скопировать график или все окно в графическом формате в буфер обмена Windows. Во многих окнах с графиками доступны дополнительные кнопки строки символов:

Символ	Функция
	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

Символ	Функция
F1	Вызов контекстно-ориентированной справки

Символ	Функция
F2	Редактирование ячеек таблицы
F5	Запуск печати содержимого экрана
F6	Измерение выделенной строки последовательности (пункт меню <b>Процед.   Старт выдел. строки пос-ти... F6</b> )
F7	Отображение дополнительных окон (например, кривая сигнала)
F8	Закрытие дополнительных окон
F10	Переключение между строкой меню рабочей области и окном результатов для работы с клавиатуры
F11	Продолжение остановленного измерения (пункт меню <b>Процед.   Продолжить</b> )
F12	Запуск и остановка измерения (пункты меню <b>Процед.   Старт пос-ти... F12</b> и <b>Процед.   Стоп F12</b> )


Использование принтера

В ASpect PQ используется настроенный в Windows принтер по умолчанию.

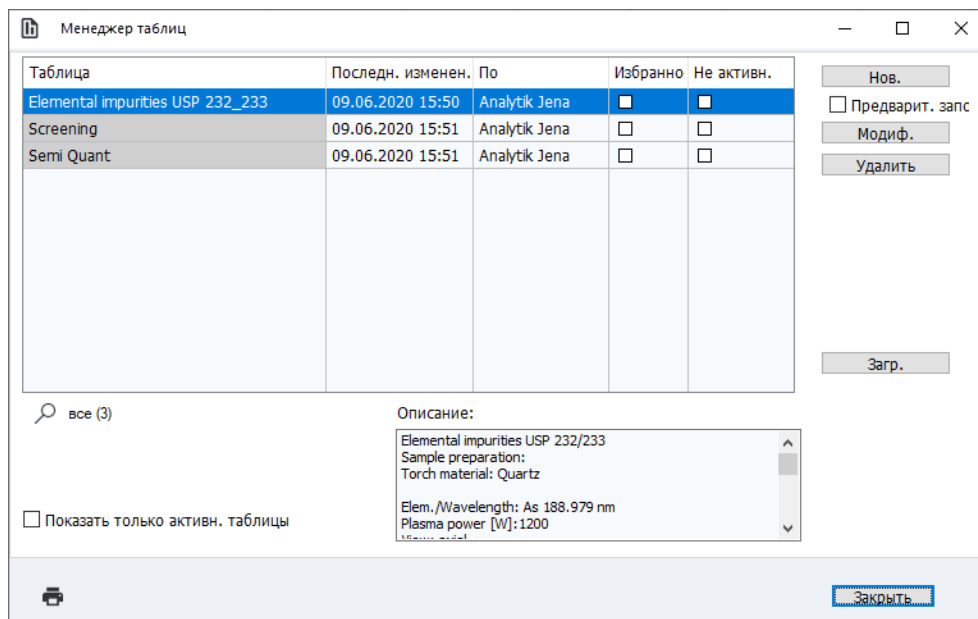
## 2 Рабочие листы

Рабочий лист - это папка, в которой находятся метод и последовательность. Кроме того, в рабочем листе можно сохранить настройки идентификационного файла пробы и 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



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

В таблице представлена следующая информация о рабочих листах:

Столбец таблицы	Описание
Таблица	Имя рабочего листа
Последн. изменен.	Дата последнего измерения рабочего листа
По	Этот пользователь внес последнее изменение. Имя пользователя меняется из окна быстрого запуска.
Избранное	Если активировано, рабочий лист отображается на вкладке <b>Предпочтит.</b> в окне <b>Быстрый старт</b>

Столбец таблицы	Описание
Не активн.	Если активировано, данный рабочий лист не отображается в окне быстрого запуска. Рабочий лист, отмеченный как неактивный, можно загрузить из окна <b>Менеджер таблиц</b> .



**См. также**



📖 Начало работы с рабочим листом [▶ 9]

## 2.1 Создание нового рабочего листа



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

Элементы в окне Новая таблица

Поле / опция	Описание
Назв.	Ввод имени рабочего листа
Метод	Метод, сохраненный в рабочем листе Нажав на  , откройте окно базы данных и выберите метод.
Послед-ть	Последовательность, сохраненная в рабочем листе Нажав на  , откройте окно базы данных и выберите последовательность.
Назв. пробы	Дополнительно можно выполнить настройки для загрузки идентификационного файла пробы:

Поле / опция	Описание
	<p><b>(нет):</b> Настройки идентификационного файла пробы не сохраняются.</p> <p><b>Открыть папку с файлами Sample ID:</b> После загрузки рабочего листа откроется папка, в которой уже находится идентификационный файл пробы. Нажмите на  и выберите папку.</p> <p><b>Загрузить файл Sample ID:</b> 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.</p>
<b>Файл результатов</b>	<p>Дополнительно можно выполнить настройки для сохранения результатов:</p> <p><b>(нет)</b> Измерение запускается в окне Старт, в котором указывается имя файла результатов и его расположение.</p> <p><b>Всегда создавать новый файл (добавлять печать времени)</b> Каждый из файлов результатов последовательности сохраняется в новом файле. Имя файла состоит из постоянной части (имени) и метки времени измерения. Выберите папку, в которой будет сохранен файл, и введите имя.</p> <p><b>Создать и добавить к файлу</b> При первом запуске последовательности создается файл результатов. При каждом последующем запуске последовательности результаты добавляются к этому файлу.</p>
<b>Описание</b>	<p>В поле <b>Описание</b> по умолчанию отображаются некоторые параметры анализа, извлеченные из метода. Вы можете произвольно редактировать эту информацию, чтобы предоставить конкретные указания по использованию рабочего листа. Введенные данные для выбранного листа появляются в окне быстрого запуска и в окне <b>Менеджер таблиц</b>.</p>
<b>Избранное</b>	<p>Щелчок по звездочке позволяет добавить рабочий лист в Избранное:</p> <p>Желтая звездочка: Избранное</p> <p>Серая звездочка: Не избранное</p>
<b>Не активн.</b>	<p>Если активировано, данный рабочий лист не отображается в окне быстрого запуска.</p> <p>Рабочий лист, отмеченный как неактивный, можно загрузить из окна <b>Менеджер таблиц</b>.</p>

Спецификация рабочего листа


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

**См. также**

-  Запуск процедуры измерения [▶ 70]


## 2.2 Редактирование рабочего листа

Можно редактировать все настройки в имеющемся рабочем листе.

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

## 2.3 Загрузка рабочего листа

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

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

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




### ПРИМЕЧАНИЕ

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

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

## 2.4 Удаление рабочего листа

Ненужный рабочий лист можно удалить.


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

## 3 Методы

В методах сохранены необходимые для анализа параметры:

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

На основании метода можно создавать последовательности измерения. Последовательности определяют, в каком порядке будут обрабатываться пробы и операции в одной процедуре измерения. Сохраненные методы можно использовать для анализа с разными последовательностями.

Открыть окно **Метод** можно щелчком по значку  в строке символов. Отобразится последний активный метод. Если после запуска ASpect PQ Вы не загрузили метод, в окне отображаются настройки по умолчанию, или окна пустые.

### 3.1 Создание, сохранение и загрузка методов

Методы сохраняются в базе данных. Если Вы измените существующий метод и сохраните измененный метод под тем же именем, программа создаст новую версию метода. Т. е., невозможно перезаписать и тем самым случайно удалить существующий метод.

Другие функции для экспорта, импорта или удаления методов находятся в окне **Данные | Управл. данными**.

См. также

-  Управление методами и последовательностями [▶ 127]

#### 3.1.1 Создание нового метода

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

- ▶ Выберите пункт меню **Файл | Создать новый метод**.  
Если Вы еще не активировали метод, в качестве альтернативы можете также нажать на .
- ▶ Активируйте одну из трех опций в окне **Новый метод**:
  - **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 **Загр. метод**.
- ▶ Подтвердите выбор, нажав **ОК**.
  - ✓ Откроется окно **Метод** с выбранными преднастройками.

- ▶ Укажите метод на различных вкладках и выполните необходимую оптимизацию.
- ▶ Примените установленные параметры метода с помощью кнопок **ОК** 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.

#### См. также

📄 Спецификация параметров метода [▶ 26]


### 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 рабочие листы. Методы сохраняются в базе данных в окне **Сохранение метода**. При этом Вы можете вносить другие данные для отнесения метода к категории и облегчения его поиска.

Элементы в окне Сохранение метода

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

Опция	Описание
<b>Назв.</b>	Наименование метода
<b>Кат.</b>	Категория (три символа) для дальнейшей маркировки и упорядочивания методов  Ввод является опциональным. Если установлен модуль соответствия FDA 21 CFR Part 11, Вы можете использовать выбранные категории, чтобы отметить метод как утвержденный. Категории утвержденных методов определяются в настройках системы управления пользователями.
<b>Таблица</b>	Обзор существующих методов
<b>Сорт. по</b>	Опции этой группы позволяют упорядочить список методов. При активированном контрольном поле <b>Только текущ. версия</b> при одноименных методах будет отображаться только последняя версия.
<b>Используй. как рутинный метод</b>	При активированном контрольном поле метод будет доступен в программном режиме <b>Процедура</b> . Выбор программного режима осуществляется в окне <b>Быстрый старт</b> .

Опция	Описание
	При установленном дополнительном модуле 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ эта опция недоступна для выбора.
<b>Предустан.методы</b>	Сохранение существующих калибровочных кривых в методе Калибровочные кривые можно будет использовать для дальнейших анализов.
<b>Описание</b>	Ввод более подробных пояснений по методу (опция)  Щелчок по значку  открывает список предварительно заданных комментариев. Управление этими комментариями осуществляется в окне <b>Данные   Описания по умолчанию</b>

Сохранение метода




- ▶ В окне **Метод** нажмите **Сохранить** или выберите пункт меню **Файл | Сохранить | Метод**.
  - ✓ Откроется окно **Сохранить метод**.
- ▶ Введите имя метода и выберите другие параметры.
  - ✓ 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 Вы можете восстановить метод из файла результатов. Другие функции управления методами доступны в окне **Данные | Управл. данными**.


### См. также

-  Общие настройки системы управления пользователями [▶ 153]
-  Окно Быстрый старт [▶ 8]
-  Управление методами и последовательностями [▶ 127]

### 3.1.3 Загрузка метода


Вы можете загрузить сохраненные методы и вместе с последовательностью запустить процедуру измерения. 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 щелкните по значку папки  рядом с полем **Метод**.
  - Выберите пункт меню **Файл | Загрузить метод**.
  - В окне **Метод** нажмите кнопку **Открыть**.
- ▶ Выберите требуемый метод из списка.
- ▶ В поле **Кат.** можно ограничить отображаемые методы, выбрав категорию. Для отображения всех методов удалите запись в поле **Кат.**
- ▶ Активируйте контрольное поле **Только текущ. версия**, если для одноименных методов следует отобразить только метод с наибольшим номером версии.
- ▶ Выйдите из окна **Метод**, нажав кнопку **ОК**.
  - ✓ Вы загрузили нужный метод. Метод отображается на панели инструментов в поле **Мет.**


Загрузка из файла результатов

Из отображенного в главном окне файла результатов можно извлечь метод.

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



### 3.2 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**

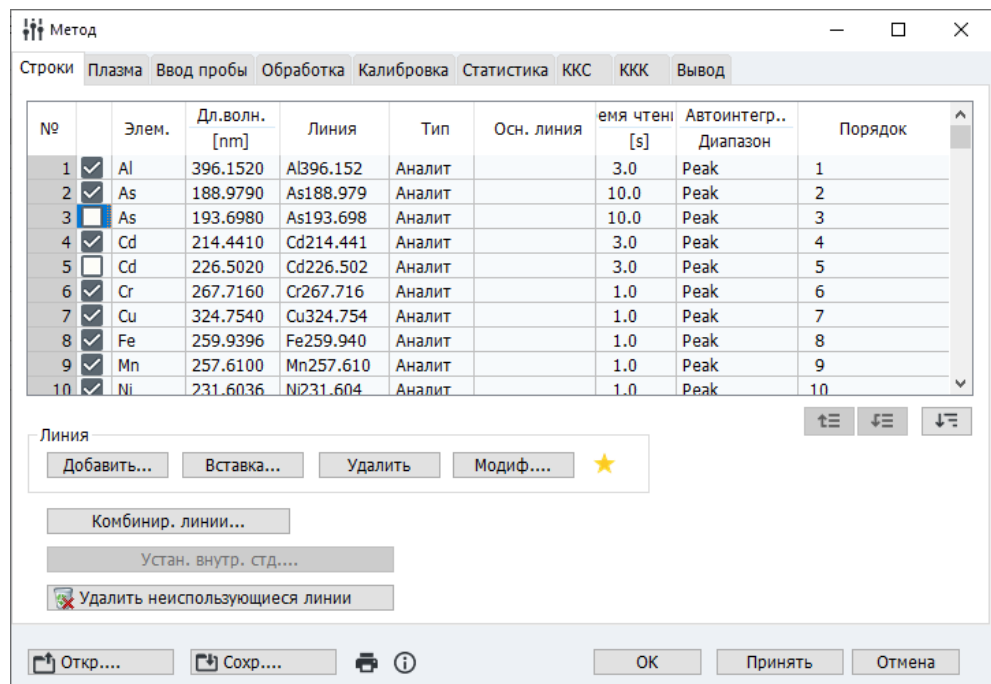
В нижней области окна расположены всегда доступные кнопки.

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

#### 3.2.1 Спецификация аналитических линий (окно Метод | Строки)





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

Окно Метод | Строки



Параметры таблицы линий

Столбец таблицы	Описание
№	Последовательность выбранных линий в таблице
<input type="checkbox"/> / <input checked="" type="checkbox"/>	<p>Доступно только в режиме <b>Разраб. метода</b> (не с модулем 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ)</p> <p>Отметка облегчает разработку метода, при которой в начале измеряется несколько линий одного элемента, после чего выбирается подходящая линия. Линия элемента, активированная флажком, используется для анализа и измеряется. Деактивированные линии исключены из последующего анализа и не измеряются. Деактивированные линии не удалены в явном виде из таблицы линий.</p>

Столбец таблицы	Описание
Элем.	Символ анализируемого элемента
Длина волны	Длина волны аналитической линии в нм
Линия	Наименование аналитической линии В настройке по умолчанию наименование линии состоит из символа элемента и длины волны. Наименование можно произвольно редактировать, и оно должно быть однозначным.
Тип	Выбор между <b>Аналит</b> (анализируемая линия) и <b>Внутр.станд.</b> (внутренняя базовая линия)
Осн. линия	Выбор и отображение аналитической линии, с которой одновременно измеряется текущая линия (синхронное измерение) Время измерения можно сократить, зарегистрировав линии, расположенные почти рядом, посредством настройки спектрометра. При щелчке по <b>Комбинир. линии</b> отобразятся возможные сочетания.
Время чтения	Общее время измерения для аналитической линии
Автоинтегр. Диапазон	Автоматический выбор времени интегрирования, так, чтобы CCD-детектор оптимально освещался, и не возникало пересвета. При пересвете не принятый пикселем избыточный заряд растекается на соседний пиксель и вызывает погрешность измерения (эффект блюминга). Для определения времени интегрирования необходимо выбрать соседний участок: <b>Спектр</b> Время интегрирования оптимизируется под самый высокий пик в спектральной области линии. Эта опция установлена по умолчанию и дает надежный результат. <b>Peak</b> Время интегрирования оптимизируется под пик анализа. При выборе этой опции для анализа оптимально используется динамический диапазон CCD-детектора. Однако следует обратить внимание на то, что не в непосредственной близости пикселя анализа расположен более высокий пик. В этом случае результат измерения может быть искажен эффектом блюминга. <b>Детектор</b> Время интегрирования настраивается по самому высокому пику на детекторе. При этой опции нет засвеченных областей детектора, при определенных обстоятельствах пиксели пика анализа освещаются неоптимально.
Порядок	Последовательность в ходе анализа Последовательность измерения может быть задана произвольно. <b>Примечание:</b> После выделения числа и щелчка по значку  последующих строк числа будут упорядочены по возрастанию. Вы можете упорядочить выделенные строки (элементные линии) в таблице щелчком по значку  и  в желаемой последовательности измерения, ввести в первой строке под последовательностью «1» и, щелкнув по значку  , упорядочить последовательность измерения по возрастанию всех других аналитических линий.




Кнопки группы Строки

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

Дополнительные кнопки и флажки

Экранная кнопка	Описание
<b>Комбинир. линии</b>	Поиск комбинаций аналитических линий, которые можно регистрировать вместе посредством настройки спектрометра Эти аналитические линии можно измерять синхронно.
<b>Устан. внутр. std.</b>	Привязка аналитических линий ко внутреннему стандарту и их коррекция
<b>Удалить неиспользующиеся линии</b>	Доступно только в программном режиме <b>Разраб. метода</b> (не с модулем 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ) Удаление всех деактивированных линий из списка методов. <b>Примечание:</b> если в таблице линий используются все линии, методы можно сохранять и использовать только как штатные методы.
<b>Оптимиз. порядок измер.</b>	Автоматическая сортировка аналитических линий по длине волны и условиям измерения для сокращения общего времени измерения Если флажок активирован, ручная сортировка аналитических линий больше невозможна. <b>Примечание:</b> время измерения зависит от количества и сортировки аналитических линий и условий измерения. Это означает, что посредством выбора одинаковых параметров для плазмы и передающей оптики можно также сократить время измерения для многих аналитических линий.

См. также

-  Синхронное измерение линий [▶ 31]
-  Наиболее часто используемые элементы управления [▶ 15]
-  Определение внутренних стандартов [▶ 32]

### 3.2.1.1 Вставка аналитических линий в таблицу линий

Элементы в окне Выбрать элемент/линию

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

Вкладка **Элементы** содержит периодическую систему со всеми анализируемыми в ИСП-ОЭС элементами (с темно-серыми экранными кнопками и черными значками элементов). Выделенные серым элементы недоступны. Вкладка **Наложения линий** отображает известные возможные помехи для выбранной линии с относительной чувствительностью.

Выбор элемента/линии

Элементы Наложения линий Выбор элемента: Si

Элемент	Дл.волн. [nm]	Линия	Теги
Si	212.4120	Si212.412	Анализ материа
Si	251.6112	Si251.611	Анализ материа
Si	212.4120	Si212.412	Геология/Горн.
Si	251.6112	Si251.611	Геология/Горн.
Si	288.1577	Si288.158	Геология/Горн.
Si	251.6112	Si251.611	Еда/Аграрн. сек
Si	288.1577	Si288.158	Нефтеперерабс
Si	251.6112	Si251.611	Нефтеперерабс
Si	251.6112	Si251.611	Металлургия/Га
Si	288.1577	Si288.158	Металлургия/Га
Si	251.6112	Si251.611	Окруж. среда/В

Si212.412

Наложения линий

Si I

Sc I

S II

Длина волны [nm]

Расширенный каталог линий

Линии польз-ля...

Отменен.выдел.

Детали...

Строки Предпочтит.

OK Отмена

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

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

Столбец таблицы	Описание
Элемент	Элемент
Дл.волн.	Аналитическая длина волны в Нм
Тип	Отображение типа атомизации: I: атомная линия II: ионная линия
БЕК (ВЕС)	Стандартное значение ФЭК (фоновая эквивалентная концентрация) линии аналита  Значение ФЭК (фоновая эквивалентная концентрация) – концентрация анализируемого вещества, порождающая сигнал, эквивалентный фоновому. Тем самым меньшее значение соответствует более высокой чувствительности.  Значения ФЭК определялись при следующих условиях: обзор в осевом направлении, мощность 1200 Вт, поток плазмообразующего газа 12 л/мин, поток вспомогательного газа 0,5 л/мин, поток газа распылителя 0,6 л/мин.
Ряд	Иерархия рекомендуемой аналитической линии  Рекомендуемая аналитическая линия зависит как от чувствительности, так и от возможных помех от соседних линий других элементов. Чем выше линия находится в иерархии, тем выше шансы успешного получения с аналитической линией хороших результатов.

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

## Выбор линий

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

- ▶ В окне **Метод | Строки** выберите **Добавить** или **Вставка**.
  - ✓ Откроется окно **Выбрать элемент/линию**.
- ▶ Если в периодической системе щелкнуть по одному из темно-серых значков элементов, в таблицах **Строки** и **Предпочтит.** отобразятся только линии выбранного элемента.
 

В качестве альтернативы можно ввести значок элемента в поле **Выбор элемента**.

Для отображения полного списка элементов в таблице линий очистите поле **Выбор элемента**.
- ▶ В листе таблицы **Предпочтит.** выделите линии согласно вашей задаче или в таблице **Строки** установите флажки для нужных линий.
- ▶ Перейдите во вкладку **Наложения линий** и проверьте выбранные линии на известные интерференции.
- ▶ Продолжайте, пока не выберете линии для каждого анализа. Выйдите из окна, нажав кнопку **ОК**.
  - ✓ Выделенные линии сохраняются в окне **Метод | Строки**.

**Примечание:**

в ходе разработки метода выбирайте несколько линий для каждого анализа.

## Расширенный каталог линий

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

- ▶ В окне **Выбрать элемент/линию | Элементы** выберите **Расширенный каталог линий**.
- ▶ В списке выделите мышью нужные линии.
 

Повторный щелчок мыши по отдельной линии позволяет снять выделение. Кнопка **Отменен.выдел.** позволяет снять все выделения.
- ▶ Щелчком по кнопке **Добавить к таблице линий** добавьте выбранные линии в список.



Создание и редактирование собственных аналитических линий

**ПРИМЕЧАНИЕ**

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

Можно создавать собственные аналитические линии и использовать их для анализа.

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

Вы можете редактировать собственные линии или удалять их из списка.

- ▶ Чтобы отредактировать линию в собственном списке, щелчком мыши выделите линию в списке окна **Ред. линии**.
 

Введите новые данные линии и нажмите кнопку **Модиф.].**

- ▶ Удалить выделенную запись из списка можно кнопкой **Удалить**].

### См. также

- 📄 Определение собственных избранных линий [▶ 32]

## 3.2.1.2 Синхронное измерение линий

Линии, которые регистрируются вместе посредством настройки спектрометра, можно измерить синхронно, сократив тем самым время анализа. Функция **Комбинир. линии** позволяет найти эти линии в текущем методе и объединить их для анализа.

- ▶ В окне **Метод | Строки** нажмите **Комбинир. линии**.

Появится одноименное окно с обзором возможных сочетаний линий.

Элементы в окне **Комбинир. линии**

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

Комбинир. линии

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

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


Столбцы таблицы/ экранная кнопка	Содержание
Контрольное поле/флажок	Если установлен, соответствующее сочетание линий в методе будет измеряться синхронно.
<b>Осн. линия</b>	Для измерения сочетания линий используются параметры измерения <b>Осн. линия</b> . <b>Линия</b> Наименование основной линии <b>Дл.волн.</b> Длина волны основной линии в Нм
<b>Доп. линия</b>	<b>Линия</b> Наименование дополнительной анализируемой линии <b>Дл.волн.</b> Длина волны в Нм дополнительной анализируемой линии
<b>Дл.волн.изм.</b>	Измеренная длина волны в Нм (середина строки детектора)
<b>Статус</b>	Комментарии
<b>Нет скомбинир. линий</b>	Снятие всех выделений Линии в методе не будут измеряться вместе.

Столбцы таблицы/ экранная кнопка	Содержание
Использ. для измерения	В сочетании линий меняет местами основную и дополнительную линию.

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


### 3.2.1.3 Определение собственных избранных линий

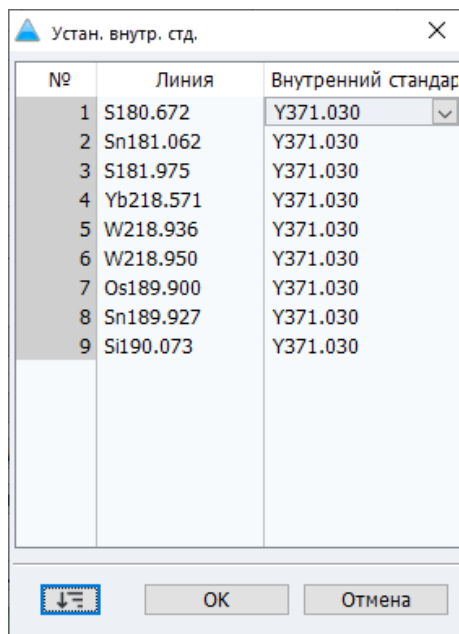
Предпочтительные аналитические линии можно добавить в список избранного с указаниями по предпочтительному использованию. Под этой записью сохраняются данные по аналитической линии со всеми существенными для линий параметрами метода. Список избранного доступен при каждом выборе элементных линий.

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

### 3.2.1.4 Определение внутренних стандартов

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

- ▶ Вставьте аналитическую линию, которую вы хотите использовать как внутренний стандарт, в таблицу линий, и выберите в столбце таблицы **Тип** опцию **Внутр.станд..**
- ▶ Выберите **Устан. внутр. std..**  
Откроется окно **Устан. внутр. std..**
- ▶ В таблице назначьте внутренний стандарт (-ы) нужным аналитическим линиям. Для этого в столбце **Внутренний стандарт** щелкните по соответствующей строке и выберите внутренний стандарт из списка.
- ▶ Щелчок по значку  применяет настройки для аналитической линии ко всем последующим линиям в таблице.
- ▶ При нажатии кнопки **ОК** настройки применяются к методу.

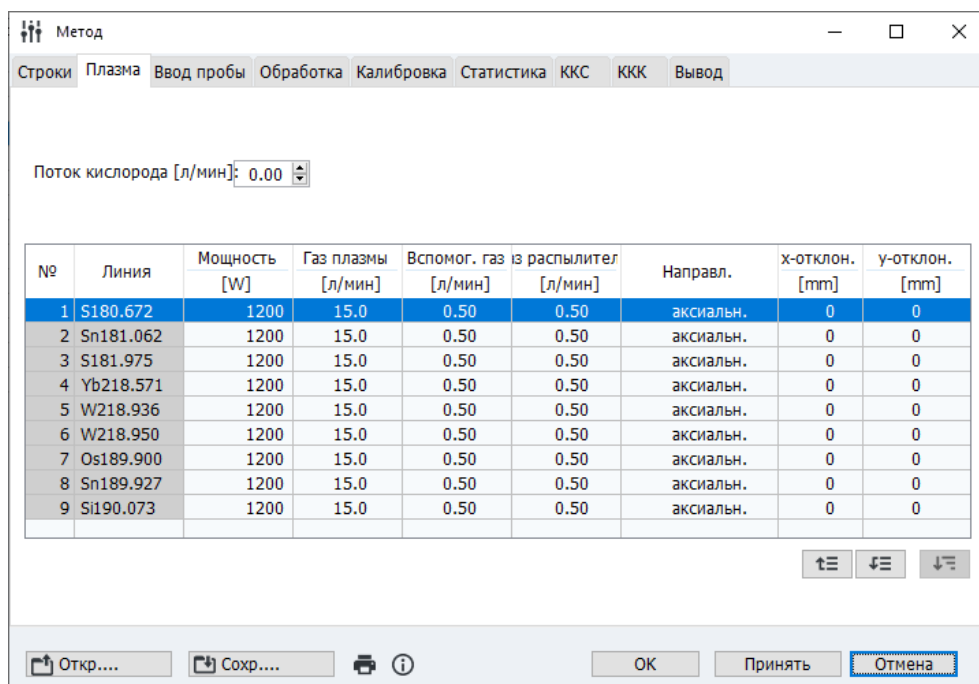


### 3.2.2 Настройка параметров плазмы и передающей оптики (окно Метод | Плазма)

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

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

Элементы в окне Метод | Плазма



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

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



## ПРИМЕЧАНИЕ

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

Использование кислорода

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

- ▶ В поле **Поток кислорода** настройте поток газа.

## См. также

Юстировка и оптимизация плазмы [▶ 111]

### 3.2.3 Настройка подачи пробы (окно Метод | Подача пробы)

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

- Скорости нагнетания насоса анализатора
- Использование автосамплера
- Параметры промывки

Окно Метод | Подача пробы

Продолжительность нагнетания на ИСП-ОЭС

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



## ПРИМЕЧАНИЕ

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

Использование автосамплера

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

Промывка и контроль очистки

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

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

Опция	Описание
<b>Промывка</b>	<b>выкл.</b> Режим промывки отключен. Промывка не проводится автоматически. <b>Между пробами</b> Промывка после каждой пробы, но не в пределах статистической серии
<b>Время промывки</b>	Время промывки пути подачи пробы до горелки.
<b>Мойка: только быст.реж.</b>	Этап промывки выполняется только во время ускоренного хода. При отключенной опции сначала промывка производится на ускоренном ходу в течение введенной продолжительности ускоренного хода ( <b>Время быстр. режима</b> ), а оставшееся время промывки – на стандартной скорости.
<b>Управляемая очистка</b>	Если опция активирована, при превышении концентрации автоматически выполняется контролируемая очистка
<b>Контр.предел (Интенс.)</b>	Значение уровня сигнала, которое должно быть достигнуто в ходе промывки до измерения следующего раствора
<b>Линия</b>	Элементная линия, которая используется как контрольная

### 3.2.4 Оценка пиков (окно Метод | Обработка)

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



## ПРИМЕЧАНИЕ

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

## Окно Метод | Обработка

Метод

Строки Плазма Ввод пробы Обработка Калибровка Статистика ККС ККК Вывод

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

↑ ↓ ↕

Спектр. коррекции...  
Факторы ИЕС...

Откр.... Сохр.... ОК Принять Отмена

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

Столбец таблицы	Описание
	<p><b>LSM</b> Спектральная коррекция методом наименьших квадратов</p> <p><b>IEC</b> Спектральная коррекция путем поправки на матричные эффекты (Inter Element Correction)</p>
<b>Постр.КФ</b>	<p>Настройка пикселей для коррекции фона</p> <p><b>выкл.</b> Коррекция фона не осуществляется</p> <p><b>динамич.</b> Поиск пикселей для коррекции фона осуществляется автоматически программой.</p> <p><b>статич.</b> Пиксели для коррекции фона задаются пользователем в столбце <b>Пиксели КФ</b>.</p>
<b>Пиксели КФ</b>	<p>Положение пикселей относительно анализируемого пикселя при статической настройке коррекции фона</p> <p>Введите номера пикселей для коррекции фона.</p>

Экранные кнопки

Экранные кнопки	Описание
<b>Спектр. коррекции</b>	Назначение аналитическим линиям модели для спектральной коррекции
<b>Факторы IEC</b>	Назначение аналитическим линиям поправки на матричные эффекты

**См. также**

- 📖 Оценка пика и определение коррекции фона – окно Ред. спектр | Обработка [▶ 87]

### 3.2.4.1 Спектральная коррекция методом наименьших квадратов

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

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

**См. также**

- 📖 Устранение спектральных помех – окно Ред. спектр | Спектр. коррекции [▶ 89]

### 3.2.4.2 Поправка на матричные эффекты

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

Раствор из единичного элемента (раствор для анализа с использованием метода поправки на межэлементное влияние) позволяет определить соотношение обеих линий мешающего компонента (наложенная линия и линия без помех). Коэффици-

коэффициент поправки на межэлементное влияние используется при последующих измерениях проб для вычитания мнимой интенсивности или концентрации мешающего компонента на линии анализа.

Элементы в окне назначить элементы IEC

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

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

Содержание таблицы

Столбец таблицы	Описание
Специфицировать r-ры IEC	Наименование мешающей аналитической линии
Помех.	Наименование мешающей линии
раствор IEC	Наименование раствора из единичного элемента, который содержит мешающий компонент. Спецификация IEC-растворов (растворов для анализа с использованием метода поправки на межэлементное влияние) задается кнопкой <b>растворы IEC</b> .
хол. IEC	Наименование раствора бланка, вычитаемого из интенсивности или концентрации мешающего компонента. Спецификация растворов бланка задается кнопкой <b>растворы IEC</b> .
Фактор IEC	Коэффициент IEC (коэффициент поправки на межэлементное влияние) Расчетные коэффициенты отображаются серым цветом.

Столбец таблицы	Описание
вручную	При установленном флажке коэффициент поправки на межэлементное влияние можно ввести вручную. Измерительные растворы не требуются.

Назначение поправки на матричные эффекты

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

Специфицировать р-ры ИЕС

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

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

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

Ввод коэффициентов вручную

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

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

### 3.2.5 Ввод параметров калибровки (окно Метод | Калибровка)

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

Окно Метод | Калибровка

Выбор метода калибровки

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

Метод градуировки	Описание
<b>Без калибр-ки</b>	Результаты пробы отображаются исключительно как интенсивность. Для таких измерений калибровка не требуется. В этом случае вводить какую-либо информацию во вкладку <b>Калибровка</b> не нужно. По логическим причинам список последовательностей должен состоять только из проб.
<b>Стандартн. калибр-ка</b>	Калибровка осуществляется с пробами, которые содержат анализируемое вещество в известной концентрации (стандартные растворы). Пробы неизвестной концентрации измеряются по этому стандарту калибровки.
<b>Метод добавок</b>	К неизвестной пробе добавляются различные объемы известной пробы, и затем эта смесь измеряется. Результатом уравнивания является концентрация аналита в пробе.
<b>Метод доб. калибр-ки.</b>	Калибровочная кривая, которая может быть использована для определения дальнейших концентраций, генерируется стандартной добавкой. Одновременно определяется концентрация первой пробы.
Опция	Описание
<b>вручную</b>	Растворы калибровочных стандартов предоставляются вручную.

Подготовка стандартов

Опция	Описание
приг. саплером	Только при использовании автосамплера Cetac SDXHPLD с автоматической функцией разбавления Изготовление стандартных растворов осуществляется путем разбавления исходного раствора в вихревом смесителе автосамплера.

Коррекция бланка

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


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

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 <b>линейн.</b> Линейный ход функции калибровки $y = a + bx$ <b>нелинейн. отнош.</b> Нелинейный ход функции калибровки, описанный дробно-рациональной функцией $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$ <b>нелинейн. квадр.</b> Нелинейный ход функции калибровки, описанный квадратической функцией $y = a + bx + cx^2$ <b>автоматич.</b> Для калибровки рассчитываются соответственно линейная и нелинейная функции. Суммы квадратов остатка сравниваются (тест Мандела). 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 <b>Опции   Калибровка</b> . По умолчанию здесь установлена дробно-рациональная функция. <b>Примечание:</b> для метода стандартных добавок и добавочной калибровки допустимы только линейные траектории кривой.
Пересечение	<b>Уст. нуля</b> Калибровочная кривая проходит точно через измеренную нулевую точку.

Столбец таблицы	Описание
	<p><b>Вычисл.</b> Нулевое значение включено в расчет, как и любая другая точка калибровки.</p>
<b>Навеска</b>	<p><b>нет</b> Все калибровочные точки учитываются одинаково.</p> <p><b>1/конец</b> Калибровочные точки, имеющие более низкие концентрации, учитываются в большей степени.</p> <p><b>1/CO</b> Точки с меньшим отклонением в пределах нескольких повторных измерений стандартного раствора принимаются в расчет в большей степени (необходимое условие: активирована опция статистики среднего значения).</p> <p><b>1/(CO*конец)</b> Сочетание методов расчета <b>1/конец</b> и <b>1/CO</b></p>
<b>Контроль</b>	<p>Программное обеспечение позволяет проводить автоматическую проверку полученных калибровочных кривых посредством прогнозируемого диапазона, который вычисляется на основе выбранной вручную статистической достоверности.</p> <p><b>нет</b> Для расчета кривой используются все измеренные и не удаленные калибровочные точки. Калибровочные точки никак не отмечаются и не удаляются.</p> <p><b>Удал. выбросы</b> Если калибровочные точки находятся за пределами полученного прогнозируемого диапазона, выбросы будут устранены путем F-теста (проверить, приводит ли игнорирование точки к значительному улучшению остаточного рассеяния):</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ F-тест выполняется с точкой калибровки, которая находится дальше всего за пределом прогнозируемого диапазона. Если игнорирование этой точки не ведет к существенному улучшению остаточного рассеяния, точка будет учитываться и дальнейшая оптимизация калибровочной кривой больше не выполняется.</li> <li>■ 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.</li> <li>■ 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.</li> <li>■ 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.</li> </ul>
Един.	Отдельный ввод единиц измерения концентрации для каждого элемента.

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

#### См. также

-  Опции для процесса анализа [ 140]

### 3.2.5.1 Установка параметров маточных стандартных растворов

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

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

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

См. также

- 📖 Управление базами данных для исходных растворов и проб КК [▶ 135]

### 3.2.5.2 Ввод таблицы калибровки

Данные стандартных растворов вводятся в таблицу калибровки.

Окно Таблица калибр-ки

Таблица калибр-ки

Кол-во стандартов: 1

Стандарты для кал. нуля: 5

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

Сместить выбранн. столбец

inc.

OK

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

Для стандартной технологии вводится количество стандартных калибровочных растворов (**Кал. стандарты**) и стандартные растворы кал. нуля (**Стандарты для кал. нуля**). При этом можно ввести несколько стандартных растворов нулей, например, если анализируемые элементы присутствуют в разных растворителях. В этом случае концентрация для соответствующих элементных линий устанавливается на «0», остальные столбцы остаются пустыми.

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

- ▶ Для изготовления стандартных растворов через подключенную систему разбавления необходимо для каждого калибровочного стандарта в строке **Исходн.** выбрать используемый маточный стандартный раствор, а в строке **Факт.разб.** – коэффициент разбавления.  
Для разбавления можно выбрать следующие коэффициенты: 1, 2, 5, 10, 15, 20, 25, 50, 75, 100, 200, 250, 500, 1000, 1500, 2000, 2500, 5000. Число коэффициентов разбавления ограничивается согласно настройкам диапазона в окне **Автосамплер | Разбавление**. Для коэффициентов разбавления 1 ... 100 разбавление осуществляется в один этап, для более высоких значений – в два этапа.
  - ✓ После выбора маточного стандартного раствора и коэффициента разбавления программа автоматически рассчитывает концентрацию для каждого стандартного калибровочного раствора и каждой аналитической линии.
- ▶ Стандартные концентрации, которые не будут измеряться, можно вручную удалить из таблицы, активировав флажок **Гибкий выбор**.  
Для повторной активации удаленных записей введите в соответствующие поля знак плюса (+) и подтвердите, нажав клавишу ввода или изменив ячейку с помощью мыши.

- ▶ При изготовлении калибровочных стандартных растворов вручную их концентрации также можно рассчитать, выбрав маточный стандартный раствор и введя коэффициент разбавления.  
Или введите для каждого стандартного раствора в таблице концентрацию для каждой аналитической линии.
- ▶ Для стандартных растворов, изготавливаемых вручную, в строке **Поз.** можно задать позицию стандартного раствора в автосамплере.  
Если автосамплер не используется, записи в этой строке не учитываются.  
Для автосамплера с функцией разбавления применяется позиция исходного раствора из базы данных исходных растворов.  
Распределение позиций автосамплера можно ввести и изменить в последовательности.
- ▶ Для рекалибровок, которые специфицированы как действие последовательности или как ряд КК-действий, необходимо выбрать как минимум один стандартный раствор кал. нулей и один калибровочный стандартный раствор или не менее двух калибровочных растворов в строке **Рекал.** Если для одной линии выбрано более двух стандартов повторной калибровки, используется соответственно самый низкий и самый высокий стандарт повторной калибровки.

#### См. также

- 📖 Установка параметров маточных стандартных растворов [▶ 44]
- 📖 Функция разбавления [▶ 118]

### 3.2.6 Установка параметров статистических оценок (окно Метод | Статистика)

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

Окно Метод | Статистика

Метод

Строки Плазма Ввод пробы Обработка Калибровка Статистика ККС ККК Вывод

Статистика:

Сигма-статистика

Медианн. статистика

Повторы

Пробы 3

Калиб.станд. 3

КК 3

Предв.выполн. 0

Довер. интервал выч.

выкл.

абсолютн.

относит.

Доверит. уровень

95.4% (2 Sigma)

Тест выбросов Грубса

Откр.... Сохранить... OK Принять Отмена

Тип статистики

Опция	Описание
<b>Сигма-статистика</b>	Расчет среднего значения и стандартного отклонения Статистика ошибок по среднему арифметическому: проба измеряется несколько раз после холостых циклов. Среднее арифметическое, среднеквадратическое и относительное среднеквадратическое отклонения рассчитываются по результатам измерения.
<b>Медианн. статистика</b>	Расчет медианы и диапазона (R). Статистика ошибок по медианному методу: проба измеряется несколько раз после пустых измерений, измеренные значения сортируются по величине. Отображенное значение медианы это: <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Значение из середины списка сортировки, если число циклов измерений нечетное.</li> <li>■ Значение среднего из двух измеренных значений в середине отсортированного списка, если число циклов измерения четное.</li> </ul> <p>Так как наименьшее и наибольшее отдельные измеренные значения не влияют на результат измерения, медианная статистика подходит для устранения выбросов.</p>

Количество повторов измерений

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

Тест выбросов Граббса

Для статистики среднего значения с как минимум тремя измерениями каждой пробы

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

Расчет доверительного интервала

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

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

Вероятность

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

## См. также

📄 Установка параметров контроля качества (окно Метод | ККС) [▶ 48]

### 3.2.7 Установка параметров контроля качества (окно Метод | ККС)

В окне **Метод | ККС** задайте параметры проб для контроля качества (пробы КК). В ходе последовательности 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 можно автоматически записывать во вкладки контроля качества (вкладки КК). Система вкладок КК предназначена для контроля качества в течение длительного периода времени. Вкладки КК сохраняются в методе и выполняются для каждого измерения по этому методу.

№	Линия	Эксп. увелич. к	ниже отклон. [%]	выше отклон. [%]	Карта КК	Реакц.!
1	Al396.152	9.5	10	10	-	-
2	As188.979	9.5	10	10	-	-
3	As193.698	9.5	10	10	-	-
4	Cd214.441	9.5	10	10	-	-
5	Cd226.502	9.5	10	10	-	-
6	Cr267.716	9.5	10	10	-	-
7	Cu324.754	9.5	10	10	-	-
8	Fe259.940	9.5	10	10	-	-
9	Mn257.610	9.5	10	10	-	-
10	Ni231.604	9.5	10	10	-	-

Элементы в окне Метод | ККС

Элементы	Описание
<b>Тип</b>	Эта проба КК отображается в таблице линий. Здесь редактируются параметры пробы КК.
<b>Назв.</b>	Имя отображенной пробы КК
<b>Реакция</b>	Процедура, которой необходимо следовать, если результаты пробы КК превышают установленные допустимые пределы или опускаются ниже этих пределов.
<b>Нов./Модиф.</b>	Определение новой пробы КК или изменение существующей пробы КК
<b>Удалить</b>	Удаление отображенной пробы КК
<b>Корр. по холост.</b>	Опционально для всех проб КК, за исключением стандартов КК и бланков КК, можно активировать коррекцию бланка
<b>Един.</b>	Указание единицы концентрации
<b>Общий вид: пробы КК</b>	Открытие списка со специфическими для линии параметрами всех проб КК

Элементы	Описание
Таблица линий	В таблице отображаются параметры пробы КК, выбранной в списке <b>Тип</b>

Типы проб КК

Можно задать следующие типы проб КК:

Опция	Описание
<b>КК проба</b>	<p>Определение пробы как пробы КК</p> <p>Концентрации пробы КК можно либо загрузить из базы данных, либо ввести их.</p> <p><b>из базы данных</b> В расположенном рядом списке выбрать соответствующую пробу КК. Управление базой данных проб КК осуществляется в окне <b>Метод   ККС</b>.</p> <p><b>ввести вручную</b> Ввод концентраций пробы КК непосредственно в таблицу</p> <p>Макс. количество проб КК: 50</p>
<b>КК станд.</b>	<p>Определение стандартного раствора как пробы КК</p> <p>В качестве стандарта КК можно использовать любой стандарт, указанный в калибровочной таблице.</p> <p>Возм. количество стандартов КК = количество стандартов в калибровочной таблице (макс. 65)</p>
<b>КК холост.</b>	Определение холостой пробы как пробы КК
<b>КК спайк</b>	<p>Определение пробы с добавленным объемом как пробы КК</p> <p>При выборе этой опции проверяются результаты измерения определенной добавки концентрации к одной или нескольким пробам. Для этого проба КК должна быть определена после любой пробы в таблице проб (базовая проба КК = проба + увеличение с раствором известной концентрации). После измерения разность концентраций (конц1 пробы и проба исходного раствора КК) сравнивается с указанным здесь ожидаемым повышением концентрации (Ехр. увелич. конц.), и рассчитывается скорость обнаружения.</p>

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

Опция	Описание
<b>КК тренд</b>	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.
<b>КК матрица</b>	Перед подготовкой пробы анализируемая проба разделяется. Обе части проходят отдельно через все этапы подготовки и помещаются на автосамплер отдельно в виде тренда КК и матрицы КК. Выполняется оценка разницы между концентрациями.

Процедура при превышении пределов погрешности

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

Опция	Описание
<b>КК проба</b>	<b>флаг</b>
<b>КК станд.</b>	Измеренное значение отмечается в таблице проб, программа измерений продолжается со следующей пробой.

Опция	Описание
	<p><b>рекал. + продолж.</b> 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.</p> <p><b>кал. + продолж.</b> 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.</p> <p><b>рекал. + новое выполн.</b> Выполняется рекалибровка. После этого выполняется повторное измерение пробы КК. Если проба КК находится за пределами диапазона, программа измерения прерывается. Если она находится в пределах диапазона, все пробы измеряются снова после последней пробы КК или после последней (ре)калибровки. Если в этом случае проба КК снова выходит за пределы погрешности, выполнение программы измерений прерывается.</p> <p><b>кал. + новое выполн.</b> 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.</p> <p><b>след. метод</b> Текущая программа измерений прерывается, и запускается программа измерений следующего метода (если последовательность содержит дополнительный метод).</p> <p><b>Стоп</b> Текущая программа измерений прерывается.</p>
КК спайк	<p><b>флаг</b></p> <p><b>рекал. + продолж.</b></p> <p><b>кал. + продолж.</b></p> <p><b>след. метод</b></p> <p><b>Стоп</b></p>
КК холост.	<p><b>флаг</b></p> <p><b>след. метод</b></p> <p><b>Стоп</b></p>
КК тренд	Нет реакции
КК матрица	

Специфические для линии  
параметры типов проб КК

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

Опция	Описание
Линия	Наименование аналитической линии
Ехр. конц.	Для <b>КК проба</b> и <b>КК станд.</b> Ожидаемая концентрация в пробе КК
Ехр. увелич. конц.	Для <b>КК спайк</b> Ожидаемое повышение концентрации от пробы до пробы с добавленным объемом

Опция	Описание
	Ввод значения, соответствующего добавленному объему и концентрации базового раствора.
<b>Ехр. интенс.</b>	Для <b>КК холост.</b> Ожидаемая интенсивность в значении бланка КК.
<b>нижн. пред.</b>	Нижняя область предела погрешности в процентах
<b>верх. пред.</b>	Верхняя область предела погрешности в процентах.
<b>Карта КК</b>	Если отмечено значком "+", результат контроля качества для этой строки будет представлен во вкладке КК списка результатов.
<b>Реакц.</b>	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.
<b>Един.</b>	Для <b>КК станд.</b> Единица ожидаемой концентрации

Ввод параметров проб КК

- ▶ Нажмите **Нов./Модиф.**, чтобы создать новый набор параметров для типа пробы КК или редактировать выбранный тип пробы.
  - ✓ Откроется окно **Доб./модиф. тип пробы КК.**
- ▶ Выберите в списке **Тип** тип пробы.
- ▶ Только пробы КК: При указании нескольких проб КК задайте в списке порядковый номер.
- ▶ Только стандарты КК: Выберите в списке номер стандарта согласно последовательности в таблице калибровки.
- ▶ Введите в таблицу специфические для линии параметры.
  - ✓ Пробы КК заданы в методе.

**См. также**

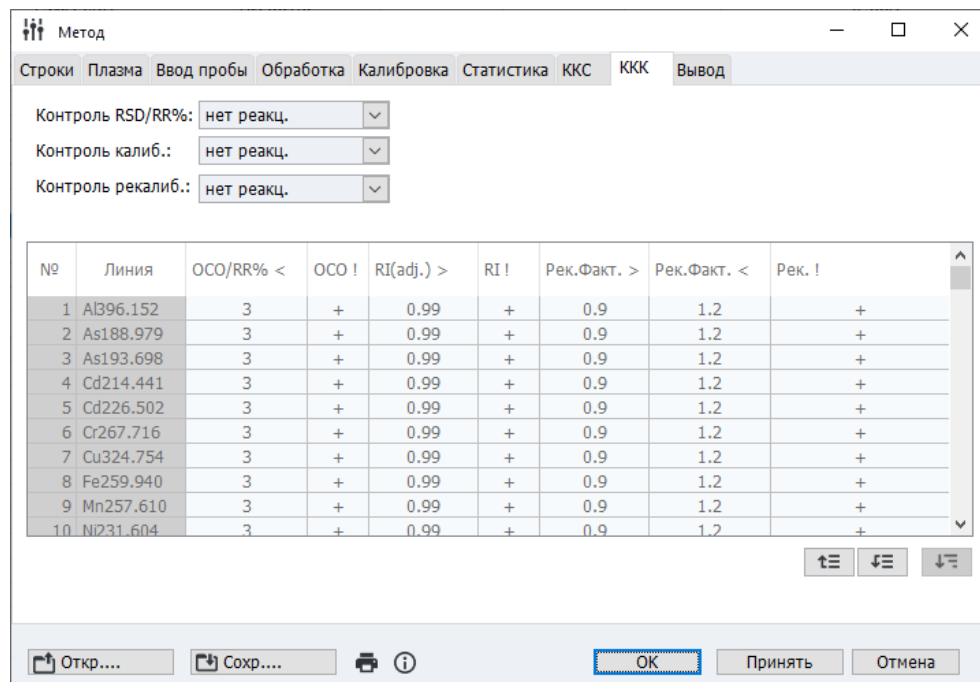
- 📖 Управление базами данных для исходных растворов и проб КК [▶ 135]

### 3.2.8 Установка параметров контроля качества (окно Метод | ККК)

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

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

Одновременно с различными реакциями можно выбрать различные варианты контроля.



Варианты контроля качества

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

Действия при превышении пределов погрешности

Реакция	Описание
нет	Соответствующая проверка не проводится
флаг	При превышении пределов погрешности отметить соответствующую пробу, калибровку или рекалибровку в таблице проб
повтор + продолж.	Только для <b>Контроль RSD/RR%</b> При превышении серийного предела точности повторить измерение соответствующей пробы до измерения следующей пробы
кал. + продолж.	Только <b>Контроль калиб.</b> и <b>Контроль рекалиб.</b> При превышении пределов погрешности калибровки или коэффициента рекалибровки выполнить новую калибровку, а затем продолжить измерение со следующей пробой
след. метод	Только <b>Контроль калиб.</b> и <b>Контроль рекалиб.</b> При превышении пределов погрешности, текущая программа измерений прерывается и запускается программа измерений следующей линии элемента в методе. Эту опцию можно выбрать только в том случае, если в методе указано более одной линии элемента.
Стоп	Только <b>Контроль калиб.</b> и <b>Контроль рекалиб.</b> При превышении пределов погрешности остановка измерения выполняемого в данный момент метода.

Специфические параметры линии для контроля качества

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

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

#### См. также

 Установка параметров статистических оценок (окно Метод | Статистика) [▶ 46]

### 3.2.9 Установка параметров форматов вывода данных для результатов (окно Метод | Вывод)

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

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

Элементы в окне Метод | Вывод

№	Линия	десятич. разряд Интенс.	Дес. раз. Конц.	десятич. разряд Конц.	100% норм.	Оксид-фактор	Порядок печати
1	As96.152	9	4	4	-		3
2	As188.979	9	4	4	-		4
3	As193.698	9	4	4	-		5
4	Cd214.441	9	4	4	-		7
5	Cd226.502	9	4	4	-		8
6	Cr267.716	9	4	4	-		9
7	Cu324.754	9	4	4	-		10
8	Fe259.940	9	4	4	-		13
9	Mn257.610	9	4	4	-		19
10	Ni231.604	9	4	4	-		21

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

## 4 Последовательности


Последовательность определяет, в каком порядке будут обрабатываться пробы и операции в одной процедуре измерения. Некоторые данные для описания проб, такие как наименование пробы и позиция на штативе для проб, также можно ввести непосредственным образом. Эти данные сохраняются вместе с последовательностью.

Последовательность основана на загруженном методе, который содержит информацию о типе калибровки, статистических анализах, контроле качества и т.д.

### 4.1 Создание, сохранение и открытие последовательностей


Также как и методы, последовательности сохраняются в 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 [▶ 127]

#### 4.1.1 Создание новой последовательности

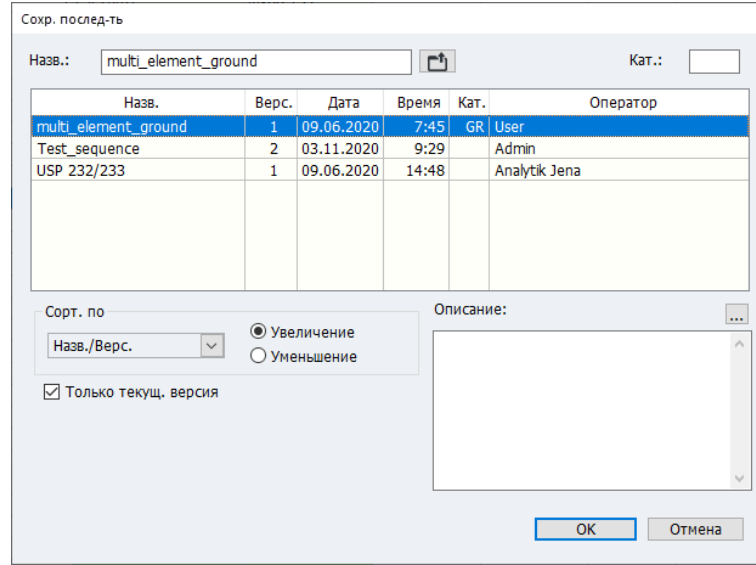
Создайте или загрузите метод. На основе метода можно будет задать параметры новой последовательности из измерений проб и действий.

- ▶ Выберите пункт меню **Файл | Новая послед-ть**.
- ▶ Или откройте окно с актуальными параметрами последовательности, выбрав  или пункт меню **Разраб. метода | Пос-ть**.
  - ✓ Откроется окно **Послед-ть**. Теперь можно задать измерения и последовательности операций.

#### 4.1.2 Сохранение последовательности

После ввода измерений и операций сохраните последовательность в окне **Сохранение послед-ть** в базе данных. Так вы сможете использовать ее для последующих измерений. При сохранении последовательности Вы можете добавлять другие данные, чтобы отнести последовательность к категории и облегчить ее поиск.

Элементы в окне Сохр. послед-ть



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

Сохранение последовательности

- ▶ В окне **Пос-ть** нажмите **Сохр.** или выберите пункт меню **Файл | Сохр. | Пос-ть**.
- ▶ Введите имя последовательности в окне **Сохр. послед-ть** и выберите другие параметры.
- ▶ Подтвердите настройки кнопкой **ОК**.
  - ✓ Последовательность сохранится в базе данных. При использовании названия существующей последовательности эта последовательность не перезаписывается, а создается новая версия в базе данных.

См. также

📄 Создание предварительно заданных комментариев [▶ 135]

### 4.1.3 Загрузка последовательности

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

- ▶ Откройте окно базы данных последовательностей. Это можно сделать следующими способами:
  - На панели инструментов щелкните по значку рядом с полем **Посл..**

- Выберите пункт меню **Файл | Открыть пос-ть**.
- В окне **Пос-ть** нажмите кнопку **Откр..**
- ▶ Опционально в поле **Кат.** можно ограничить отображаемые последовательности, выбрав категорию. Если нужно видеть последовательности из всех категорий, удалите запись в поле **Кат..**
- ▶ Установите флажок в поле **Только текущ. версия**, если при наличии одноименных последовательностей нужно отобразить только последовательность с наибольшим номером версии.
- ▶ Выделите в таблице последовательность и нажмите **ОК**.
  - ✓ Откроется окно Послед-ть с сохраненными параметрами.

## 4.2 Окно Послед-ть

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

Чтобы открыть окно **Послед-ть**, выберите .

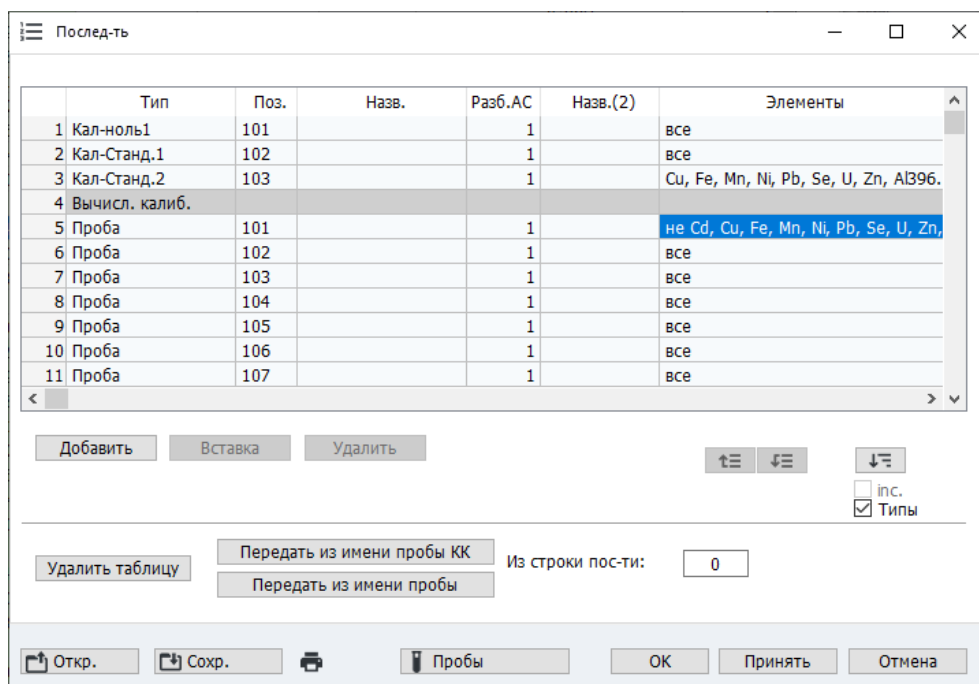


Таблица проб и последовательностей действий

В таблице приведены выбранные последовательности проб и действий в порядке их обработки.

Столбец таблицы	Значение
<b>Тип</b>	Тип пробы или шаг анализа
<b>Поз.</b>	Позиция пробы на автосамплере (если используется)
<b>Назв.</b>	Имя пробы Ввод является опциональным. Для калибровочных проб и проб КК имя пробы принимается из метода, если оно там было указано. Для анализируемых проб и проб КК можно перенести наименования из файла информации о пробах.
<b>Назв. (2)</b>	Дополнительное обозначение для идентификации пробы (опция)
<b>Элементы</b>	Выбор элементов, анализ которых проводится в пробе, или для которых выполняются специальные действия.

Столбец таблицы	Значение
	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ <b>нет</b> Текущий выбор удаляется.</li> <li>■ <b>все</b> Определяются все заданные в методе элементы (настройка по умолчанию).</li> <li>■ <b>Значок элемента</b> Определяются только указанные элементы, например, Cu (медь), Pb (свинец).</li> <li>■ <b>Элементная линия (значок + длина волны)</b> Определяются только указанные линии элементов, например, Mn 257.610, Ca 315.887.</li> <li>■ <b>не Значок элемента</b> или <b>не Линия элемента</b> Указанные элементы или линии элемента не определяются, например, "не Cu, Pb", "не Mn 257.610, Ca 315.887"</li> </ul>

## Экранные кнопки

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

Экранная кнопка	Значение
<b>Добавить</b>	Добавить новую строку в конец списка и открыть окно <b>Ред. послед-ть</b>
<b>Вставка</b>	Вставить новую строку в позицию над выделенной позицией списка
<b>Удалить</b>	Удалить выделенные строки
<b>Удалить таблицу</b>	Удалить весь список последовательностей
<b>Передать из имени пробы КК</b>	Сохранить информацию о наименованиях проб КК и их позиции в автосамплере из окна <b>Пробы   Информ. о пробе КК</b> Информация из таблицы ID проб КК заносится в таблицу последовательностей. Первая строка с новым идентификатором пробы задается в поле <b>Из строки пос-ти</b> .
<b>Передать из имени пробы</b>	Сохранить информацию о наименованиях проб, их позиции в автосамплере и анализируемых элементах из окна <b>Пробы</b> Информация из таблицы ID проб заносится в таблицу последовательностей. Первая строка с новым идентификатором пробы задается в поле <b>Пробы</b> .
<b>Пробы</b>	Откройте окно <b>Имя пробы</b>

## См. также

- 📖 Наиболее часто используемые элементы управления [▶ 15]
- 📖 Выбор элементов/линий для анализа проб/действия [▶ 61]

## 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: 15

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

Режим калибр-ки: Стандартн. калибр-ка  
 Подг. станд.: вручную  
 Кол-во станд.: 5

Линия	f(x)	f(x=0)	w(x)	Контр.	Един.
Al396.152	лин +	C	-	-	µg/L
As188.979	лин +	C	-	-	µg/L
As193.698	лин +	C	-	-	µg/L
Cd214.441	лин +	C	-	-	µg/L
Cd226.502	лин +	C	-	-	µg/L
Cr267.716	лин +	C	-	-	µg/L
Cu324.754	лин +	C	-	-	µg/L
Fe259.940	лин +	C	-	-	µg/L

Возможные измерения и действия


В зависимости от настроек метода можно задавать параметры различных измерений и действий для анализа.

Проба/действие	Описание
<b>Пробы</b>	Измерение количества проб, введенного в поле <b>Число</b>
<b>Пробы КК</b>	Измерение пробы КК и ее оценка в соответствии со спецификацией в методе Выберите из списка одну из проб КК, указанных в окне Метод. Параметры пробы КК отображаются в расположенном рядом поле.
<b>Холост. реэг.</b>	Измерение бланка без аналитов
<b>КК холост. DL</b>	Измерение бланка с помощью метода значений бланка для определения пределов детектирования и количественного определения
<b>Калибровка</b>	Измерение калибровочных проб и расчет калибровки в соответствии со спецификацией в методе
<b>Рекалибровка</b>	Измерение калибровочной пробы, предназначенной для рекалибровки, и расчет рекалибровки
<b>Проба-добавка</b>	Добавочная калибровка для метода калибровки Увеличение объема этой пробы и вычисление калибровочной кривой и концентрации пробы
<b>Холост.-добавка</b>	Добавочная калибровка для метода калибровки и коррекция бланка на основе концентрации Увеличение объема этой пробы бланка и вычисление бланка
<b>растворы ИЕС</b>	Только для коррекций пиков по методу поправки на межэлементное влияние (ИЕС) Измерение ИЕС-растворов (растворов для анализа с использованием метода поправки на межэлементное влияние)
<b>Спец. действие</b>	Эти действия не напрямую затрагивают измерение проб (см. ниже).
<b>Загр. метод</b>	Загрузка сохраненного метода, например, чтобы запустить другой анализ в последовательности

## Специальные действия

Проба/действие	Описание
	Значок  позволяет открыть окно базы данных с сохраненными методами. Выберите один из сохраненных методов.
Действие	Описание
<b>Погасить плазму</b>	Гашение плазмы
<b>Измер. темн. тока</b>	Выполнение дополнительного измерения затемненности При этом измерении темного тока сигнал определяется с закрытой заслонкой. Измерение затемненности всегда также производится автоматически, даже если оно не было добавлено в последовательность.
<b>Время ожид.</b>	Указанное в поле время ожидания (в минутах), после завершения которого будет продолжен анализ При использовании автосамплера канюля остается в позиции для промывки, продолжает всасываться промывочная жидкость.
<b>Пауза</b>	Остановка выполнения анализа Затем последовательность можно будет продолжить, щелкнув по значку  или выбрав пункт меню <b>Процедура   Продолжить</b> .
<b>Звук. сигнал</b>	Генерация компьютером звукового сигнала, например, для оповещения об окончании калибровки
<b>Повтор. / Пока</b>	Указание цикла (повторения) в последовательности. Часть последовательности между стартовой точкой <b>Повтор.</b> и конечной точкой <b>Пока</b> будет повторяться до выполнения критерия отмены. В качестве условия отмены можно указать количество проходов петель или время в минутах. При измерении онлайн (в рамках дистанционного обслуживания) необходимо активировать опцию <b>автом.</b> . В ручном режиме это позволит предотвратить необходимость дозирования пробы.
<b>Показ. калибр. диагр.</b>	Отображение калибровочной кривой во время выполнения последовательности до истечения времени ожидания (в минутах). По истечении времени ожидания или после нажатия кнопки <b>ОК</b> программа продолжит измерение. Если действие <b>Показ. калибр. диагр.</b> активировано без ввода времени ожидания, программа продолжит измерение только после того, как Вы подтвердите калибровку кнопкой <b>ОК</b> . При нажатии кнопки <b>Стоп</b> в окне <b>Калибровка</b> программа закроет окно и прервет процесс анализа, независимо от установленного времени ожидания.
<b>Очистка системы</b>	Промывка путей подачи проб до горелки промывочным раствором на стандартном ходу Ввод в поле ввода продолжительности промывки.

## Установка параметров последовательности

- ▶ Откройте окно **Послед-ть**, щелкнув по значку .
- ▶ Нажмите кнопку **Добавить**.
  - ✓ Откроется окно **Ред. послед-ть** .
- ▶ По порядку активируйте необходимые действия и сохраняйте их в таблице последовательностей, нажав кнопку **Принять**.
- ▶ Подтвердите последнее действие, нажав кнопку **ОК**.
  - ✓ Вы вернетесь в окно **Послед-ть**. Теперь таблица последовательностей содержит все действия в порядке выбора.

- ▶ В качестве настройки по умолчанию анализируемых элементов в таблице последовательностей для каждой пробы/действия выбран параметр **все**. Щелчок по ячейке таблицы **Элементы** соответствующей пробы/действия позволяет изменить в окне эту настройку.
- ▶ При использовании автосамплера:  
Задайте позицию **Поз.** проб в автосамплере. Позиции калибровочных и проб КК автоматически принимаются из метода. Однако здесь можно изменить позиции. Позиции, установленные в последовательности, всегда имеют приоритетное значение.

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

## 4.4 Выбор элементов/линий для анализа проб/действия

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

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

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

Окно Выбрать элементы и линии

Выбрать элементы и линии

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

Не (обратить выбор)    все    нет

Show elements/lines of the currently loaded method

Al, Cu, As188.979, Cd226.502

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

OK    Отмена


## 5 Данные с информацией о пробах (ID проб)

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

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

### 5.1 Создание, сохранение и открытие данных с информацией о пробах


Создание новой записи ID пробы

- ▶ На панели инструментов щелкните по кнопке  или выберите пункты меню **Разраб. метода | Имя пробы** или **Файл | Новый файл инф. о пробе**.
  - ✓ Откроется окно **Имя пробы**.
- ▶ Задайте данные для проб и проб КК.
- ▶ Примените блок данных к последовательности, выбрав **Передать в пост-ть**.
  - ✓ Пробы активированы и будут использоваться для следующего анализа. ID пробы можно также сохранить для последующего анализа.


Сохранение ID пробы

- ▶ В окне **Имя пробы** нажмите **Сохранить** или выберите пункт меню **Файл | Сохранить | Информация о пробе**.
- ▶ Сохраните блок данных в стандартном окне **Сохранить как**.
  - ✓ ID пробы сохраняется в формате CSV. Вы можете загрузить данные для последующего анализа или отредактировать их в табличном редакторе.


Открытие файлов информации о пробе

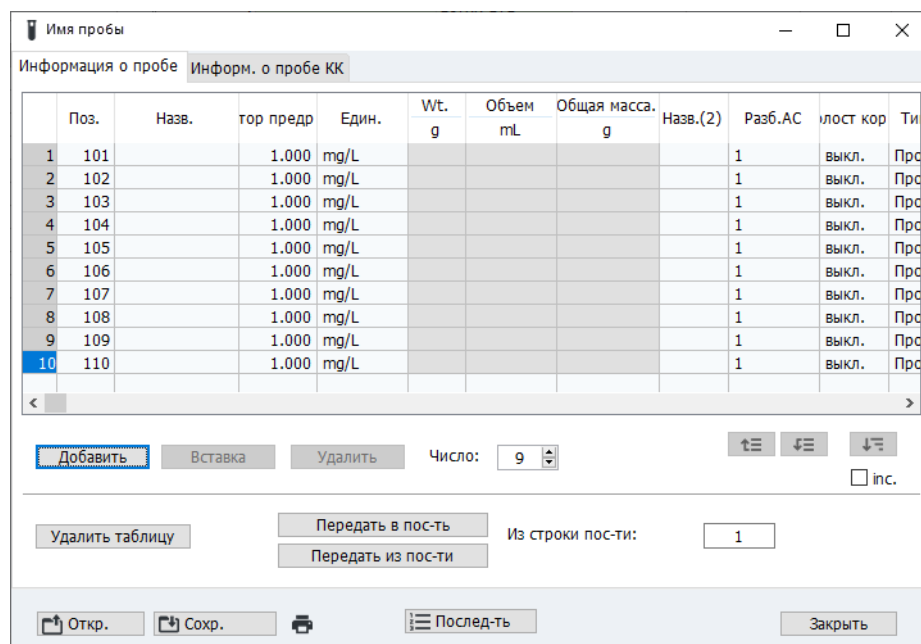
- ▶ Открыть ID пробы можно одним из следующих способов:
  - На панели инструментов щелкните по значку  рядом с полем **Пробы**.
  - Выберите пункт меню **Файл | Открыть файл инф. о пробе**.
  - В окне **Имя пробы** нажмите кнопку **Открыть**.
- ▶ В стандартном окне **Открыть** выберите файл.
  - ✓ ID пробы отобразится в окне **Имя пробы**, и его можно будет использовать для последующего анализа.

См. также

-  Настройка параметров информации о пробах [▶ 65]

### 5.2 Окно Имя пробы | Информация о пробе

В окне **Имя пробы** задаются параметры проб и проб КК. Наряду с наименованием и позицией в автосамплере, можно ввести важные для анализа параметры. Откройте окно **Имя пробы | Информация о пробе**, щелкнув по значку .



Вкладка **Информация о пробе**

Вкладка **Информация о пробе** содержит список проб и их свойств.

Столбец таблицы	Описание
Поз.	Позиция пробы в дозаторе
Назв.	Имя пробы Ввод является опциональным. Макс. кол-во символов: 20
Фактор предразб.	Для типа единицы <b>жидк.</b> и <b>тверд.</b> Коэффициент предварительного разбавления пробы – это коэффициент, с которым была разбавлена исходная проба перед ее помещением в автосамплер или ее подачей к плазме при работе без автосамплера. Коэффициент необходим для расчета концентрации исходной пробы ( <b>Конц. 2</b> ).
Един.	Единица измерения концентрации пробы
Wt.	Навеска в граммах (только для типа единиц измерения <b>тверд.</b> ) Навеска исходной пробы, которая была растворена при подготовке пробы. Навеска требуется для расчета концентрации исходной пробы ( <b>Конц. 2</b> ).
Объем	Общий объем или объем заполнения в мл (только для типа единицы <b>тверд.</b> )
Общая масса.	Общая навеска пробы и растворителя в граммах (только для типа единицы <b>жидк. грам.</b> , например, для масел).
Назв. (2)	Следующее наименование пробы Ввод является опциональным. Макс. кол-во символов: 20
Разб.АС	Фактор разбавления автосамплера:
Холост корр.	Коррекция бланка (только для типа пробы <b>Проба</b> ) <b>выкл.</b> Коррекция бланка не проводится. <b>вкл.</b> Для расчета концентрации исходной пробы вычитается последнее измеренное в последовательности значение бланка. Метод коррекции бланка задается в окне <b>Опции   Калибровка</b> .
Тип пробы	Выбор между <b>Проба</b> и <b>Холост</b> .

Экранные кнопки

Столбец таблицы	Описание
Элементы	Анализируемые в пробе элементы или линии При щелчке по ячейке таблицы открывается окно <b>Выбрать элементы и линии</b> , в котором выполняются эти настройки.
Экранные кнопки	Описание
Добавить	Вставка количества новых строк в конце списка.
Вставка	Вставка количества новых строк перед отмеченной позицией списка.
Удалить	Удаление выделенной строки.
Число	Поле ввода количества вставляемых строк.
Удалить таблицу	Удаление всего списка информации о пробах.
Передать в пос-ть	Перенос наименований проб, их позиций в автосамплере и анализируемых элементов в список последовательности. Первая строка в списке последовательности, начиная с которой необходимо перенести данные о пробах, задается в поле ввода <b>Из строки пос-ти</b> .
Передать из пос-ти	Перенос наименований проб, их позиций в автосамплере и анализируемых элементов в из списка последовательности в таблицу ID проб. Первая строка в списке последовательности, начиная с которой необходимо перенести данные о пробах, задается в поле ввода <b>Из строки пос-ти</b> .




Вкладка Информ. о пробе КК

Аналогично вкладке **Информация о пробе**, в этой вкладке приведены пробы КК. Дополнительно в столбце **Тип** содержится информация о типе КК. Столбец **Един.** исключается, так как единица измерения задана в методе. Коррекция бланка для проб КК задается в методе и выбрать ее здесь нельзя.

Экранная кнопка

Экранная кнопка	Описание
Передать в пос-ть	Перенос имен проб КК и их позиций в автосамплере в список последовательностей

**См. также**

-  Опции для процесса анализа [► 140]
-  Выбор элементов/линий для анализа проб/действия [► 61]
-  Установка единиц измерения [► 134]

## 5.3 Настройка параметров информации о пробах

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**. Заданные здесь имена проб и их позиции в автосамплере можно перенести в последовательность.

- ▶ Откройте окно **Имя пробы | Информация о пробе**, щелкнув по значку .
- ▶ В поле **Число** укажите количество подлежащих анализу проб. Затем нажмите кнопку **Добавить**, чтобы вставить соответствующие строки в таблицу.
- ▶ Введите требуемую информацию в таблицу для каждой пробы.
- ▶ Если записи в столбце совпадают, щелкнув по значку , можно скопировать запись выделенной ячейки во все последующие ячейки столбца. При установке флажка **шаг** (обозначает инкремент, приращение) при переносе информации в





следующую ячейку значение каждый раз будет увеличиваться на 1. Таким образом, можно легко заполнить идущие подряд места в автосамплере или, например, по порядку пронумеровать имена проб.

- ▶ Тексты из текстовых полей можно копировать в буфер обмена и снова вставлять их. Используйте для этого сочетание клавиш Ctrl+C и Ctrl+V или щелкните правой кнопкой мыши по ячейке таблицы и воспользуйтесь командами контекстного меню.
- ▶ После ввода всех данных укажите в поле **Из строки пос-ти** строку в последовательности, начиная с которой информацию о пробе нужно перенести в последовательность. Для переноса информации выберите **Передать в пос-ть**.
- ▶ Аналогично укажите информацию о пробах КК в окне **Имя пробы | Информ. о пробе КК**. Примените информацию о пробах КК к последовательности, выбрав **Передать в пос-ть**.
  - ✓ 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

Процедуры измерения (процессы анализа на основе последовательности) запускаются значками на панели инструментов или через меню **Процедура**.

Символ	Пункт меню	Функция
	Процедура   Вы-полн. пос-ть	Запустить процедуру измерения
	Процедура   Старт выдел. строки пос-ти... F6	Выполнить выделенную (-ые) строку (-и) в последовательности. С помощью кнопки мыши и нажатой клавиши Ctrl или Shift можно выделить несколько строк.
	Процедура   Стоп	Остановить процедуру измерения
	Процедура   Продолжить	Продолжить остановленную процедуру измерения

### 6.2 Включение спектрометра и зажигание плазмы



#### ОСТОРОЖНО

##### Риск отравления озоном и нитрозными газами

- Вытяжная установка должна быть включена до зажигания плазмы.
- Во время работы вытяжная установка должна быть включена.


Для обеспечения безопасной работы плазмы устройство посредством контуров безопасности контролирует следующие условия.

- Дверца отсека плазмы закрыта.
- Плазменная горелка находится в рабочем положении.
- Обеспечено достаточное охлаждение.
- Вытяжка отработанного воздуха активна.
- Обеспечена надежная подача аргона.

Зажечь плазму можно только при соблюдении всех условий. Если во время работы один из контуров безопасности сообщает о неисправности, устройство гасит плазму.

Зажигание плазмы

- ▶ Включите компьютер с помощью выключателя питания и дождитесь завершения инициализации операционной системы.
- ▶ Кнопкой питания включите ИСП-ОЭС. Для PlasmaQuant 9200/PlasmaQuant 9200 Elite: также включите прибор с помощью переключателя режима ожидания на передней панели устройства.
- ▶ Откройте подачу аргона. Установите давление подачи на редукторе на 500 ... 700 kPa (5 ... 7 bar).
- ▶ Включите вытяжную установку.
- ▶ Кнопкой питания включите рециркуляционный охладитель.



- ▶ Откройте дверцу отсека плазмы. Убедитесь, что горелка находится в исходном положении. При этом наконечник инжектора должен находиться примерно на 1-2 мм ниже нижнего края индуктора.
- ▶ Осмотрите конус окна на предмет загрязнения и износа в осевом направлении. Используйте прилагаемый крючковый ключ, чтобы проверить плотность посадки конуса.  
**i** ПРИМЕЧАНИЕ! Если конус ослаблен, он не будет должным образом охлаждаться и подвергнется коррозии.
- ▶ Закройте дверцу отсека для плазмы.
- ▶ Для PlasmaQuant 9200 Elite: включите дополнительное освещение отсека подачи проб.
- ▶ Проверьте насосные трубки. Замените трубки, если они потеряли эластичность или имеют следы сильного износа.
- ▶ Натяните трубки насоса между стопорами в насосе на ИСП-ОЭС.
- ▶ Уложите прижимную скобу поверх трубок и закрепите фиксирующими рычагами. Убедитесь, что фиксирующие рычаги защелкнулись!  
**i** ПРИМЕЧАНИЕ! При этом проверьте направление перекачки. Вал насоса вращается против часовой стрелки.
- ▶ Убедитесь, что в емкости достаточно промывочного раствора для проведения анализа.  
**i** ПРИМЕЧАНИЕ! Промывочный раствор должен иметь одинаковую с пробами и стандартами кислотность. Если не определено иное, используйте 2-процентную азотную кислоту.
- ▶ Проверьте уровень заполнения сливной бутылки. Слейте бутылку, если емкости недостаточно для анализа.
- ▶ Для работы без автосамплера погрузите трубку для всасывания пробы в промывочный раствор. Во время зажигания плазмы воздух не должен поступать внутрь.
- ▶ Запустите программу ASpect PQ.
- ▶ В окне **Быстрый старт** выполните следующие настройки:
  - Выберите опцию **Процедура** или **Разработка метода**.
  - При использовании ВЧ-комплекта в **Материал горелки** выберите опцию **Керамика**, чтобы настроить чувствительность оптического детектора плазмы.
  - Опционально: В разделе **Таблица** выберите рабочие листы, подготовленные для быстрого запуска, например для исследования элементных примесей в фармацевтических продуктах в соответствии с USP 232/233. Рабочие листы содержат параметры методов и подготовленные последовательности.
- ▶ Если вы запускаете программу с рабочим листом, завершите быстрый запуск в окне **Быстрый старт**, нажав **ОК**.
- ▶ Если вы запускаете программу без рабочего листа, нажмите **Пропустить быстрый старт**, чтобы перейти в интерфейс ASpect PQ.
- ▶ Если система длительное время не эксплуатировалась или была демонтирована камера распылителя, промойте камеру распылителя и горелку газом распылителя, чтобы удалить воздух из системы. Щелкнув по значку , откройте окно **Плазма | Контроль** и выберите **Продуть распылит. камеру**.
- ▶ Разожгите плазму. В окне **Плазма | Контроль** нажмите на кнопку **Зажечь плазму**.

- ✓ Следует начальный этап, в котором горелка промывается аргоном и проверяются контуры безопасности ИСП-ОЭС. Если все в порядке, зажигается плазма.
- ▶ Проверьте, правильно ли сформировалась плазма. Плазма должна иметь конусообразную форму, выходить за пределы индуктора и сужаться кверху.
- ▶ При образовании кольцевой плазмы плазма образуется только внутри индуктора или слышен дребезжащий звук. Затем нажмите красную кнопку гашения плазмы на приборе.
- ▶ Перед следующей попыткой розжига убедитесь, что трубка подачи пробы погружена в промывочный раствор, а подача газа и рециркуляционное охлаждение в норме.
  - ✓ Спектрометр охлаждается только после успешного зажигания и образования стабильной плазмы. В течение 1 ... 2 min процедура зажигания завершится, и запустится шланговый насос. Эмиссионный спектрометр готов к работе.
- ▶ Только теперь вы можете выполнять дальнейшие настройки аналитической системы и запустить процедуру измерения.

#### См. также

 Запуск ASpect PQ [▶ 7]

## 6.3 Гашение плазмы и выключение спектрометра

- ▶ По окончании анализа в течение прибл. 3 мин. прокачайте через систему промывочный раствор, а затем еще 1 мин. – воду. После этого дайте устройству поработать всухую. Если трубки понадобятся заменить, в них не будет кислоты.
- ▶ Погасите плазму в программе ASpect PQ щелчком по значку  на панели инструментов.  
Или откройте окно **Плазма**, выбрав , и нажмите кнопку **Погасить плазму**.
- ▶ Завершите работу программы ASpect PQ. Для этого выберите **Файл | Выход**.
- ▶ Подтвердите контрольный вопрос о выключении продувочного газа для детектора, нажав кнопку **Да**, если Вы хотите отключить продувочный газ.  
При остановке работы лишь на короткое время (до 30 мин.) или при работе в УФ-диапазоне не отключайте продувочный газ. Это сэкономит время в процессе розжига, пока детектор достаточно не очистится. В перерывах между измерениями оставляйте устройство включенным.
- ▶ Подождите, пока не появится сообщение о том, что устройство и систему охлаждения можно выключить.
- ▶ Выключите ИСП-ОЭС и при необходимости автосамплер соответствующими выключателями.
- ▶ Кроме того, при проведении ежедневных измерений ИСП-ОМС можно отключать с помощью кнопки режима ожидания на передней панели устройства. Сетевое напряжение на устройстве по-прежнему присутствует. В режиме ожидания подача газа отключается.
- ▶ Ослабьте трубки насоса на ИСП-ОЭС. Ослабьте фиксирующие рычаги, чтобы прижимные скобы больше не давили на трубки, и вытащите стопор трубок на одной стороне насоса из фиксатора.
- ▶ При использовании автосамплера таким же образом ослабьте трубку насоса.
- ▶ После выключения устройства перекройте систему подачи газа.

- ▶ Кнопкой питания выключите рециркуляционный охладитель.
- ▶ Выключите вентиляционную установку.
- ▶ Завершите работу системы Windows и выключите компьютер.
  - ✓ Анализатор выключен.



## ПРИМЕЧАНИЕ

Перед выключением ИСП-ОЭС дождитесь остывания!

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


## 6.4 Запуск процедуры измерения

Для подготовки к измерению создайте метод и последовательность или воспользуйтесь одним из готовых рабочих листов.

При необходимости подготовьте ID пробы, содержащей дополнительную информацию о пробе, например о разбавлениях.

Подготовьте пробы для измерения, например, на планшете автосамплера.

Запуск измерения

- ▶ Включите РС. Включите эмиссионный спектрометр и комплектующие.
- ▶ Разожгите плазму.
- ▶ Загрузите метод:
  - На панели инструментов щелкните по значку папки рядом с полем **Мет..** Выберите метод в окне **Открыть метод.**
- ▶ Создайте новую последовательность или загрузите существующую:
  - В начале последовательности выполните калибровку.
  - При загрузке последовательности убедитесь, что калибровка соответствует методу.  
Аналитические линии калибровочных стандартов должны соответствовать аналитическим линиям, выбранным в методе во вкладке **Калибровка.**
  - После калибровки измерьте пробу КК, чтобы убедиться в правильности калибровки.
- ▶ При необходимости создайте таблицу ID проб, содержащую дополнительную информацию о пробах.
- ▶ Запустите процедуру измерения щелчком по значку  или с помощью пункта меню **Процедура | Выполн. пос-ть.**
- ▶ В окне **Старт** выберите имя файла результатов.  
Вы можете сохранить результат в новом файле или добавить его в уже существующий файл. Перезаписать уже существующий файл невозможно.
  - ✓ После выбора имени файла начинается процедура измерения в соответствии с настройками метода и последовательности. При использовании автосамплера измерение выполняется автоматически.
- ▶ Если подача пробы осуществляется вручную без автосамплера, следуйте инструкциям по подготовке пробы на экране.

**См. также**

 Опции для процесса анализа [▶ 140]


## 6.5 Отображение и сохранение результатов в процессе анализа

Отображение в процессе анализа

Во время процедуры измерения результаты отображаются в главном окне в реальном времени. Дополнительно могут появляться другие окна с текущими результатами.

- **Диagr. спектра:** вид аналитической линии
- **Диagr. сигнала:** кривая сигнала измерения
- **Бар-график:** значения измерения в гистограмме
- **Окно отчета:** отчет о плазме
- **Конц. пробы на кал.кривой:** значения проб в калибровочной кривой

Выбрать эти окна просмотра можно в окне **Опции | Пост-ть анализов**. Во время анализа окна просмотра можно показать или скрыть.




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

Ход измерения документируется в списке последовательностей в главном окне. Строки с последовательными действиями отмечены в столбце таблицы следующими символами

Символ	Значение
-	Еще не измерено/не выполнено.
0	Измеряется в настоящий момент.
+	Уже измерено/выполнено.

Кнопки строки символов

Во время измерения в строке символов отображаются следующие кнопки:

Экранная кнопка	Описание
	Открыть и закрыть окно просмотра
	Показать окно метода Метод доступен только для чтения, но не для редактирования.
	Показать окно последовательности Последовательность можно расширить в ходе текущего анализа. Окно последовательности содержит кнопку <b>Пробы</b> , которая позволяет открыть окно <b>Имя пробы</b> для дополнения данных о пробах.

Сохранение данных результатов во время проведения анализа

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

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

Start Sequence: multi\_element\_ground

Results file

Name: multi\_element\_ground ...

Folder: (Standard) v

Description: ...

New file/list  
 Append to file/list

Extinguish plasma if error occurs

Current method:  
Method\_Ground  
Version: 1  
from: Database

Continue with:  
Method\_Ground  
Version: 1 Date: 05.06.2020 17:15

Analysis time (approx.): 1h 44min Completion: Today, 9:30

"Attach date/time to the results filename." is active ("Options").

OK Cancel



Опция	
<b>Назв.</b>	Ввод имени файла для базы данных результатов <b>Нов. файл/список</b> Если активировано, нужно ввести новое имя файла. Проверяется, существует ли уже такое имя файла. Существующие файлы не могут быть перезаписаны. <b>Добавить к файлу/списку</b> Новые результаты добавляются к существующему файлу результатов. Щелчок по значку ... открывает окно выбора, из списка которого можно выбрать существующий файл результатов.
<b>Папка</b>	Выбор пути сохранения файла результатов Если в окне <b>Опции   Пос-ть анализ</b> активирована опция <b>Присоед. дату/время к имени файла рез-тов</b> , к имени результата автоматически добавляется эта информация. В этом окне появляется сообщение об активации опции.
<b>Описание</b>	Ввод дополнительного комментария, который будет сохранен вместе с результатами анализа С помощью кнопки ... можно выбрать пользовательские описания.
<b>Погасить плазму при ошибке</b>	Гашение плазмы при прерывании измерения в результате сообщения об ошибке

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

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

## 6.6 Прерывание и продолжение процесса анализа

Процесс анализа можно прервать, а затем снова продолжить.

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

- ✓ Откроется окно **Продолж. послед-ть**, в котором указан статус действия до прерывания процедуры.
- ✓ При изменении метода активируйте опцию **Продолжить с измененн. методом**. В результате в файл результатов записывается новый метод, и сохраняется другая версия метода. Измерение можно продолжить следующим образом:

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

## 6.7 Повтор действий последовательности

Отдельные действия в последовательности можно повторить.

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



### ПРИМЕЧАНИЕ

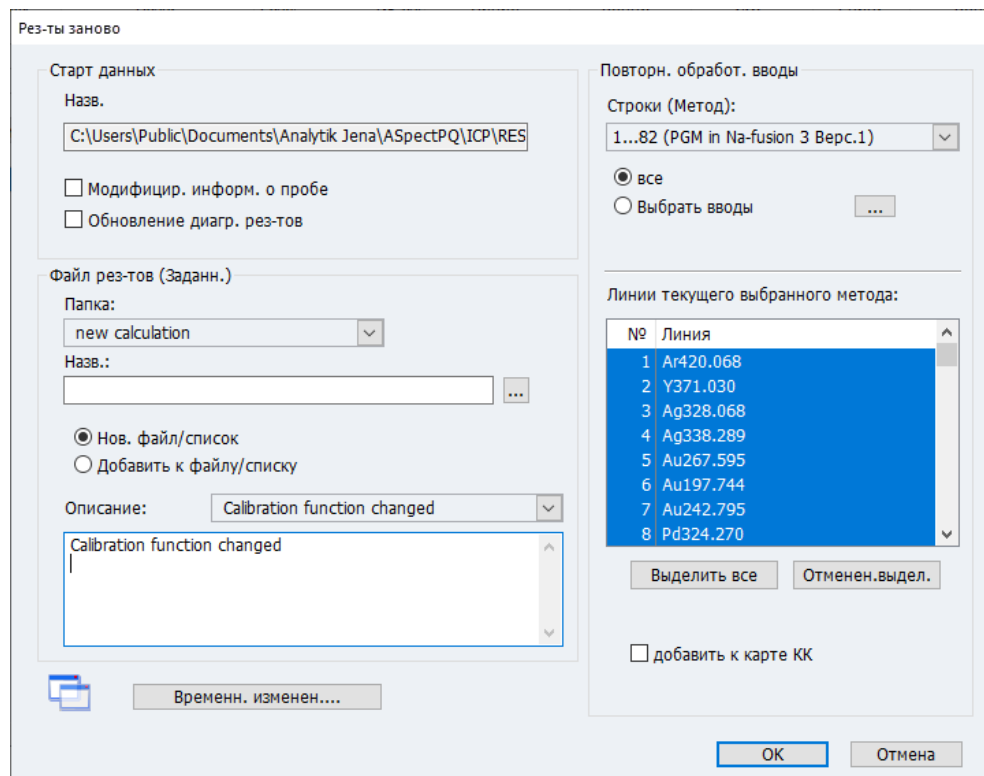
Если между тем в методе были произведены изменения, при повторе последовательности или отдельных строк будет использован измененный метод, который будет сохранен как новая версия с результатами.

## 6.8 Пересчет результатов анализа

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


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

**i** ПРИМЕЧАНИЕ! При каждом пересчете сохраняется новая версия метода.




Параметры ввода в окне  
Переделать рез-ты



Параметр/поле	Описание
<b>Старт данных</b>	Выбор входных данных  <b>Назв.</b> Имя файла результатов, данные которого пересчитываются  <b>Модифицир. информ. о пробе</b> Активируется, если данные в файле информации о пробе, например, коэффициент разбавления, были изменены. Если этот параметр отключен, изменения в файле информации о пробе не будут учитываться при пересчете результатов.  <b>Обновление диагр. рез-тов</b> Окна результатов, например, <b>Показать спектр</b> , обновляются как при измерении. <b>Примечание:</b> В результате пересчет занимает больше времени.
<b>Файл рез-тов Заданн.</b>	Выбор папки, в которой будут сохраняться пересчитанные данные результатов.  <b>Нов. файл/список</b> Сохранение данных результатов в новом файле Для файла результатов выберите в <b>Папка</b> и <b>Назв.</b> место для сохранения расчетных данных.  <b>Добавить к файлу/списку</b> Пересчитанные данные добавляются к существующему файлу результатов.

Параметр/поле	Описание
<b>Описание</b>	Этот дополнительный комментарий сохраняется вместе с пересчитанными результатами анализа. Запись требуется, если установлен опциональный модуль соответствия 21 CFR Part 11. В списке можно выбрать пользовательские описания.
<b>Повторн. обработ. вводы</b>	Выбор строк, для которых необходимо выполнить пересчет. <b>все</b> Пересчет всех записей в списке результатов. <b>Выбрать вводы</b> Пересчет только выбранных строк последовательности. Щелкнуть по значку  и в окне <b>Выбрать вводы</b> выделить все строки последовательности, для которых необходимо пересчет. <b>Линии текущего выбранного метода</b> Выделить в списке все линии, для которых необходим пересчет. Кнопка <b>Выделить все</b> позволяет выделить все линии. Кнопка <b>Отменен.выдел.</b> снимает все выделения в списке линий.
<b>Временн. изменен.</b>	Сохранение временных изменений для пересчета (смещения длин волн, метки гашения) (расширение файла .ger). Данные будут автоматически загружаться с соответствующим (одноименным) файлом результатов.
<b>добавить к карте КК</b>	Если активировано, результаты типов проб КК при пересчете вносятся во вкладку КК.

Выполнение пересчета

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


Замена стандарта калибровки

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



Замена отдельных линий стандарта калибровки

- ▶ Нажав кнопку **ОК**, вернитесь в окно **Переделать рез-ты** и задайте параметры входных данных, место хранения и имя конечного файла.
- ▶ Запустите процедуру пересчета кнопкой **ОК**.
  - ✓ Данные будут пересчитаны для выбранных строк.

Стандарт можно также заменить следующим образом:


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


**См. также**

-  Создание предварительно заданных комментариев [▶ 135]
-  Установка параметров контроля качества (окно Метод | ККС) [▶ 48]

## 6.9 Обработка измерений параллельно с выполнением анализа (режим офлайн)

Во время проведения измерения дальнейшая обработка результатов невозможна. Однако, если приложение уже запущено, можно открыть другие программы того приложения в режиме офлайн. В этом режиме 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.

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

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

## 6.10 Отображение результатов и процесса анализа в главном окне

Результаты измерений и последовательность подробно представлены в фоновом окне рабочего интерфейса. Отображение данных на различных вкладках в главном окне позволяет получить хорошее представление о результатах измерений и статистических оценках.

Можно выбрать следующие вкладки:

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

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

Главное окно ASpect PQ с отображением результатов

№	Тип пробы	Назв.	Разд.	№	Назв.	Линия	Конц.2	CO2	Един.	Конц.1	Един.	Интенс.
1	Кал-ноль1			1	Cal-Zero1	AB96.152				0	µg/L	215557
2	Кал-Станд.1			2	As188.979					0	µg/L	219486
3	Кал-Станд.2			3	As193.698					0	µg/L	208355
4	Кал-Станд.3			4	Cd214.441					0	µg/L	216319
5	Вычисл. калиб.			5	Cd226.502					0	µg/L	211135
6	Проба			6	Cd267.716					0	µg/L	209810
7	Проба			7	Cu324.754					0	µg/L	209197
8	Проба			8	Fe259.940					0	µg/L	216567
9	Проба			9	Mn257.610					0	µg/L	212689
10	Проба			10	Ni231.604					0	µg/L	212572
11	Проба			11	Pb220.353					0	µg/L	216761
12	Проба			12	Se196.028					0	µg/L	207223
13	Проба			13	U385.957					0	µg/L	209833
14	Проба			14	Zn206.200					0	mg/L	216193
15	Проба			15	Cal-Std1	AB96.152				1	µg/L	223487
16				16	As188.979					1	µg/L	254390
17				17	As193.698					1	µg/L	248640
18				18	Cd214.441					1	µg/L	257250
19				19	Cd226.502					1	µg/L	254547
20				20	Cd267.716					1	µg/L	257546
21				21	Cu324.754					1	µg/L	224367
22				22	Fe259.940					1	µg/L	221675
23				23	Mn257.610					1	µg/L	254642
24				24	Ni231.604					1	µg/L	256301
25				25	Pb220.353					1	µg/L	257318
26				26	Se196.028					1	µg/L	251222
27				27	U385.957					1	µg/L	254408
28				28	Zn206.200					1	mg/L	219181

### 6.10.1 Вкладка Послед-ть/Рез-ты

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

См. также

- 📄 Вкладка Послед-ть [▶ 77]
- 📄 Вкладка Результаты [▶ 78]


### 6.10.2 Вкладка Послед-ть

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

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

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

**i** ПРИМЕЧАНИЕ! После измерения можно снова измерить выбранную пробу.

Для этого необходимо выбрать строку пробы в последовательности и затем нажать на символ  в панели инструментов.

### 6.10.3 Вкладка Результаты

Вкладка **Результаты** содержит все результаты измерений и статический анализ. Для лучшего обзора значения распределены в дополнительных 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 интенсивность и статический анализ в соответствии с настройками метода (окно **Метод | ККК**).

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

Таблица Конц.1

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

Столбец	Описание
№	Номер в последовательности анализа
Назв.	Наименование пробы, стандартного раствора или пробы КК/стандартного раствора КК
Линия	Элементная линия
Тип	Внутренний стандартный раствор или аналит
Един.	Единица измерения концентрации
Конц.1	Концентрация аналита в пробе/ концентрация аналита в стандартном растворе
СО1	Стандартное отклонение значений Конц.1 (статистика среднего значения)
СКО%	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
ФР	Коэффициент разбавления пробы

Столбец	Описание
	Коэффициент, обозначающий разбавление исходной пробы перед ее помещением в автосамплер или ее подачей к плазме при работе без автосамплера.
Рем.	Особенности при определении значений
Интенс.	Среднее значение измеренных отдельных интенсивностей повторов измерений
СО(Интенс.)	Стандартное отклонение значений интенсивности (статистика среднего значения)
Дата/Время	Дата и время измерения
Единицн. знач. (Интенс.)	Отдельные значения интенсивности повторов измерений

Таблица Конц.2

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

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

Столбец	Описание
№	Номер в последовательности анализа
Назв.	Наименование пробы, стандартного раствора или пробы КК/стандартного раствора КК
Линия	Элементная линия
Тип	Внутренний стандартный раствор или аналит
Един.	Единица измерения концентрации
Конц.	Концентрация оригинальной пробы с учетом данных пробы
СО2	Стандартное отклонение значений Конц.2 (статистика среднего значения)
СКО%	Относительное отклонение значений Конц.2 (статистика среднего значения)
Cf	Доверительный интервал Конц.2
100% норм.	Стандартизированная конц. на основе процентного содержания Конц.2
Интенс.	Среднее значение из полученных отдельных интенсивностей
СО(Интенс.)	Стандартное отклонение значений интенсивности (статистика среднего значения)
R(Интенс.)	Диапазон значений интенсивности (медианная статистика)
Дата / Время	Дата и время измерения
Единицн. знач. (Интенс.)	Отдельные значения измерений интенсивности

Таблица Рез. КК

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

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

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

Столбец	Описание
Тип	Внутренний стандартный раствор или аналит
КК (для функций калибровки)	<b>RI(настр.)</b> или <b>R</b> <b>Наклон</b> <b>БЕК (ВЕС)</b> Фоновая эквивалентная концентрация
КК(для проб КК, не для бланка КК)	<b>Конц.1</b> Заданное значение <b>Восстановление</b> 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)	<b>СО</b> Стандартное отклонение измерения бланка <b>LOD</b> Предел детектирования <b>LOQ</b> Предел количественного определения
Рем.	Примечания к результатам КК (например, >кал.)
Интенс.	Среднее значение измеренных отдельных интенсивностей
СО	Стандартное отклонение значений интенсивности (статистика среднего значения)
Дата / Время	Дата и время измерения
Единиичн. знач. (Интенс.)	Отдельные значения измерений интенсивности

Таблица Ошибка

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

Таблица Единиичн. знач.

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

Таблица Имя пробы



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

Столбец	Описание
№	Номер в последовательности анализа
Назв.	Наименование пробы, стандартного раствора или пробы КК/стандартного раствора КК
Линия	Элементная линия
Поз.	Позиция пробы в автосамплере
Фактор пред-разб.	Коэффициент предварительного разбавления Фактор, на который исходная проба была разбавлена, перед помещением в автосамплер или добавлением в спектрометр при работе без автосамплера. Фактор необходим для расчета концентрации исходной пробы.
Wt.	Навеска в граммах Навеска исходной пробы, которая была растворена при подготовке пробы (в граммах). Масса требуется для расчета концентрации исходной пробы ( <b>Конц.2</b> ).

Столбец	Описание
Объем	Объем растворителя, в котором была растворена соответствующая масса оригинальной пробы (в мл). Значение необходимо для расчета концентрации исходной пробы ( <b>Конц.2</b> ).
Общая масса.	Общая навеска, включает пробу и разбавитель (только для типа единиц измерения <b>жидк., жидк. грав.</b> )
Назв.(2)	Дополнительное обозначение пробы из таблицы данных проб
Разб.АС	Фактор разбавления автосамплера:
Холост корр.	Коррекция бланка <b>выкл.</b> Коррекция бланка не проводилась. <b>вкл.</b> Для расчета концентрации исходной пробы было вычтено последнее измеренное в последовательности значение для бланка.

Таблица Опред. польз.




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

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

#### Примечание.

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

#### См. также

-  Опции для процесса анализа [▶ 140]
-  Обзор обозначений, используемых при отображении значений [▶ 162]
-  Данные с информацией о пробах (ID проб) [▶ 63]

## 6.10.4 Вкладка Обзор


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

Значение	Описание
Конц.1	Концентрация 1
Конц.(СКО%)	Концентрация 1 (относительное стандартное отклонение)
Конц.2	Концентрация 2
Конц.2(СКО%)	Концентрация 2 (относительное стандартное отклонение)
Интенс.	Интенсивность
Интенс.(СКО%)	Интенсивность (относительное стандартное отклонение)
Интенс.(СО)	Интенсивность (стандартное отклонение)

Значение	Описание
LOD	Предел детектирования
LOQ	Предел количественного определения
Восстановление(Номинальн. знач.)	Уровень воспроизводимости (заданное значение)
R <sup>2</sup> / Фактор рекал.	Коэффициент детерминации / коэффициент рекал-либровки
100% норм.	Стандартизированная конц. на основе процентного содержания 2

При активации соответствующих флажков можно отобразить следующие типы проб:

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

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

См. также

 [Функции печати в ASpect PQ \[▶ 121\]](#)

## 6.11 Отображение и редактирование отдельных значений проб

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

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

Окно **Детальн. рез-ты**

Детальн. рез-ты - [Sample 1]

### Cd214.441

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

№:

Тип:

Назв.:

Дата/Время:

Интенс.(Ср):

СО:

СКО:

[Ред. спектр](#)

Отображение отдельных значений (таблица)


Отдельные значения проб приведены в таблице.

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

Данные пробы

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

Другие кнопки и опции в окне Детальн. рез-ты

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

Исключение отдельных значений проб

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

- ▶ Отметьте в таблице отдельное значение, которое нужно исключить.
- ▶ Кнопкой **Удалить** можно исключить значение из расчета среднего значения пробы при пересчете результатов.
- ▶ Чтобы снова включить выделенное отдельное значение в расчет, нажмите **Реактив..**

**i** ПРИМЕЧАНИЕ! При включенной опции теста выбросов Граббса можно автоматически определить и устранить выбросы из числа отдельных значений во время анализа.

**См. также**

 Отображение и редактирование спектров интенсивности [▶ 84]

## 6.12 Отображение и редактирование спектров интенсивности

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

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

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

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

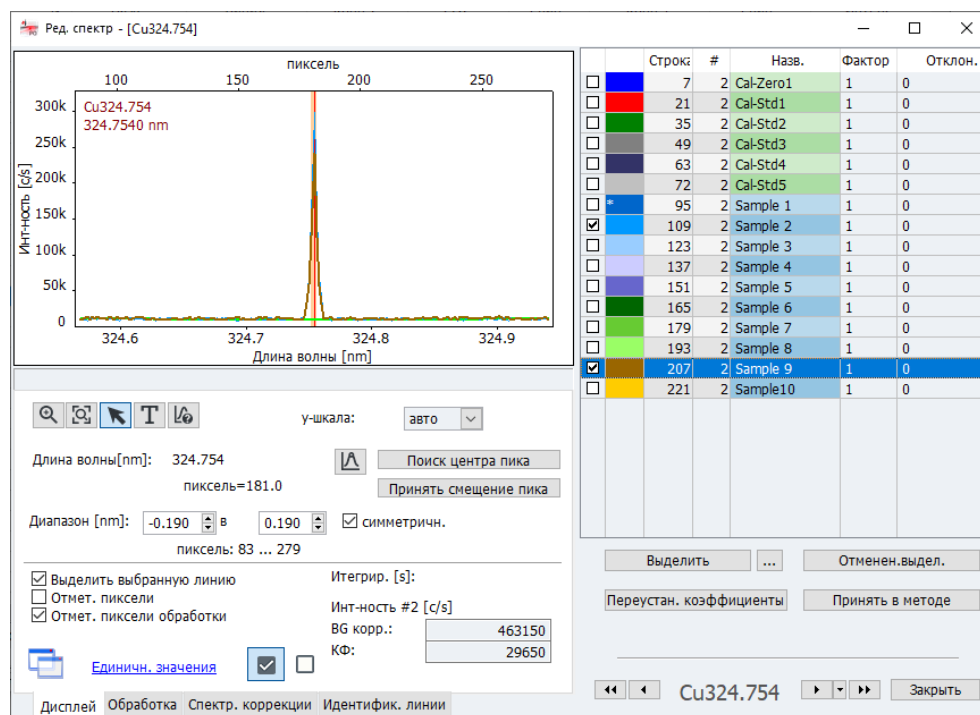
В окне **Ред. спектр** приведены все измеренные пробы со всеми отдельными значениями для соответствующей аналитической линии. Можно переключаться между отдельными аналитическими линиями.

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

### 6.12.1 Отображение спектров – окно Ред. спектр / Дисплей

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

Окно Ред. спектр | Дисплей



Выбор спектров/ список проб

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

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

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

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



Ввод коэффициента и смещения





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

Отображение линейных спектров

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

Кнопки для просмотра спектров имеют следующие функции:

Опция / Кнопка	Описание
	Активация функции масштабирования графика. Щелчок по значку при нажатой левой кнопке мыши позволяет выделить фрагмент спектра для увеличения.
	Восстановление исходных координат после масштабирования.

Опция / Кнопка	Описание
	Активирует режим выделения в окнах кривой сигнала или спектров.левой кнопкой мыши можно выбрать точки измерения. Значения выбранной точки измерения отображаются в поле вывода под кнопками.
	Активация текстового режима. При нажатой левой кнопке мыши можно выбрать область окна, куда будет добавлен текст для графика. Двойной щелчок по существующему тексту открывает окно, в котором текст можно отредактировать или удалить. Сочетание клавиш Ctrl + правая кнопка мыши позволяет переместить существующий текст.
	Активация режима идентификации линий. Щелчок кнопкой мыши или перетаскивание мышью запускает поиск в базе данных линий элемент при выбранной позиции длины волны. Найденная линия отображается внизу графика.
у-шкала	Выбор масштабирования графика: <b>авто.</b> Автомасштабирование: спектр отображается с оптимальным расширением ординаты. <b>Значение</b> Ручное масштабирование. Верхний предел ординаты выбирается в списке.
Длина волны	Отображение длины волны аналитической линии.
	Ручная установка основной пиковой точки.
Поиск центра пика	Автоматический поиск пика и коррекция отклонения.
Принять смещение пика	Сохранение отклонения пика в библиотеке линий. С этого момента отклонение будет использоваться для каждого измерения этой элементной линии.
Диапаз. (нм)	Выбор спектральной области под и над аналитической линией. Эта спектральная область доступна для анализа спектров, например, для коррекции фона. Если установлена галочка в поле <b>симметричн.</b> , спектральная область под и над длиной волны будет одинаковой. Под полями ввода отображается соответствующий диапазон пикселей. При щелчке по кнопке <b>Принять в методе</b> настройки по спектральной области выбранной линии переносятся в текущий метод измерения. Эта область используется в расчете для динамического регулирования фона (автоматическая коррекция фона). Данные изменяются также в окне метода во вкладке <b>Обработка</b> .
Выделить выбранную линию	Выделенный в правой обзорной области отдельный спектр выделяется в графике жирной линией.
Отмет. пиксели	Пиксели выделяются в графике кругом.
Отмет. пиксели обработки	Центральный анализируемый пиксель основного пика выделяется красной линией. Если в оценку включается несколько пикселей, их область выделяется светло-красным цветом.
Интенсивность	<b>ВГ корр.</b> Интенсивность с коррекцией фона <b>КФ</b> Интенсивность фона
Детальн. рез-ты	Ссылка на окно <b>Детальн. рез-ты</b>




Опция / Кнопка	Описание
<input checked="" type="checkbox"/>	Если значок выделен таким образом, линия будет использоваться в методе. Таким образом в окне <b>Ред. спектр</b> во время разработки метода можно выбрать подходящие линии.
<input type="checkbox"/>	Не использовать линию в методе.

Автоматическая установка  
основного пика

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

- ▶ Нажмите кнопку **Поиск центра пика**. Автоматическое определение основного пика позволяет очень хорошо определять большую часть пиков.  
Или можно щелкнуть по значку  вручную выделить основную пиковую точку в спектре.
- ▶ Опционально можно пересчитать результаты, чтобы оценить новое отклонение пика.  
Перейдите в окно результатов и щелчком по значку  запустите пересчет.
- ▶ Кнопкой **Принять смещение пика** сохраните найденное отклонение пика в файл линий/длин волн устройства.
  - ✓ Теперь данные доступны для каждой последующей оценки аналитической линии.

#### См. также

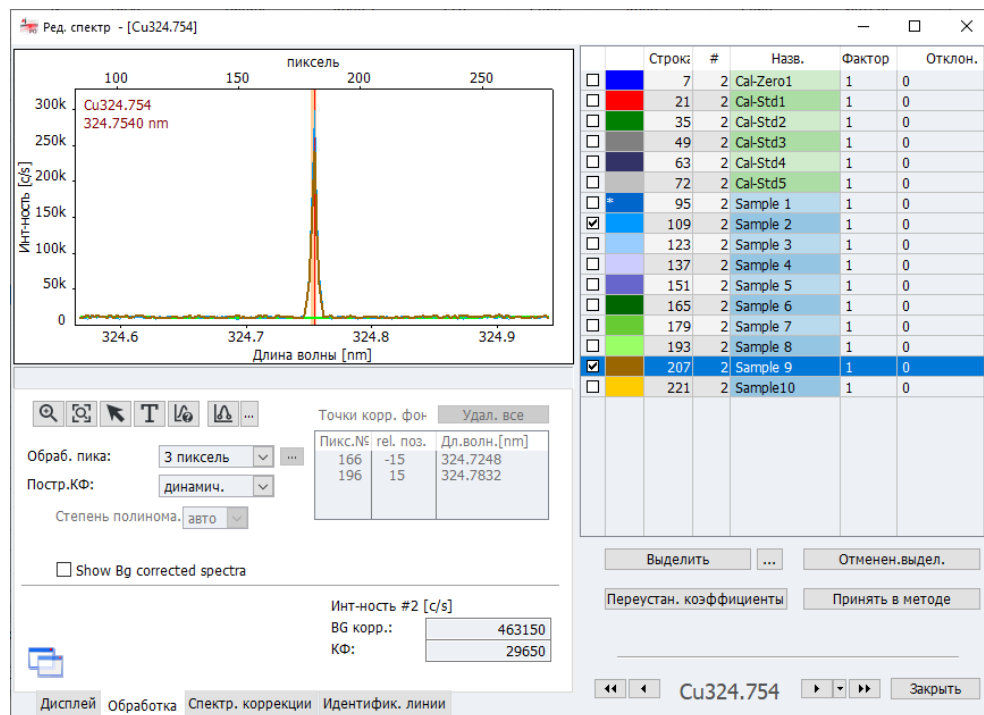
-  Спецификация аналитических линий (окно Метод | Строки) [▶ 26]
-  Пересчет результатов анализа [▶ 73]
-  Поиск линий – окно Ред. спектр | Идентифик. линии [▶ 92]

## 6.12.2 Оценка пика и определение коррекции фона – окно Ред. спектр | Обработка

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

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

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



Обзор элементов для оценки пика и коррекции фона

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

Опция/кнопка	Описание
<b>Образ. пика</b>	<p>Выставка числа пикселей для оценки пика.</p> <p><b>1</b> Сигнал измерения определяется только по пикселю, на котором расположен основной пик.</p> <p><b>Значение &gt; 1</b> Число пикселей, свыше которых определяется сигнал измерения</p> <p>Отдельные сигналы пикселей суммируются. Поэтому результат превышает максимальный пик. Пиксель с основной пиковой точкой расположен в середине области.</p> <p><b>Высота</b> В оценке учитывается высота пика.</p> <p><b>Опред. поль-лем</b> Область оценки задается пользователем. Эта опция предпочтительно используется для оценки дублетов.</p> <p>Щелчок по значку <b>...</b> активирует в списке все пиксели, включаемые в оценку.</p>
<b>Постр.КФ</b>	<p>Выбор типа коррекции фона:</p> <p><b>динамич.</b> Коррекция фона рассчитывается автоматически по математическому алгоритму. Других настроек при выборе этой опции не требуется.</p> <p><b>статич.</b> Точки коррекции фона задаются вручную щелчком мыши в спектре. Для функции коррекции дополнительно нужно выбрать степень многочлена.</p>
	<p>Установка или удаление точек коррекции фона при статической настройке</p>

Опция/ кнопка	Описание
	<p>При перемещении мыши по графику спектра отображается крест. Щелчок по значку <b>...</b> открывает список функций:</p> <p><b>Задать точки коррекции фона</b> Щелчком мыши установите точки коррекции на желаемую длину волны в спектре. Перемещая нажатую кнопку мыши по области, можно выделить всю область.</p> <p><b>Удалить точки коррекции фона</b> Щелчок по уже выбранной точке удаляет соответствующую точку коррекции фона. Перетаскивание мышью позволяет удалять области.</p> <p><b>Удалить все точки коррекции фона</b> Удаление всех выбранных точек</p>
<b>Точки корр. фона Удал. все</b>	Удаление всех установленных вручную точек коррекции фона
<b>Таблица</b>	Отображение установленных вручную точек коррекции фона
<b>Степень полинома.</b>	<p>Выбор степени многочлена для регрессии кривой коррекции фона</p> <p>При выборе опции <b>авто</b> регрессия выбирается автоматически.</p>
<b>Показ. фон.корр. спектров</b>	<p>Отображение спектров с коррекцией фона</p> <p>Настроенный фон (зеленая линия) вычитается из спектра пробы. Тем самым фон соответствует нулевой линии.</p>

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

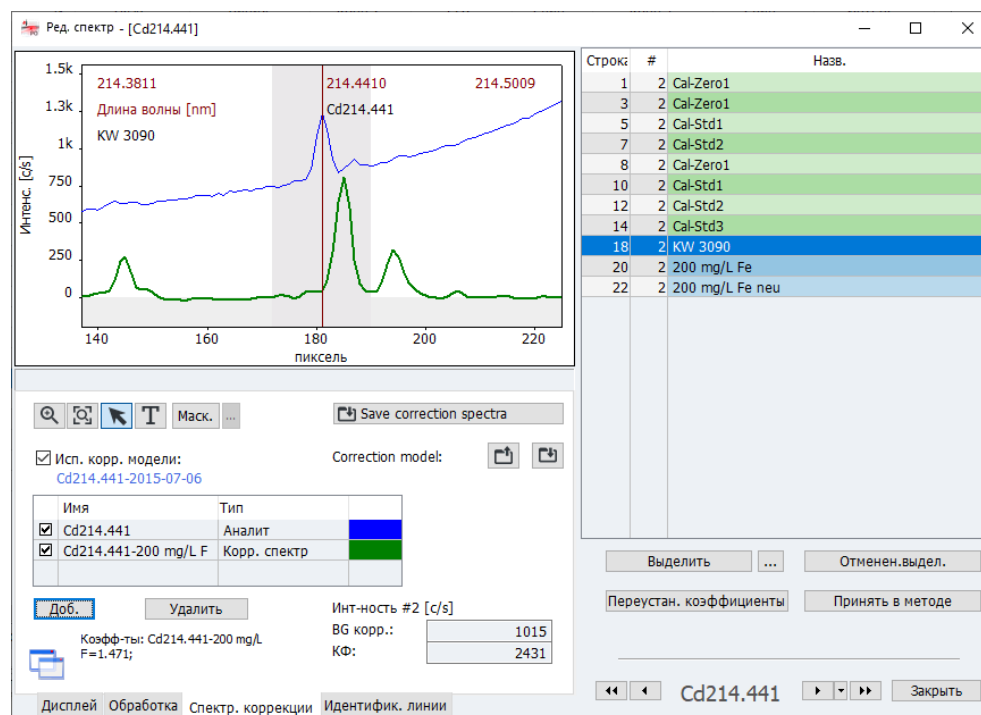
#### См. также



- 📖 Устранение спектральных помех – окно Ред. спектр | Спектр. коррекции [▶ 89]
- 📖 Отображение спектров – окно Ред. спектр / Дисплей [▶ 84]

### 6.12.3 Устранение спектральных помех – окно Ред. спектр | Спектр. коррекции

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

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



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

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

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

### 6.12.3.1 Создание модели для спектральных коррекций

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.
- Создайте метод с аналитической линией.

Шаг 1: идентификация интерференций

Шаг 2: измерение и сохранение корректирующих спектров


- ▶ Измерьте аналит в матрице и загрузите спектр в окно **Ред. спектр** (двойной щелчок по строке пробы в главном окне).
- ▶ В окне **Ред. спектр | Идентифик. линии** идентифицируйте возможные мешающие линии.
- ▶ Добавьте к последовательности измерение мешающих компонентов матрицы, которые вызывают спектральное наложение, и измерьте эти компоненты в одноэлементных растворах.

**Примечание:**

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

- ▶ Загрузите спектр компонента матрицы в окно **Ред. спектр | Спектр. коррекции**.
- ▶ Нажмите кнопку **Сохранение спектров**.
  - ✓ Откроется окно базы данных для сохранения корректирующих спектров.
- ▶ Задайте имя и завершите процедуру, нажав кнопку **Сохранение**.

Шаг 3: создание модели коррекции

- ▶ Таким же образом сохраните спектры других компонентов матрицы.
- ▶ Снова загрузите спектр аналита в матрицу.
- ▶ Активируйте флажок в поле **Исп. корр. модели**.
- ▶ Щелкнув по кнопке **Доб.**, откройте окно выборки уже сохраненных корректирующих спектров.
- ▶ Выделите корректирующий спектр в списке и нажмите кнопку **Загрузка**.
- ▶ Аналогичным образом добавьте все корректирующие спектры.
- ▶ В окне просмотра спектров убедитесь, что полученный спектр пробы не содержит наложений.
- ▶ Кнопкой **Маск.** с удерживаемой нажатой кнопкой мыши можно выделить области, которые не следует включать в расчет модели коррекции. По умолчанию область аналитической линии ( $\pm 9$  пикселей) маскируется. Маскирование других областей может понадобиться, если для записи не было чистых субстанций, и эти загрязнения могут встречаться в непостоянных процентах.
- ▶ Чтобы сохранить модель коррекции, щелкните по значку  и задайте имя модели. Завершите процедуру, нажав кнопку **Сохранение**.

Шаг 4: Применение аналитической линии с моделью коррекции к методу

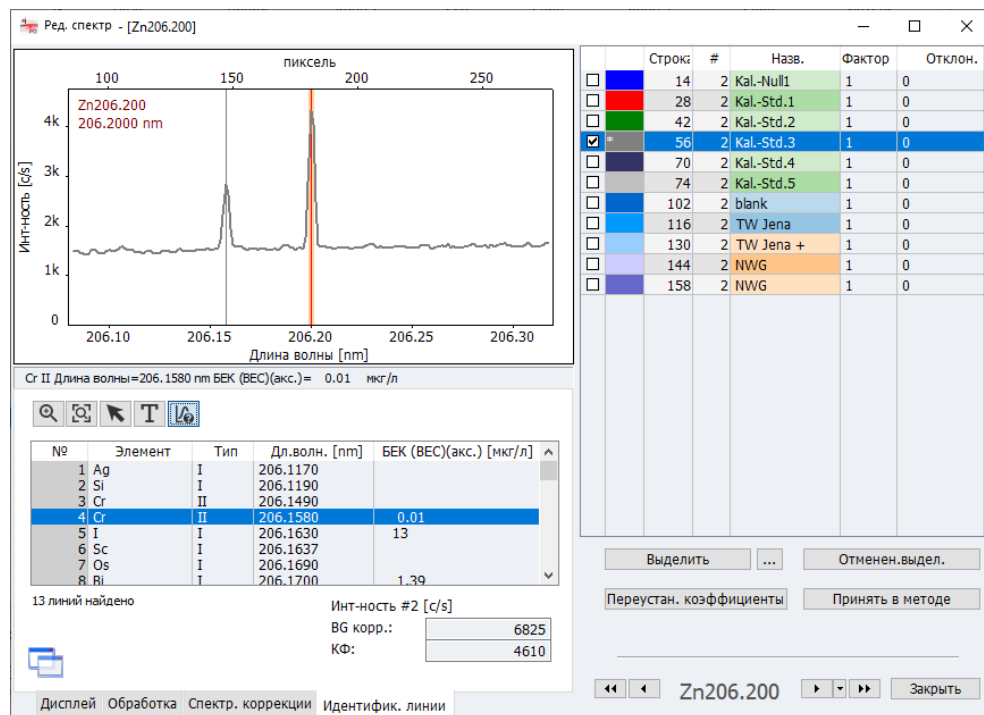
- ▶ Нажав кнопку **Принять в методе**, перенесите параметры аналитической линии с моделью коррекции в текущий метод.
  - ✓ В окне **Метод | Обработка** аналитическая линия в столбце **Коррекция** обозначена аббревиатурой **LSM** (Least Square Model, модель наименьших квадратов).

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


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

### 6.12.3.2 Поиск линий – окно Ред. спектр | Идентифик. линии

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

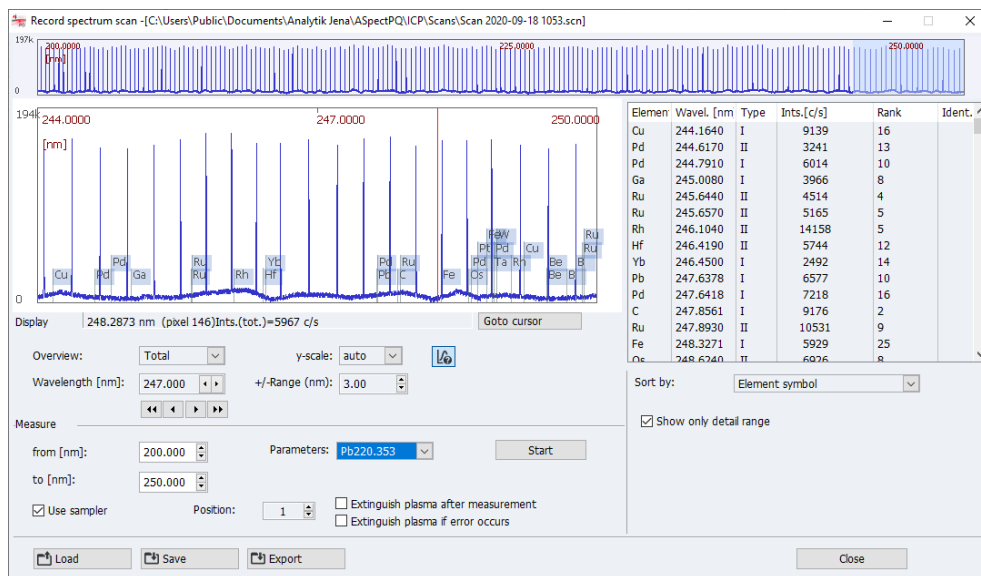


В таблице под спектром отображаются все идентифицированные в участке спектра линии.

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

## 6.13 Запись обзорного спектра


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



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

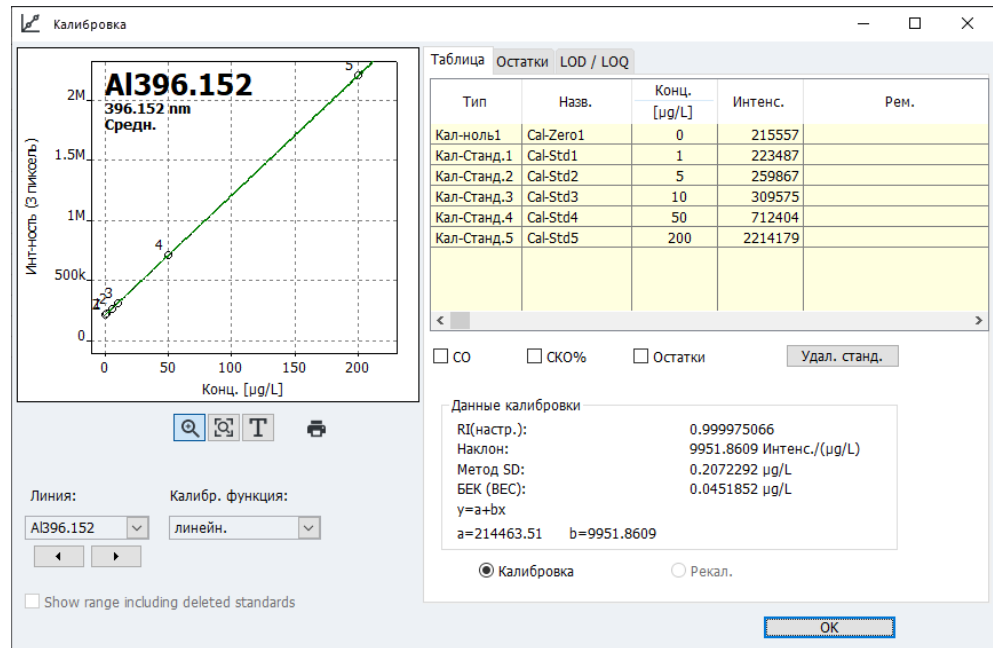
# 7 Калибровка

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

- Щелкнув по значку  на панели инструментов, откройте окно **Калибровка**. Или дважды щелкните по одной из строк последовательности **Вычисл. калиб.** или выберите пункт меню **Разраб. метода | Калибровка**.

Окно Калибровка

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



Для каждой оговоренной в последовательности аналитической линии окно содержит:

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

Выбор линии

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


Выбор функции калибровки

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

Опция калибровки	Описание
линейн.	Линейный ход функции калибровки $y = a + bx$
нелинейн. отнош.	Нелинейный ход функции калибровки, описанный дробно-рациональной функцией $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$

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

См. также

 Общие настройки калибровки и коррекции бланка [▶ 142]

## 7.1 Графическое представление калибровочной кривой

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

Цветовая маркировка

Точки измерения промаркированы следующим образом:

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



Кривые также промаркированы цветом:

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

Примечание по прогнозируемой/ доверительной области

Положение прогнозируемой области зависит от выбранной статистической достоверности и является мерой «качества» калибровки, от которой в конечном итоге зависит и статистическая достоверность аналитических измерений пробы. Кроме того, прогнозируемая область используется для определения точек калибровки «с подозрением выброса». Статическую достоверность можно выбрать в окне **Метод | Статистика**. В окне **Опции | Калибровка** можно выбрать, какая область будет отображаться: прогнозируемая или доверительная.

Увеличение калибровочной кривой

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

Вставка комментария




В график можно добавить текстовое поле для ввода комментария.

- ▶ Выберите **T**.
- ▶ При нажатой левой кнопке мыши перетащите рамку текстового поля на график.
- ▶ В открывшемся окне ввода щелчком по кнопке **Шрифт** выберите шрифт.
- ▶ Введите текст и нажмите кнопку **ОК**.
  - ✓ Текст отобразится на графике.

Печать калибровочной кривой

При щелчке по значку  производится печать калибровочной кривой и данных калибровки.

#### См. также

-  Общие настройки калибровки и коррекции бланка [▶ 142]
-  Установка параметров статистических оценок (окно Метод | Статистика) [▶ 46]
-  Печать результатов анализов [▶ 121]

## 7.2 Отображение результатов калибровки

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

#### См. также

-  Общие настройки калибровки и коррекции бланка [▶ 142]

### 7.2.1 Калибровка – вкладка Таблица

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

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

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

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

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

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

## 7.2.2 Калибровка – вкладка Остатки

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

## 7.2.3 Калибровка – вкладка LOD/ LOQ

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

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

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

Метод калибровочной кривой

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

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

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

Метод бланка

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

Для метода бланка применяется следующая инструкция по вычислению:

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

Предел детектирования (**LOD**)

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

Предел количественного определения (**LOQ**)

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

**См. также**

📄 Параметры измерений и действий в последовательности [▶ 58]

**7.2.4 Калибровка – вкладка LOD/ LOQ**

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

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

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

Метод калибровочной кривой

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

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

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

Метод бланка

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

Для метода бланка применяется следующая инструкция по вычислению:

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

Предел детектирования (**LOD**)

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

Предел количественного определения (**LOQ**)

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

**См. также**

📄 Параметры измерений и действий в последовательности [▶ 58]


## 7.3 Редактирование калибровочной кривой

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

- Изменить используемую функцию калибровки
- Активировать/деактивировать стандартные растворы
- Заменить измеренный стандартный раствор

Для изменения функции калибровки выберите из списка **Калибр. функция** новую модель.

Для исключения стандарта из расчета отметьте его во вкладке **Таблица** и нажмите кнопку **Удал. станд..** При этом измеренное значение не удаляется навсегда и может быть снова активировано в любой момент.

Измененные параметры калибровки будут применены к результатам при их пересчете. Для этого выберите пункт меню **Процедура | Переделать рез-ты** или на панели инструментов щелкните по значку .

Также можно повторно измерить стандартный раствор и пересчитать результаты.

### См. также

- 📖 Пересчет результатов анализа [▶ 73]


## 8 Контроль качества (КК)

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

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

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

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

- ▶ Откройте окно **КК** щелчком по значку  на панели инструментов или выберите пункт меню **Разраб. метода | КК**.

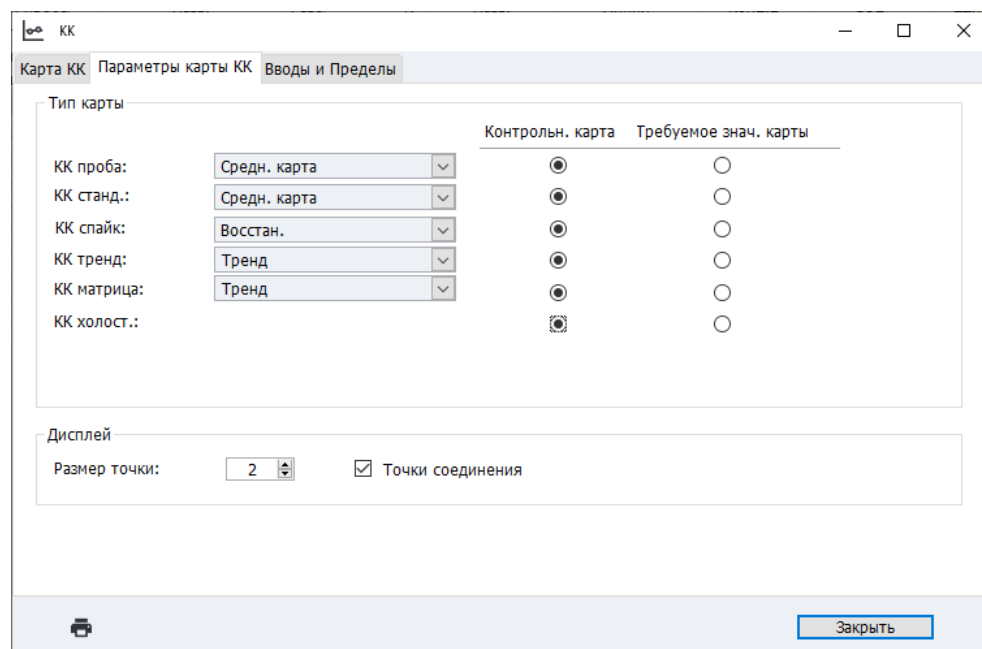
### См. также

- 📖 Установка параметров контроля качества (окно Метод | ККС) [▶ 48]
- 📖 Параметры измерений и действий в последовательности [▶ 58]

### 8.1 Параметры вкладок КК

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

Окно КК | Параметры карты КК



Типы проб КК и оценки

Для различных типов проб КК можно выбрать следующие оценки:

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

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

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

Цвет выделения

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

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

## 8.2 Вводы и пределы вкладок КК

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

Опция	Описание
Схема ввода	<b>Все значения</b> Ввод каждого выполненного контроля качества. <b>1 знач./день</b> Ввод только последнего контроля качества за день. <b>2 знач./день</b> Ввод только первого и последнего контроля качества за день.

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

Обновление карт

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

Опция	Описание
<b>Принять период подгот., удал. остаток</b>	Для <b>Контрольн. карта:</b> Применение периода подготовки и образование нового периода подготовки для новой вкладки.
<b>Посл. значения -&gt; нов. период подг-ки</b>	Для <b>Контрольн. карта:</b> 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.
<b>Удалить все, нов. период подг-ки</b>	Все значения удаляются. Для <b>Контрольн. карта:</b> Новые значения измерения заполняют сначала период подготовки.


Щелчок по кнопке **Процесс** позволяет обновить вкладки КК согласно вышевыбранной опции.

## 8.3 Отображение вкладок КК

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

Опции/Отображение

Опции/Отображение	Описание
<b>Контрольн. проба</b>	Выбор типа пробы КК для отображения.
<b>Линия</b>	Выбор элементной линии для отображения.
<b>Показанные значения</b>	Количество отображаемых значений и дата первого и последнего отображаемого значения.
<b>Сохраненн. значения</b>	Общее количество вводов на текущей вкладке КК и дата первого и последнего значения.
<b>x(мин) / x(макс)</b>	Установка стартовой записи и количества записей, которые будут отображаться на графике.

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

Область графика

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

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

Опция	Описание
Кол-во	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, зарегистрированный в системе на момент измерения.
Версия	Версия используемого метода
Удалить ввод / Активир. ввод	Выделение значения измерения как удаленного или его повторная активация.
Доб. коммент	Ввод комментария для точки измерения, например, причина удаления.


## 9 Управление и мониторинг прибора и аксессуаров

### 9.1 Спектрометр

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

Можно установить или вызвать для показа следующие данные:

- Данные устройства
- Отображение параметров считывания детектора
- Запуск измерений для оптимизации устройства

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


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

#### 9.1.1 Настройка параметров спектрометра и тестирование функций

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

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


Элементы окна Спектрометр |  
Параметры

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



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

Измерение пика спектров на выбранной аналитической линии

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

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

#### См. также

-  Вставка аналитических линий в таблицу линий [▶ 28]
-  Отображение и редактирование спектров интенсивности [▶ 84]

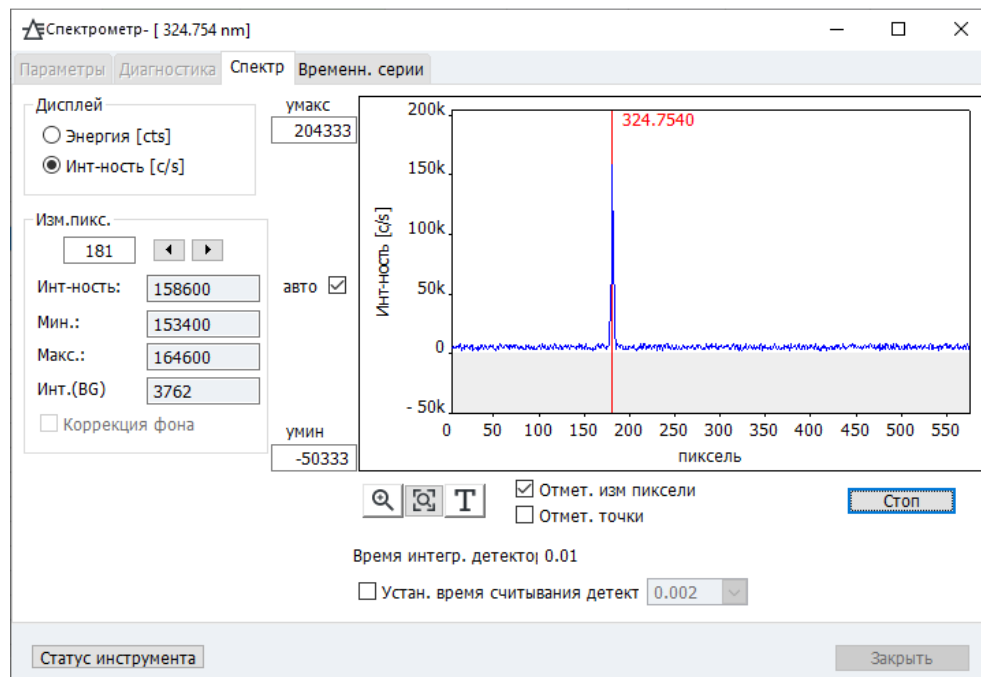
### 9.1.2 Диагностика параметров устройства

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



### 9.1.3 Непрерывное измерение пика

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

Графическое представление и цифровой анализ



Опция	Описание
<b>Дисплей</b>	Опции для представления спектра: <b>Энергия</b> Отображение энергетического спектра, единица измерения: импульсов в сек  Для получения результатов измерений с минимально возможным уровнем шумов время интегрирования для детектора выбирается таким образом, чтобы максимальная энергия составляла ок. 30000 импульсов в сек. <b>Инт-ность</b> Представление энергии на единицу времени, единица измерения: импульсов в сек  По интенсивности различные пики можно сравнивать независимо от времени интегрирования.
<b>Изм.пикс.</b>	Выбор пикселя, значения которого будут непрерывно отображаться в поле <b>Энергия</b> или <b>Инт-ность</b>  В полях <b>Макс.</b> и <b>Мин.</b> отображаются соответствующие результаты непрерывного измерения.
<b>Отмет. изм пиксели</b>	Выделение установленного анализируемого пикселя в графике вертикальной красной линией
<b>Отмет. точки</b>	Выделение точкой значений измерения для каждого пикселя в графике

Опция	Описание
Устан. время считывания детектора вручную	Выбор из списка времени считывания для ПЗС-детектора Длительное время считывания приводит к более высоким значениям энергии. Настройка времени считывания CCD-детектора по умолчанию составляет 0,01 с.
Масштабирование графика	Непосредственный ввод значений начальной и конечной точки ординаты в полях ввода на осях. Или после активации режима масштабирования значком  выберите область просмотра при нажатой кнопке мыши. Отмена масштабирования осуществляется путем активации опции <b>авто</b> или щелчком по значку  .

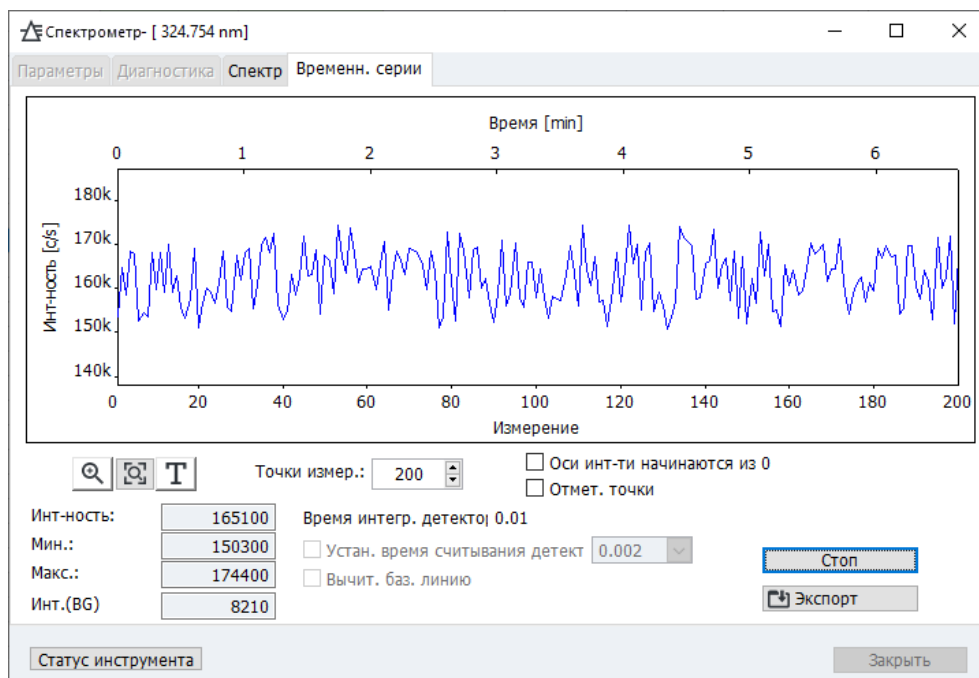
Запуск измерения пика

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

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



## 9.1.4 Запись кривой сигнала

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




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

Для записи кривой сигнала доступны следующие параметры настройки:

Опция	Описание
Шкала	После активации режима масштабирования значком  выберите область просмотра при нажатой кнопке мыши Выход из режима масштабирования осуществляется щелчком по значку 
Оси инт-ти начинаютс я из 0	Не автоматическая настройка масштабирования у-оси, а установка начала на «0»
Точки измер.	Выбор количества точек измерения из списка
Отмет. точки	Выделение точек измерения в графике точками
Устан. время считывания детектора вручную	Выбор из списка времени считывания для ПЗС-детектора
Вычит. баз. линию	Отображение значений интенсивности с поправкой на фон

## 9.2 Плазма

Окно **Плазма** содержит следующие функции:

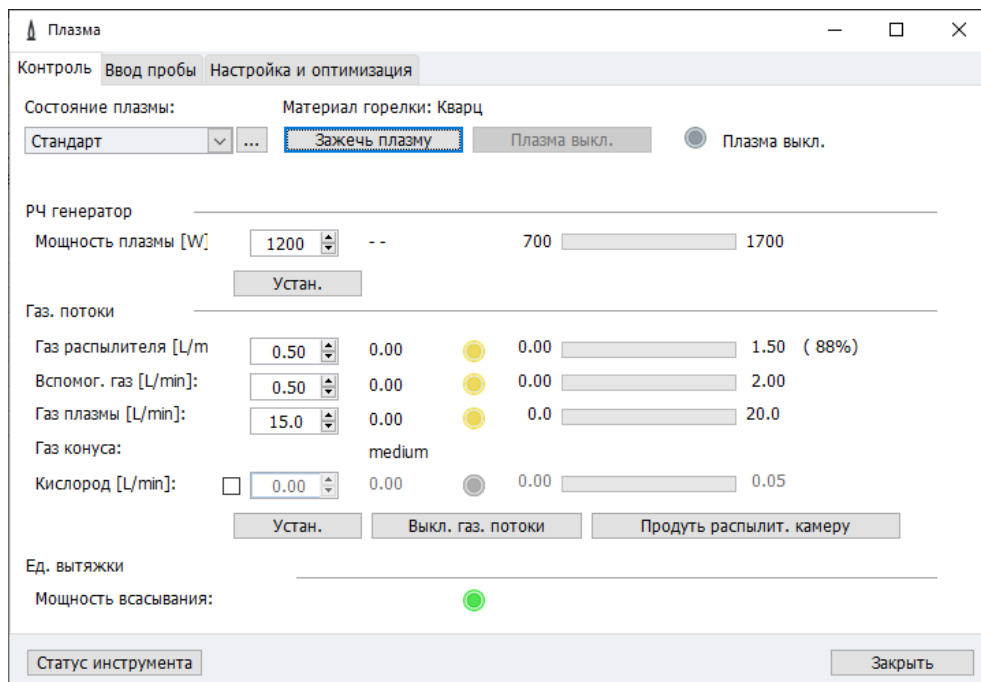
- Розжиг/ гашение плазмы
  - Контроль ВЧ-генератора
  - Настройка газовых потоков
  - Контроль насоса анализатора
  - Юстировка передающей оптики
  - Автоматическая оптимизация потока газа в распылителе и мощности плазмы
- Откройте окно **Плазма** щелчком по значку  на панели инструментов или выберите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

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

### 9.2.1 Розжиг плазмы и настройка условий для плазмы

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

Функции в окне Плазма |  
Контроль



Опция	Описание
<b>Состояние плазмы</b>	Выбор условий для плазмы (мощность плазмы и газовые потоки).
<b>Зажечь плазму/ Погасить плазму</b>	Розжиг и гашение плазмы при подготовленном ИСП-ОЭС.
<b>РЧ генератор</b>	<p>Выставка эффективной мощности плазмы.</p> <p>Мощность плазмы задает температуру плазмы. Встроенное ПО устройства регулирует ток генератора таким образом, чтобы достичь эффективной мощности плазмы.</p>
<b>Газ. потоки</b>	<p>Включение и выставка газовых потоков.</p> <p><b>Газ плазмы</b> Плазмообразующий газ поступает по внешней трубке и предназначен для генерирования плазмы.</p> <p><b>Газ распылителя</b> Газ распылителя распыляет пробу и переводит аэрозоль пробы в плазму. Патрубок подключен к распылителю. Процентное значение в строке газа распылителя позволяет увидеть, насколько проницаемым/чистым является распылитель (см. ниже)</p> <p><b>Вспомог. газ</b> Вспомогательный газ отталкивает плазму от инжектора и протекает между внутренней трубкой и инжектором.</p> <p><b>Газ конуса</b> Газ конуса удаляет «холодный» шлейф плазмы, чтобы устранить интерференции на основании повторного сочетания в плазме в осевом направлении обзора. Одновременно газ конуса поддерживает охлаждение конуса.</p> <p><b>Кислород</b> Кислород можно добавлять в газ распылителя как дополнительный газ для выбранных задач. Опцию потока кислорода необходимо активировать флажком перед настройкой газа, прежде, чем его можно будет изменить.</p>
<b>Выкл. газ. потоки</b>	Закрытие всех газовых клапанов.

Опция	Описание
<b>Продуть распылит. камеру</b>	Газ распылителя включается на 1 минуту, чтобы стравить воздух из распылительной камеры. Тем самым облегчается процесс розжига плазмы после прерывания эксплуатации. В этом время на экране идет обратный отсчет.
<b>Мощность всасывания</b>	Контур безопасности проверяет, достаточно ли мощности подключенной вытяжки для работы ИСП-ОЭС. Если мощности достаточно, индикатор загорается зеленым цветом.

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

Оценка распыляющей функции

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

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

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

Выбор условий для плазмы

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

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

Функция	Описание
<b>Сохранить текущие параметры плазмы</b>	Сохранение установленных условий для плазмы (мощность плазмы и газовые потоки) и добавление их в список
<b>Удалить ввод</b>	Удаление выбранной записи Настройки по умолчанию <b>Стандарт</b> , <b>Керосин</b> и <b>Гибридная техника</b> удалить нельзя.
<b>Установить состояние плазмы</b>	Настройка параметров плазмы выбранной записи на ИСП-ОЭС
<b>Копировать в линию метода</b>	Доступно, если в списке выбрана линия метода Переносит условия для плазмы в параметры метода выбранной линии.
<b>Копировать во все линии метода</b>	Доступно, если в списке выбрана линия метода Переносит условия для плазмы в параметры метода всех линий.
<b>Сохранить как метод по умолчанию</b>	Сохранение текущих условий для плазмы как предустановленных значений для новых добавляемых в метод линий (не для избранных линий)

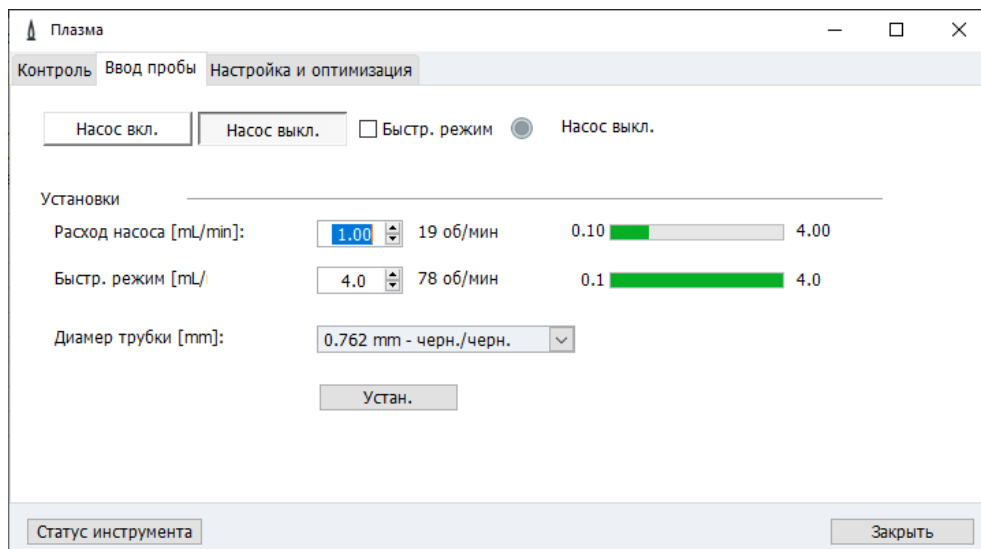
См. также

 Включение спектрометра и зажигание плазмы [▶ 67]

## 9.2.2 Контроль подачи проб на насос

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

Функции в окне Плазма | Ввод пробы

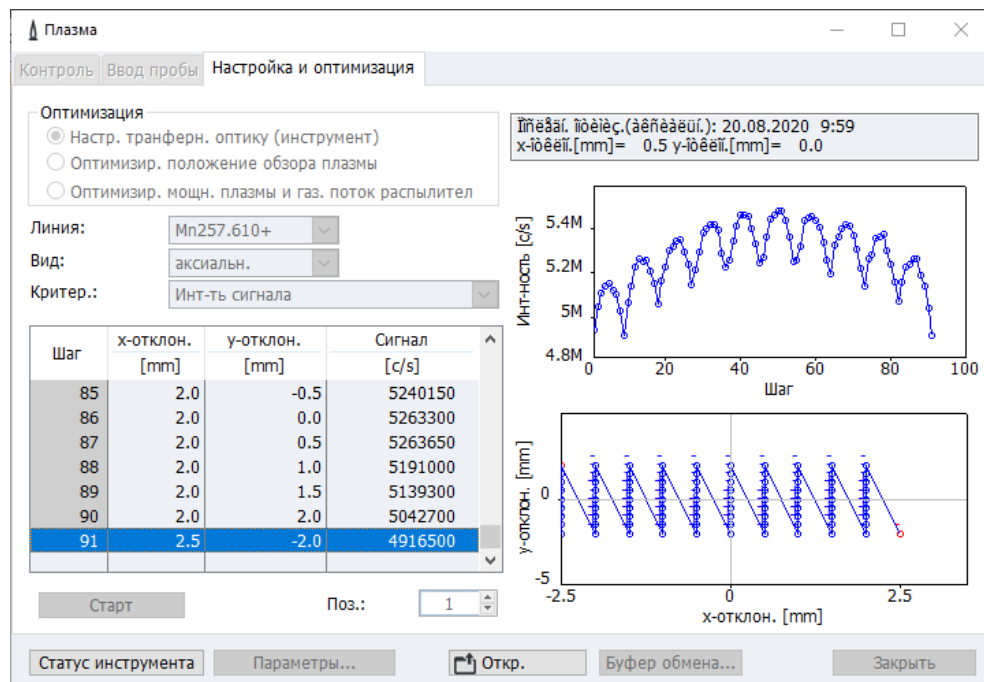


Функция/ параметр	Описание
Насос вкл./ Насос выкл.	Включение и выключение насоса. В исходном состоянии после включения ИСП-ОЭС насос включен.
Быстр. режим	Переключение насоса вручную на ускоренный ход Функцию можно использовать для ручной промывки системы подачи проб. После выполненной промывки флажок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

### 9.2.3 Юстировка и оптимизация плазмы

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

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



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

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

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

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

Критерий	Спектральная область аналитических линий
Инт-ть сигнала	< 200 нм
Сигнал/фон	200 – 350 нм

Критерий	Спектральная область аналитических линий
Сигнал/квадр. коэффициент фона	> 350 Нм

Юстировка передающей оптики относительно оптических осей (средние точки плазмы)

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

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

- ▶ Активируйте опцию **Настр. трансферн. оптику (инструмент)** .
  - ✓ Аналитическая линия Мп выставится в списке **Линия** автоматически.
- ▶ Выберите в **Параметры** метод юстировки (см. выше).
- ▶ Выберите направление обзора:

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

- ▶ Погрузите всасывающую трубку в пробу. При использовании автосамплера выставьте позицию на штативе для проб.
- ▶ Нажмите кнопку **Старт**.
  - ✓ Юстировка передающей оптики выполняется автоматически. В конце процедуры юстировки отображаются новые данные.
- ▶ Примените новые значения юстировки, нажав кнопку **ОК**.

Оптимизация позиции обзора для аналитической линии активированного метода

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

- ▶ В списке **Линия** выберите аналитическую линию из метода.
- ▶ Активируйте опцию **Оптимизир. положение обзора плазмы**. Автоматически будет применено значение для направления обзора из метода и будет создан критерий для оптимизации (см. выше).
- ▶ Щелкнув по кнопке **Параметры**, выберите метод настройки (см. выше).
- ▶ Погрузите всасывающую трубку в пробу. При использовании автосамплера выставьте позицию на штативе для проб.
- ▶ Нажмите кнопку **Старт**.
  - ✓ Юстировка позиции обзора выполняется автоматически. В конце отображаются оптимизированные значения смещения.
- ▶ Примените новые значения смещения к методу, нажав кнопку **ОК**.

Оптимизация условий для плазмы для пробы

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

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

- ✓ Автоматически будут применены предыдущие условия для плазмы из метода и выставится критерий для оптимизации (см. выше).
- ▶ Выберите в **Устан.** метод юстировки (см. выше).
- ▶ Погрузите всасывающую трубку в пробу. При использовании автосамплера выставьте позицию на штативе для проб.
- ▶ Нажмите кнопку **Старт**.
  - ✓ Оптимизация мощности плазмы и потока газа распылителя выполняется автоматически. В конце отображаются оптимизированные значения.
- ▶ Примените новые значения к методу, нажав кнопку **ОК**.


## 9.3 Автосамплер

Автосамплер является дополнительным аксессуаром. Он распознается при инициализации в окне **Быстрый старт** после запуска программы ASpect PQ.

Окно **Автосамплер** содержит следующие функции:

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

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

Откройте окно **Автосамплер** щелчком по значку  на панели инструментов или с помощью пункта меню **Разраб. метода | Автосамплер**.

Инициализация автосамплера

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

- ▶ Щелчок по кнопке **Инициализ.** позволяет при необходимости выполнить повторную инициализацию автосамплера без перезапуска программы ASpect PQ.

Распознавание автосамплера

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

- ▶ Для этого нажмите кнопку **Детект.**, а затем кнопку **Инициализ.**

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

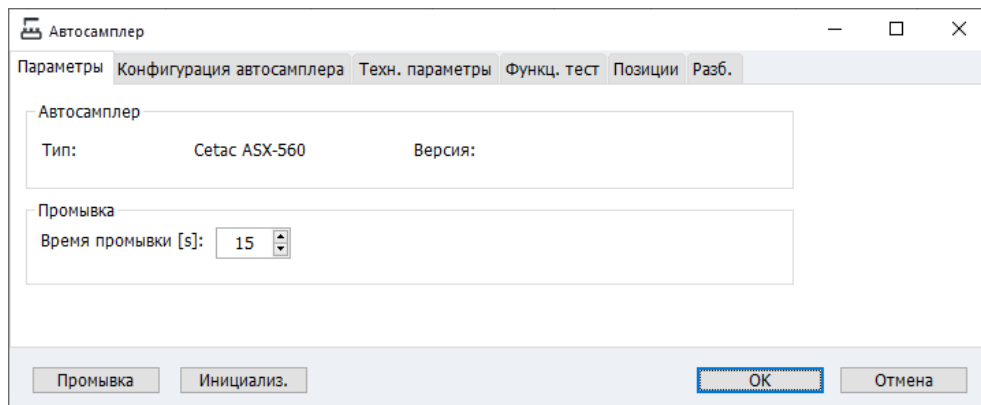
Промывка путей подачи проб

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

### 9.3.1 Отображение подключенного автосамплера

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

- Тип автосамплера
- Параметры промывки



Тип автосамплера

Параметры промывки

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

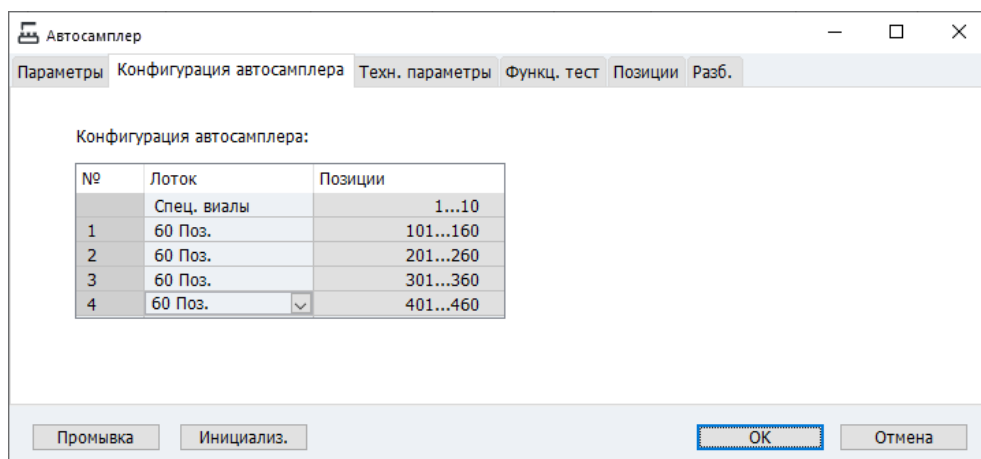
Продолжительность промывки системы пути подачи пробы от сосуда для проб до горелки применяется из текущего метода. В свою очередь, изменения в окне **Автосамплер | Параметры** не влияют на записи в методе. Во время промывки системы с применением автосамплера промывочный раствор забирается при этом из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

**См. также**

- 📖 Настройка подачи пробы (окно Метод | Подача пробы) [▶ 35]

### 9.3.2 Настройка штатива для проб

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



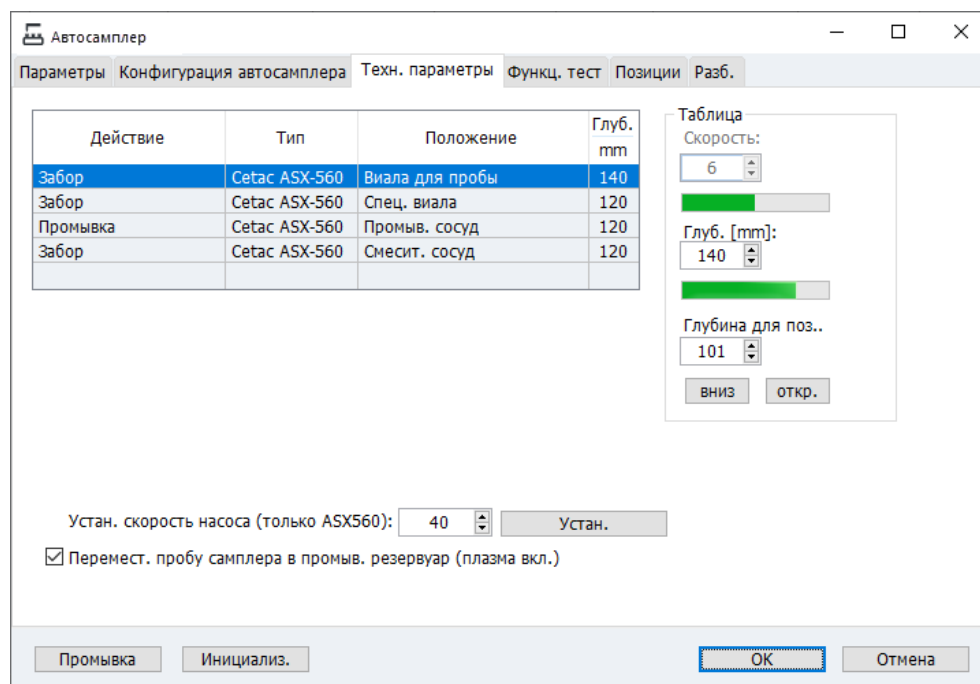
В зависимости от используемого автосамплера, можно разместить различные штативы для проб и штативы со специальными пробами.

В таблице выберите штативы для проб. Для переменных штативов для проб как номера позиций предусмотрены трехзначные числа. Первая цифра обозначает положение штатива для пробы на автосамплере, две другие – позицию на штативе для

проб. Так, например, номер 113 означает позицию 13 на штативе для проб 1. Переменный штатив для проб 1 расположен на автосамплере перед промывочной емкостью, далее следуют штативы для проб 2 и 3.

### 9.3.3 Технические параметры автосамплера

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



Для отдельных типов сосудов в расчет принимаются следующие действия:

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

Элементы таблицы действий

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

Поле Таблица

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

Опция	Описание
Глуб.	Выставка глубины погружения канюли. Глубина погружения измеряется, начиная от самой высокой позиции рычага сэмплера.

Опция	Описание
Глубина для поз..	Позиция специального сосуда или сосуда для проб, с которым проверяется глубина погружения.
Устан.	Если активировано, рычаг автосамплера перемещается над сосудом, для которого необходимо изменить позиционирование. Для сосудов ля проб и специальных сосудов это позиция пробы, установленная в поле <b>Глубина для поз..</b>  Если не активировано, глубина погружения и скорость изменяются без перемещения рычага над сосудом.

Дополнительные опции

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

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

### 9.3.4 Проверка функций автосамплера

В окне **Автосамплер | Функция. тест** можно проверить, готов ли автосамплер к работе.

Окно Автосамплер | Функция. тест

Проверяются следующие функции автосамплера:

Функция	Описание
Статус системы	Проверка готовности к работе. Кнопка <b>Обновление</b> позволяет еще раз проверить готовность к работе.
Позиции	При нажатии кнопки <b>Устан.</b> автосамплер перемещается в выбранную позицию. <b>Виала №</b> Автосамплер перемещается в позицию, выбранную в списке. <b>Промыв. поз.</b> Автосамплер перемещается к промывочной емкости.

Функция	Описание
Рычаг для пробы	Опускание рычага автосамплера на заданное в списке значение Глуб..
Промыв. насоса	Включение и выключение промывочного насоса.

Перемещение канюли автосамплера в промывочную емкость

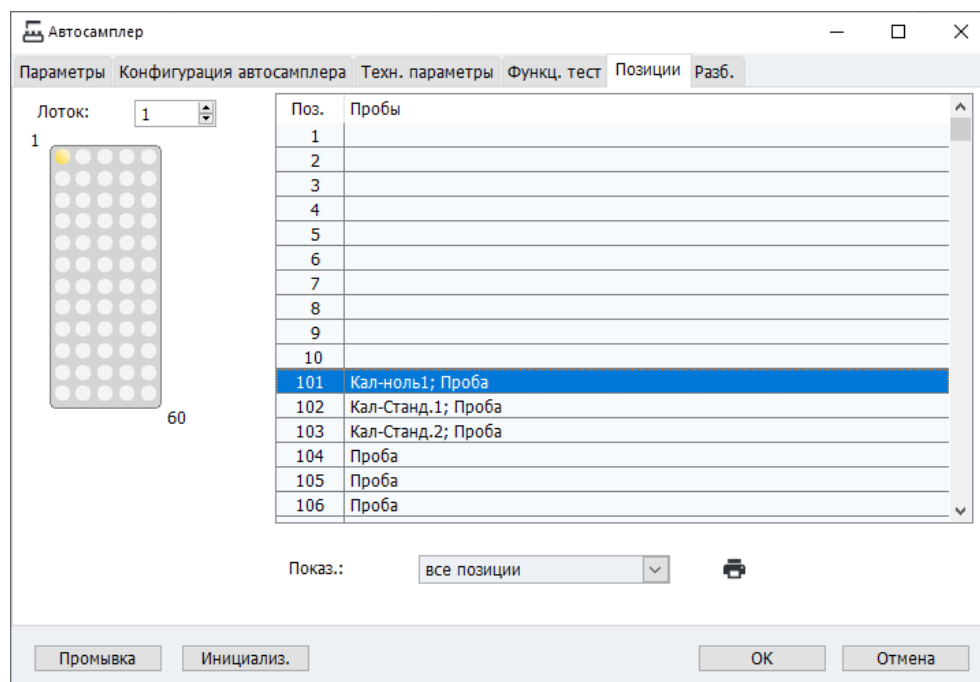
При установленном флажке **Перемест. пробу самплера в промыв. резервуар (плазма вкл.)** после закрытия окна **Автосамплер** канюля погружается в промывочную емкость.

### 9.3.5 Отображение позиций проб на автосамплере

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

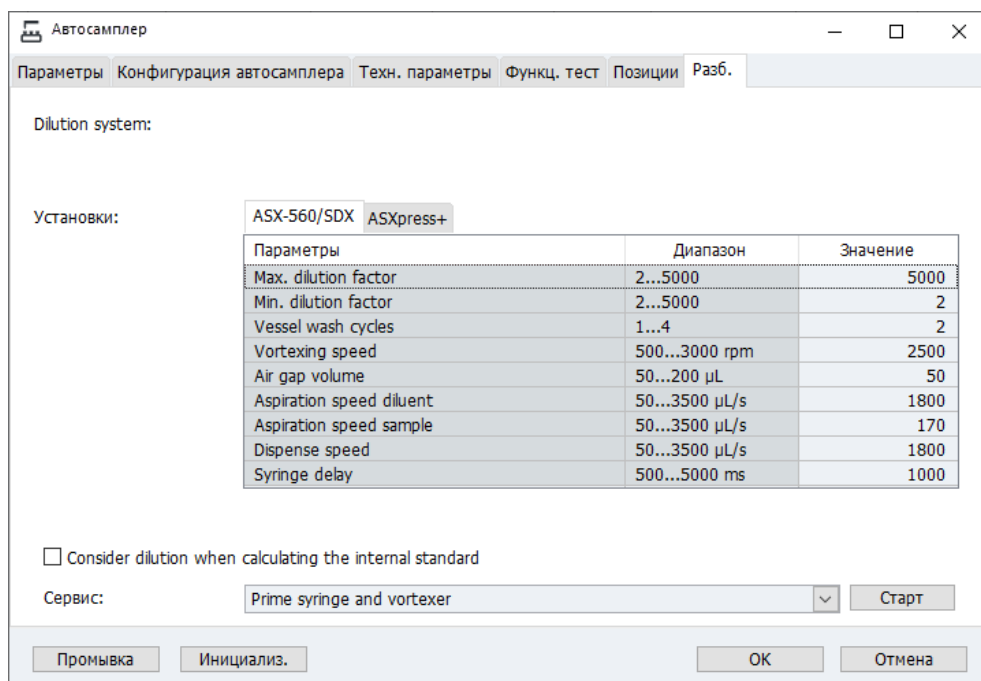
Доступны три опции для просмотра: **все позиции**, **только позиции пробы** и **только спец. позиции**.

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



### 9.3.6 Функция разбавления

Параметры разбавления пробы при использовании автосамплера Cetac ASX 560 с Cetac SDX<sub>HPLD</sub> отображаются в окне **Автосамплер / Разб.**



Настройки

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

При расчете внутреннего стандарта учитывайте разбавление

При активированном флажке при расчете внутреннего стандарта программа учитывает разбавление.

- Если добавить внутренний стандарт к исходной пробе, также будет разбавлен внутренний стандарт в пробе. Установите флажок, чтобы учесть в расчете разбавление.
- Если Вы добавите внутренний стандарт также в разбавитель или в раствор пробы с помощью набора для внутреннего стандарта, внутренний стандарт не будет разбавлен. В этом случае не устанавливайте флажок.
- Не устанавливайте этот флажок, даже если в качестве внутреннего стандарта используется аргон.

Обслуживание

В списке **Сервис** можно выбрать функции обслуживания на SDX<sub>HPLD</sub> и запустить их выполнение кнопкой **Старт**:

Опция	Функция
<b>1 Перв.шприц и вихр.смес-ль</b>	Промывочная жидкость шприцевым насосом подается по системе и выводится в вихревой смеситель. Тем самым из системы удаляются пузырьки воздуха и климатизируется вихревой смеситель.
<b>2 Перемест.шприц в пол.для извл.</b>	Если в рамках технического обслуживания шприцевой насос необходимо демонтировать, при помощи этой функции нужно заранее перевести поршень шприца в правильное положение.
<b>3 Переустановка ASXpress+ после разборки для очистки</b>	Только при установленном ASXpress+: Инициализация ASXpress+ после установки или обслуживания.

## 9.4 Рециркуляционный охладитель

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



---

### ПРИМЕЧАНИЕ

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

- 
- ▶ Выберите пункт меню **Прочее | Обслуживание**.
  - ▶ В окне **Обслуживание** запустите замену охлаждающей жидкости, нажав кнопку **Изменить**.
  - ▶ Следуйте инструкциям мастера.

## 10 Управление данными

В данном разделе приведена следующая информация:

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

### 10.1 Функции печати в ASpect PQ

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

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


#### 10.1.1 Печать результатов анализов

ASpect PQ предоставляет различные возможности вывода на печать данных результатов:

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

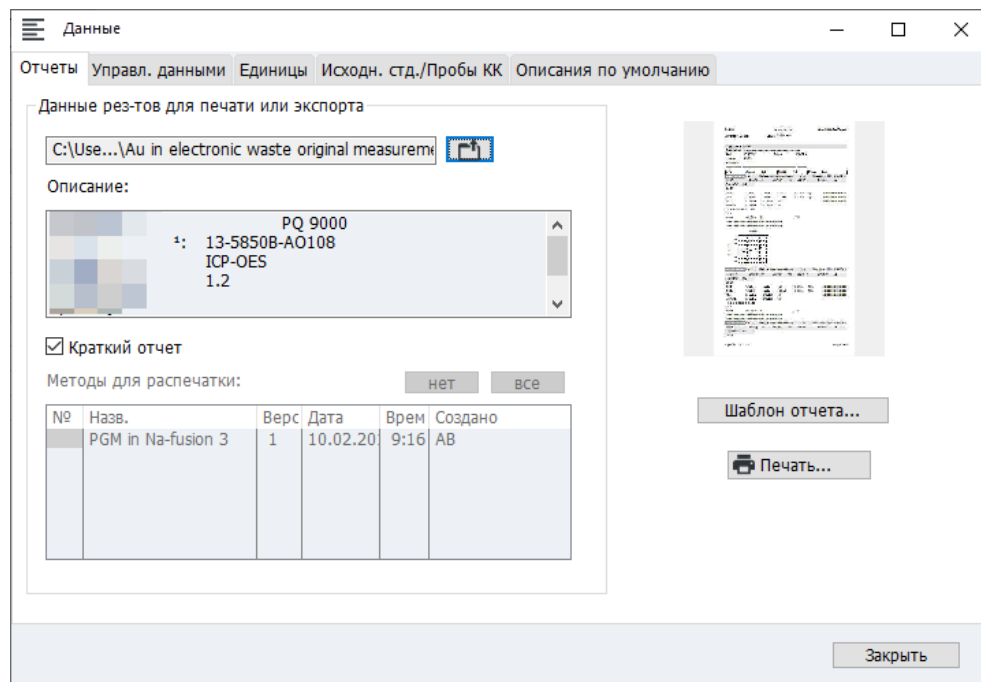
Распечатка всего отчета


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

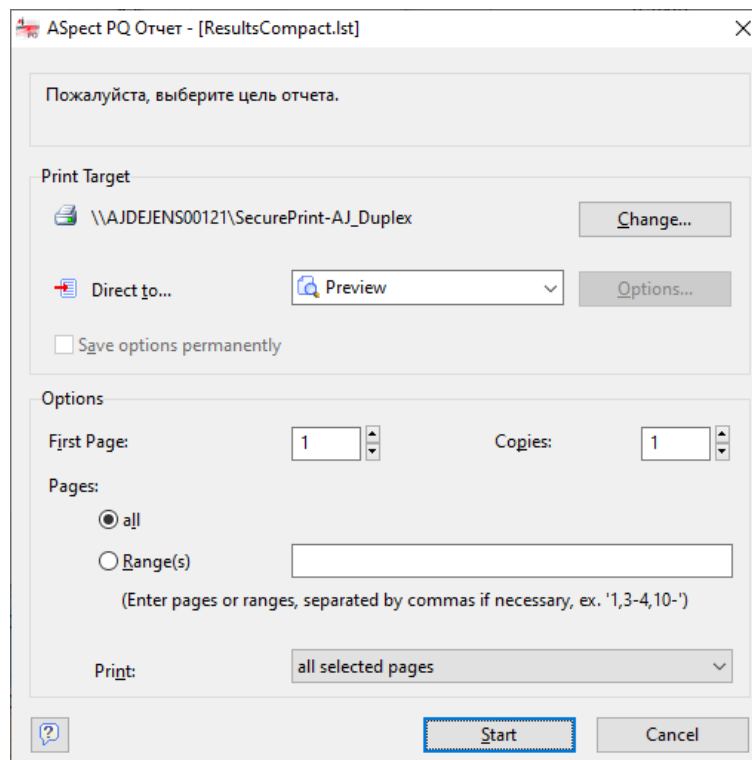
- ▶ Откройте окно **Данные | Отчеты**, щелкнув по значку .
- ▶ Или используйте для открытия окна пункты меню **Прочее | Данные** или **Файл | Печать | Отчет**.

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

Окно Данные | Отчеты с выбором данных результатов для печати



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



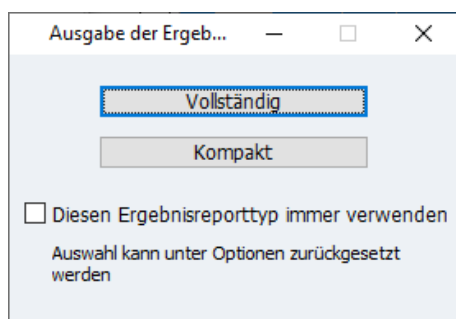
- ▶ При необходимости измените в открывшемся окне в списке **Direct to** формат вывода и с помощью кнопки **Опции** установите специальные параметры формата вывода.
- ▶ Запустите печать кнопкой **Start**.

**i** ПРИМЕЧАНИЕ! Используйте для вывода на печать настройку **Вывод на | Предварительный просмотр**. При нажатии кнопки **Start** печатаемые страницы сначала отображаются в окне предварительного просмотра. Так предварительно можно проверить, какие данные будут выводиться на печать: все нужные данные или также ненужные.

Печать текущих результатов

Отображаемые в главном окне результаты можно распечатать:


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

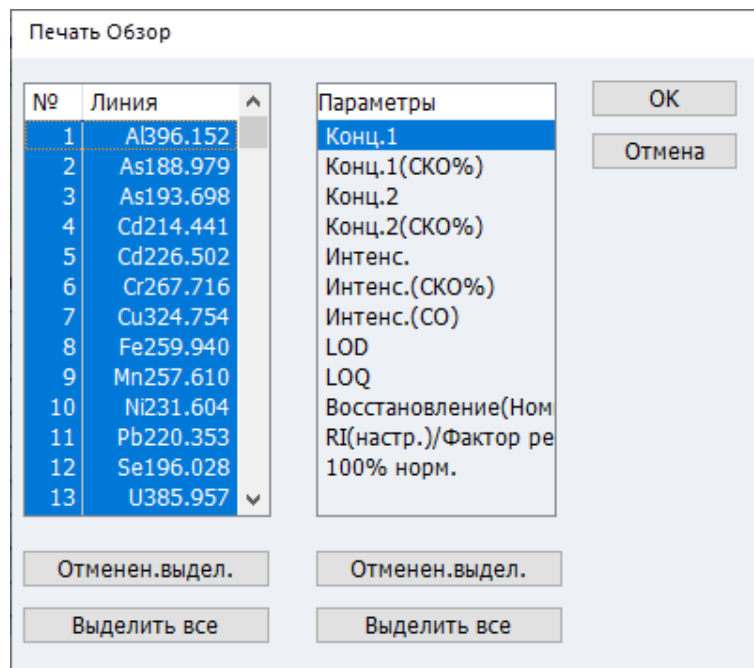


- ▶ Нажмите кнопку **Полный**, если нужно распечатать результаты с кривыми сигнала. Выберите **компактно** для печати результатов в виде компактного обзора.
- ▶ Продолжайте, как описано выше в разделе "Печать полного отчета".

**i** ПРИМЕЧАНИЕ! Если в окне **Формат отчета с результатами** установить флажок в поле **Всегда исп-ть этот тип отчета с результатами** и после этого нажать кнопку **Полный** или **компактно**, при следующей печати результатов это окно больше не будет показываться, будет автоматически использоваться последний тип отчета о результатах. Снова сбросить эту настройку можно в окне **Опции | Вид**.

Печать выбранных файлов

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




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

#### См. также

- ▣ Возможности отображения [▶ 137]

## 10.1.2 Печать других параметров анализа и установок


Из соответствующего окна можно распечатать следующие параметры и настройки анализа:

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

### 10.1.3 Шаблоны отчетов

Использование режима разработки отчета

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

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

Краткое руководство по использованию разработчика отчета

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

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

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


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

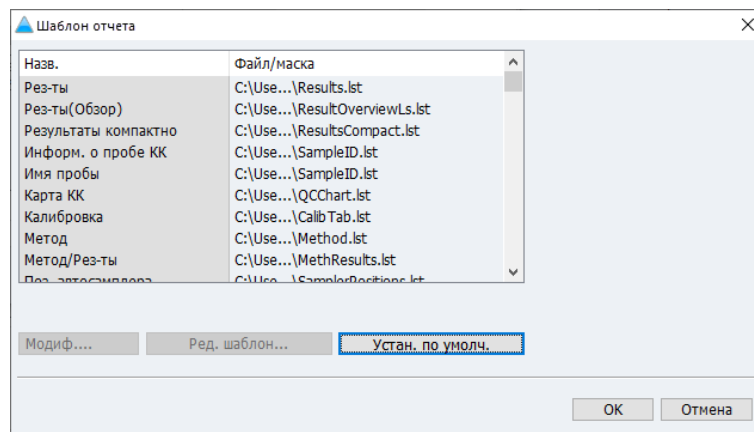
Чтобы отредактировать существующий объект, необходимо сначала выделить его. Для этого щелкните по объекту левой кнопкой мыши. Выбранный объект будет выделен рамкой. При создании нового объекта он будет автоматически выбран и можно будет непосредственно изменить его размер и положение. Двойным щелчком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

Дополнительная информация 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 ASpect PQ. Одному окну можно назначить несколько шаблонов с помощью файловой маски, из которой при запуске печати выбирается нужный шаблон.


- ▶ С помощью значка  откройте окно **Данные | Отчеты**.
- ▶ Нажмите кнопку **Шаблон отчета**.



Шаблон должен быть готов для следующих окон:

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

Изменение назначений

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

Редактирование шаблона отчета

- ▶ В окне **Шаблон отчета** выделите окно, шаблон отчета которого необходимо отредактировать.
- ▶ С помощью кнопки **Ред. шаблон** откройте окно **Разработчик отчета.**


Восстановление стандартных настроек

- ▶ Можно восстановить настройки, которые были заданы при установке программы.
- ▶ Нажмите кнопку **Устан. по умолч..**

## 10.2 Управление данными для всех типов данных в ASpect PQ

В ASpect PQ генерируются следующие данные:

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

Вышеприведенные типы данных собраны в окне **Данные | Управл. данными**. Окно открывается щелчком по значку  или при выборе команды меню **Прочее | Данные**.

### 10.2.1 Управление методами и последовательностями

Методы, последовательности и модели коррекции сохраняются в базе данных по отдельности. База данных методов получает обозначение "method.tps". База данных последовательностей получает обозначение sequ.tps. Методы и последовательности обозначаются в дальнейшем тексте настоящего раздела как «наборы 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	Статус
Example Multiline Ev	1	08.06.2020	15:10	INS	User	Разраб.
Mehrlinienauswertung	1	08.06.2020	13:39		User	Разраб.
Method_Ground	1	05.06.2020	17:15	INS	User	Разраб.
test	2	03.11.2020	9:15		Admin	Разраб.
TW Standardkit	1	08.06.2020	12:34		User	Разраб.
USP_232/233	2	10.03.2021	16:26		User1	Разраб.

Сорт. по:   Увеличение  Уменьшение

Только текущ. версия

Исполз. как рутинный метод

Сохр. данные калиб-ки

Описание:

Опция/отображение

Описание

Назв.

Ввод имени метода/последовательности или отображение выбранного метода/последовательности

Опция/отображение	Описание
<b>Кат.</b>	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 <b>Кат.</b> . Если нужно показать наборы данных всех категорий, удалите запись в поле <b>Кат.</b> .
Список наборов данных	Сохраненные методы/последовательности с именем, версией, датой, временем, категорией и пользователем
<b>Сорт. по</b>	Упорядочивание списка по различным признакам  В зависимости от выбранной опции, упорядочить список можно по возрастанию или по убыванию.
<b>Описание</b>	Ввод или просмотр дополнительных комментариев, например, по использованию наборов данных  Создавать предустановленные комментарии можно в окне <b>Данные   Описания по умолчанию</b> .
<b>Только текущ. версия</b>	При создании нескольких версий одного блока данных с одним и тем же именем отображается только блок данных с наибольшим номером версии.
<b>Предустан.методы</b>	Сохранение существующих калибровочных кривых в методе  Калибровочные кривые можно будет использовать для дальнейших анализов.


Наборы данных с одинаковым именем не перезаписываются в программе. Вместо этого создается еще одна версия, а номер версии увеличивается на 1.

Вы можете импортировать, экспортировать или удалять наборы данных отдельных методов или последовательностей из баз данных для методов или последовательностей.

#### Примечание

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

Открытие системы управления данными

- ▶ Откройте окно **Данные | Управл. данными**, щелкнув по значку .
- ▶ Выберите из списка **Тип** тип записи данных для обработки: **Метод** или **Последеть**.

Экспорт наборов данных

Экспорт позволяет предоставлять наборы данных другим устройствам/компьютерам. Вы можете одновременно экспортировать несколько наборов данных в общий файл. Обозначение файлов экспорта получают следующие расширения: Наборы данных метода – ".met", записи данных последовательности – ".seq".

- ▶ Кнопкой **Экспорт** откройте окно базы данных.
- ▶ Выберите необходимые наборы данных и нажмите кнопку **Экспорт**.
- ▶ В стандартном окне **Сохранить как** задайте имя файла и нажмите **Сохранить** для подтверждения.
  - ✓ При этом появится окно базы данных с экспортированными файлами.
- ▶ Для выхода из окна базы данных нажмите кнопку **Закреть**.

Импорт наборов данных

Импорт позволяет загружать в базу данных наборы данных с других устройств/компьютеров. Импортированный файл может содержать несколько наборов данных, из которых можно выбрать тот, который необходимо загрузить.

- ▶ Кнопкой **Импорт** откройте окно **Выберите файл метода для импорта** или **Выберите файл пос-ти для импорта'**) со стандартными функциями для открытия файлов.
  - ▶ Выберите файл для импорта.
    - ✓ Откроется окно базы данных, в котором представлены имя, дата создания и категория набора данных, содержащиеся в файле. В заголовке окна отображается имя импортируемого файла.
  - ▶ В окне базы данных выберите наборы данных для импорта и нажмите кнопку **Импорт**.  
Наборы данных будут импортированы в базу данных. Если набор данных с таким же именем уже существует, будет создана его новая версия. В окне базы данных появляются текущие версии имеющихся наборов данных.
  - ▶ Для выхода из окна базы данных нажмите кнопку **Закреть** и вернитесь в окно **Данные**.
- Удаление наборов данных
- Используя функцию удаления, можно удалить наборы данных из базы данных.
- ▶ Кнопкой **Удалить** откройте окно базы данных.
  - ▶ Выберите наборы данных, которые необходимо удалить.
  - ▶ Нажмите кнопку **Удалить**.
    - ✓ Окно базы данных обновится, и в нем будут отображены только оставшиеся наборы данных. Для одноименных наборов данных номер версии уменьшается на 1.
- Удаление наборов данных через меню Файл
- ▶ В качестве альтернативы вы можете открыть окно базы данных **Удал. метод** или **Удал. послед-ть** командой меню **Файл | Удалить | Метод** или **Файл | Удалить | Пос-ть**.
  - ▶ Затем действуйте, как описано выше.

## 10.2.2 Управление файлами результатов

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

- ▶ Откройте окно **Данные | Управл. данными** с помощью пункта меню **Прочее | Данные** или щелчком по значку .
  - ▶ Выберите из списка **Тип** опцию **Результаты**.
- Импорт данных результатов
- Данные результатов можно импортировать в программное обеспечение. В процессе импорта данные включаются в папку результатов в файловой структуре программного обеспечения.
- ▶ Нажмите кнопку **Импорт**.
    - ✓ Откроется окно **Выбрать файлы рез-тов**.
  - ▶ Выделите TPS-файлы и нажмите кнопку **Откр..**
  - ▶ Выберите подпапку для сохранения результатов и нажмите кнопку **ОК**.
    - ✓ TPS-файлы и соответствующие SPK-файлы (при наличии) будут скопированы выбранную в папку результатов.
- Экспорт данных результатов
- С помощью этой команды можно экспортировать одну или несколько баз данных, а также имеющиеся файлы со спектрами, в другую папку.
- ▶ Нажмите кнопку **Экспорт**.  
Откроется окно **Экспорт** с обзором имеющихся баз данных результатов.

- ▶ Щелчком мыши выделите базы данных результатов для копирования. Вы можете выбрать несколько баз данных, удерживая нажатой клавишу Ctrl или Shift.
- ▶ Щелчком по кнопке **Экспорт** откройте окно **Поиск папки**.
- ▶ Выберите целевую папку и нажмите кнопку **ОК**.
  - ✓ TPS-файлы и SPK-файлы копируются в папку назначения.

Удаление файлов результатов Вы можете удалить данные результатов навсегда.

- ▶ Нажмите кнопку **Удалить**.
- ▶ В окне **Удалить файлы рез-тов** щелчком мыши выберите базу данных для удаления.
- ▶ Нажмите кнопку **Удалить** и подтвердите запрос на удаление кнопкой **ОК**.
  - ✓ Данные будут окончательно удалены.

Поиск результатов отдельных проб Можно осуществлять поиск отдельных проб по известным именам проб в базах данных.

- ▶ В окне **Данные | Управл. данными** нажмите кнопку **Поиск для пробы**. Или выберите пункт меню **Прочее | Поиск пробы**.

Поиск для:

Проба: Mn I0

Искать в (вкл. субпапки): C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectPQ\ICP\RESULTS\

Поиск подстроки

Данные между: 23.03.2021 и: 23.03.2021

Искать рез-ты:


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

Откр. Старт Закрыть

- ▶ В поле ввода **Проба** введите имя пробы.
- ▶ Для поиска проб, у которых введенный ряд символов является частью имени, активируйте контрольное поле **Поиск подстроки**.
- ▶ Ограничьте момент измерения, установив флажок в поле **Данные между**.
- ▶ Запустите поиск, нажав кнопку **Старт**.
  - ✓ В таблице отобразятся все результаты, содержащие пробы с введенным обозначением.
- ▶ Чтобы открыть одну из показанных баз данных результатов, отметьте эту базу данных в списке и нажмите кнопку **Откр..**
  - ✓ Результаты отобразятся в главном окне.


### 10.2.3 Экспорт файлов линий/длин волн

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

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

### 10.2.4 Управление моделями коррекции

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

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

Импорт моделей коррекции

Команда позволяет импортировать модели коррекции в ASpect PQ.

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

Экспорт моделей коррекции

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

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

Удаление моделей коррекции

Эта команда позволяет удалять ненужные модели коррекции.

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



## ПРИМЕЧАНИЕ

**В результате удаления моделей коррекции методы могут стать непригодны для использования**


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

**См. также**

- 📖 Устранение спектральных помех – окно Ред. спектр | Спектр. коррекции [▶ 89]


### 10.2.5 Удаление корректирующих спектров

Ненужные корректирующие спектры можно удалить из базы данных.

- ▶ Откройте окно **Данные | Управл. данными**, щелкнув по значку .
- ▶ Выберите из списка **Тип** опцию **Корр. спектр** и нажмите кнопку **Удалить**.
- ▶ Выберите в окне базы данных **Корр. спектр** спектр для удаления и нажмите кнопку **Удалить**.
  - ✓ Проверяется, используется ли спектр в модели коррекции. Если нет, он удаляется.

### 10.2.6 Импорт шаблонов отчета

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


- ▶ Откройте окно **Данные | Управл. данными**, щелкнув по значку .
- ▶ Выберите из списка **Тип** опцию **Шаблон отчета** и нажмите кнопку **Импорт**.
- ▶ В окне **Откр.** выберите файл и нажмите кнопку **Откр..**  
Файлы отчета имеют расширение .lst.
  - ✓ Шаблон отчета импортируется в ASpect PQ. Теперь назначьте шаблон отчета содержимому печати.

**См. также**

- 📖 Шаблоны отчетов [▶ 125]

### 10.2.7 Управление избранными линиями

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

- ▶ Откройте окно **Данные | Управл. данными**, щелкнув по значку .
- ▶ Выберите из списка **Тип** опцию **Предпочтит..**

Импорт избранных линий

Команда позволяет импортировать избранную запись данных в ASpect PQ.

- ▶ Нажмите кнопку **Импорт**.
- ▶ В окне базы данных **Детали предпочтит.** нажмите кнопку **Импорт**.
- ▶ Выберите файл избранной линии, который необходимо импортировать, и нажмите кнопку **Откр..**


- ✓ После контрольного вопроса избранная запись данных будет добавлена в ваши избранные линии.
- Экспорт избранных линий
  - ▶ Нажмите кнопку **Экспорт**.
  - ▶ В окне базы данных **Детали предпочтит.** выделите нужную запись данных. Можно выбрать несколько элементов.
  - ▶ Нажмите кнопку **Экспорт**.
  - ▶ В окне **Файл назначения (новый или существующий)'** ) задайте имя и путь сохранения файла и нажмите кнопку **Сохранение**.  
В качестве конечного файла можно использовать и уже существующий файл. В этом случае запись данных будет интегрирована в этот файл.
  - ✓ Файл с записью данных избранных линий сохранен.
- Удаление избранных линий
  - Эта команда позволяет удалять ненужные избранные линии.
  - ▶ Нажмите кнопку **Удалить**.
  - ▶ В окне базы данных **Детали предпочтит.** выделите запись данных.
  - ▶ Нажмите кнопку **Удалить**.
  - ✓ Выделенная запись данных будет удалена из базы данных.

#### См. также

- 📖 Определение собственных избранных линий [▶ 32]

## 10.2.8 Импорт, экспорт и удаление рабочих листов

Импортировать, экспортировать и удалять рабочие листы можно в окне **Данные | Управл. данными**. Опционально в ходе экспорта можно указать сохраненные методы и последовательности. Рабочие листы имеют расширение .WST.

- ▶ Откройте окно **Данные | Управл. данными** при помощи команды меню **Прочее | Управл. данными** или щелчком по значку .
  - ▶ Выберите из списка **Тип** опцию **Таблица**.
- Экспорт рабочих листов
  - ▶ Нажмите кнопку **Экспорт**.
  - ▶ В окне **Экспортир. раб. табл.** выделите соответствующий рабочий лист. Чтобы экспортировать содержащиеся в рабочем листе методы и последовательности активируйте опцию **включая послед-ть и метод(ы)**.
  - ▶ Нажмите кнопку **Экспорт** и укажите папку и имя для файла экспорта.
  - ▶ Подтвердите введенные значения, нажав кнопку **Сохранение**.  
✓ Рабочий лист экспортируется с расширением .WST.
- Импорт рабочих листов
  - ▶ Нажмите кнопку **Импорт**.
  - ▶ В окне **Импортир. раб. табл.** выделите рабочий лист и нажмите кнопку **Импорт**. Чтобы также экспортировать содержащиеся в рабочем листе методы и последовательности, активируйте опцию **включая послед-ть и метод(ы)**.
  - ▶ Выберите в стандартном окне рабочий лист и нажмите кнопку **Открытие**.  
✓ Рабочий лист будет импортирован.
- Удаление рабочих листов
  - ▶ Нажмите **Удалить**.
  - ▶ В окне **Удалить** выделите рабочий лист и нажмите кнопку **Удалить**.

## 10.3 Сохранение результатов в формате ASCII/CSV

Автоматический непрерывный экспорт данных	Результаты измерения и анализа можно сохранить как автоматически, так и вручную в формате ASCII/CSV. Для обоих видов экспорта в окне <b>Опции   ASCII/CSV экспорт</b> настраиваются параметры десятичных разделителей и разделителей столбцов.
Экспорт данных вручную	<p>При активированной опции автоматического непрерывного экспорта данных каждая запись в таблице результатов сразу же переносится в заданный файл ASCII. Имя этого файла ASCII задается в окне <b>Опции   Послед. ASCII экспорт</b>.</p> <p>При экспорте данных вручную можно выбрать в таблице результатов строки, которые должны быть экспортированы.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▶ Выделите пробы в списке результатов. Удерживая нажатой клавишу Ctrl или Shift, щелчком по строке пробы выберите пробы. Выделить все строки проб можно с помощью команды меню <b>Ред.   Выдел. все Ctrl+A</b>.</li> <li>▶ С помощью пункта меню <b>Ред.   Сохр. выделение</b> откройте стандартное окно <b>Сохранить как</b>. Или правой кнопкой мыши щелкните по выделенным строкам и в контекстном меню выберите соответствующий пункт меню.</li> <li>▶ Введите имя файла и подтвердите его, нажав кнопку <b>ОК</b>. Данные сохраняются в формате, доступном для программ для работы с электронными таблицами, с расширением .csv.</li> </ul>

### См. также

- 📖 Опции экспорта [▶ 139]
- 📖 Опции для непрерывного экспорта в формате ASCII [▶ 139]

## 10.4 Установка единиц измерения

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

- ▶ Откройте окно **Данные | Единицы**, щелкнув по значку .

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

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


Опция	Описание
	<b>жидк. грав.</b> Единица измерения для отвешиваемой жидкой пробы, например, масло

Кнопки управления отдельными записями.

Экранная кнопка	Описание
<b>Добавить</b>	Вставить новую строку в конец списка
<b>Вставка</b>	Вставить новую строку в позицию над текущей выделенной строкой
<b>Удалить</b>	Только пользовательские единицы измерения, предпочтительные варианты удалить нельзя
<b>Сохранить</b>	Сохранение изменений и введенных значений

## 10.5 Управление базами данных для исходных растворов и проб КК

Управление базами данных с часто используемыми маточными стандартными растворами и пробами КК осуществляется в окне **Данные | Исходн. std./Пробы КК**. Можно добавлять записи в базу данных, удалять их или редактировать. Стандартные маточные растворы и контрольные пробы доступны в разработке метода.

- ▶ Откройте окно **Данные | Исходн. std./Пробы КК**, щелкнув по значку .
- ▶ Выберите опцию **Исходн. стандарт** или **Пробы КК**.
- ▶ Введите или отредактируйте параметры стандартов в таблице:

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

Кнопки управления записями:


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

## 10.6 Создание предварительно заданных комментариев


Для следующих действий можно предварительно задать пользовательские комментарии:

- Сохранение метода

- Сохранение последовательности
- Запуск нового расчета
- Запустите измерение

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

Создание комментария

- ▶ Откройте окно **Данные | Описания по умолчанию**, щелкнув по значку .
- ▶ Выберите действие из списка **Выбр. категорию** .
- ▶ Щелчком по кнопке **Ред. шаблон** откройте список комментариев.
- ▶ Создайте новый комментарий, нажав кнопку **Новый**. В поле **Имя** введите обозначение, с помощью которого можно выбрать комментарий. В поле **Текст** введите текст комментария.
- ▶ Можно отредактировать комментарий с помощью кнопки **Модиф.** или удалить его из раскрывающегося списка кнопкой **Удалить**.

## 10.7 Использование буфера обмена Windows

Копирование результатов в буфер обмена

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

Соответствующие команды доступны в меню **Ред.**:

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

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

Копирование графиков в виде снимка экрана

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

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

## 11 Настройка программы ASpect PQ

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

- Возможности отображения
- Места сохранения файлов
- Параметры для экспорта данных
- Общие настройки процесса анализа, калибровки и коррекции бланка

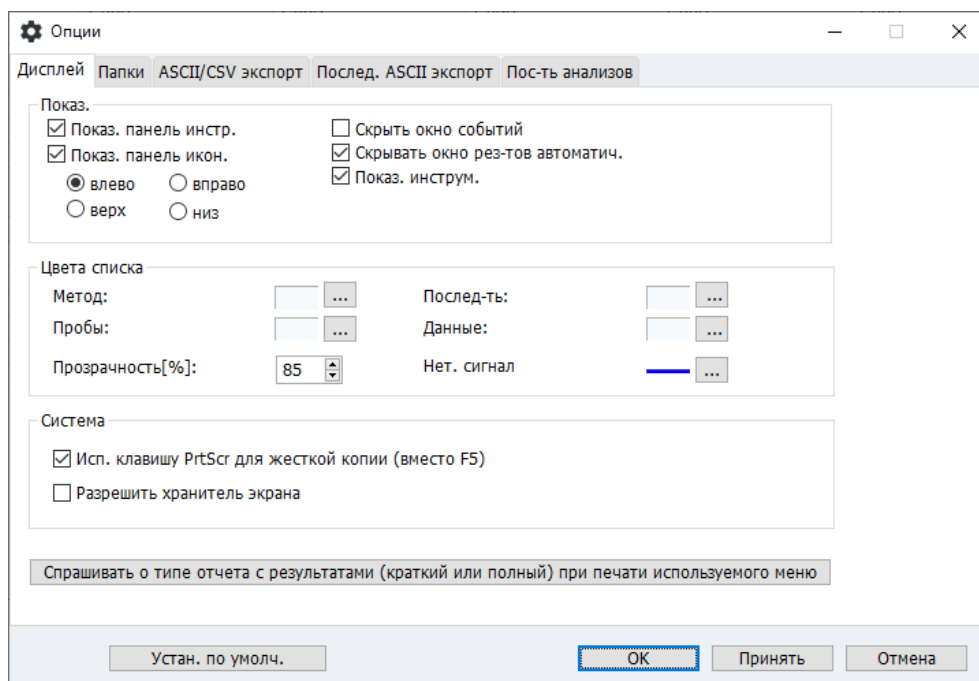
Выполненные настройки сохраняются после выхода из программы ASpect PQ и ее перезапуска. Кнопка **Устан. по умолч.** сбрасывает все параметры на значения по умолчанию.

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

### 11.1 Возможности отображения

В окне **Опции | Дисплей** задаются функции, видимые на рабочем столе. Снимок экрана

Окно Опции | Дисплей



Опция	Описание
<b>Показ. панель инстр.</b>	Отображение панели инструментов с кнопками для процедуры измерения
<b>Показ. панель икон.</b>	Отображение панели инструментов с крупными кнопками для быстрого доступа и выбор положения панели инструментов Положение панели инструментов также можно изменить, перетащив панель мышью, при этом настройка не будет сохранена до следующего запуска.
<b>Скрыть окно событий</b>	Не отображать окна событий (например, <b>Время задержки</b> ) Вместо этого сообщения отображаются в строке состояния главного окна.

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

Папка	Описание
Программа	Путь установки исполняемых программных файлов
Рабочая папка	Каталог пользовательских данных Рабочая папка содержит дополнительные вложенные папки. Она задается во время установки или дополнительной функцией управления пользователями.
Временн. данные	Каталог данных, временно созданный программой
Инф. о пробе	Предустановленный путь для открытия и сохранения файлов с информацией о пробах Этот путь может быть изменен. Для выбора новой папки щелкните по значку <b>...</b> . При открытии и сохранении информации о пробе можно выбрать другой путь.
Экспорт/Импорт	Путь по умолчанию для импорта и экспорта данных метода и последовательностей и экспорт данных результатов в виде CSV-файлов Этот путь может быть изменен. Для выбора новой папки щелкните по значку <b>...</b> . При экспорте и импорте также можно выбрать другой путь.
Рез-ты	Каталог для файлов результатов Этот каталог по умолчанию может содержать дополнительные подпапки для сохранения результатов. Эти папки доступны для сохранения результатов при запуске измерений.

Папка	Описание
Прикладные данные	Каталог, в который ASpect PQ сохраняет необходимые данные

## 11.3 Опции экспорта

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

Настройки

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

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

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

См. также

 Сохранение результатов в формате ASCII/CSV [▶ 134]


## 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**.

Экспорт данных результатов

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

Опция	Описание
"Имя метода".csv	Имя файла соответствует обозначению метода. Расширение файла - ".csv". Файл сохраняется по заданному по умолчанию пути Экспорт/Импорт (окно <b>Опции   Папка</b> ).
"Имя файла рез-тов".csv	Имя файла соответствует обозначению файла результатов. Файл имеет расширение .csv. Файл сохраняется по заданному по умолчанию пути Экспорт/Импорт (окно <b>Опции   Папка</b> ).
другое	Имя файла и путь к нему можно задать произвольным образом. При нажатии кнопки  открывается стандартное окно <b>Сохранение как</b> , в котором можно задать путь сохранения и имя файла.

Опция	Описание
	Данные будут постоянно записываться в этот файл, пока не будет задано новое имя или не будет выбрана другая опция для наименования.
<b>Создать отдельный файл для каждой пробы (число строк рез-тов и имя пробы будут добавлены к имени файла)</b>	Номер строки списка результатов и обозначение пробы добавляются к имени файла. Недопустимые символы заменяются символами подчеркивания (например, метод тестирования-001 QC 1 mg_L.csv).

Экспорт спектров

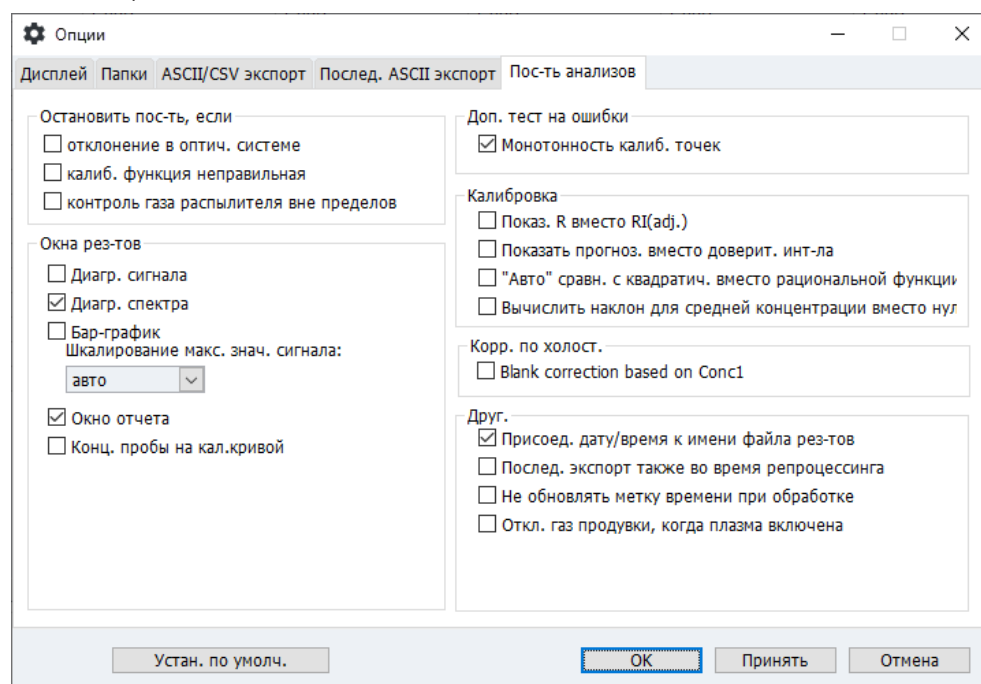
Для экспорта спектров активируйте опцию **Послед. экспорт спектра (CSV)** и выберите путь сохранения.

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

## 11.5 Опции для процесса анализа

В окне **Опции | Пос-ть анализов** задаются общие настройки для процесса анализа. Снимок экрана

Окно Опции | Пос-ть анализов



Отмена последовательности после следующих ошибок

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

Опция	Описание
<b>отклонение в оптической системе</b>	Останавливается при ошибочной настройке длины (Ne-коррекция)
<b>калиб. функция неправильная</b>	Останавливается, если вычислить калибровочную функцию не удалось
<b>контроль газа распылителя вне пределов</b>	Останавливается при превышении контрольного значения распылителя

	Опция	Описание
		Во время калибровки определяется контрольное значение потока газа распылителя. Если в ходе последующего анализа контрольное значение изменяется, это является признаком засорения распылителя.
Дополнительная проверка ошибок	Опция	Описание
	<b>Монотонность калиб. точек</b>	Выполняется проверка монотонности точек калибровки. Тест на монотонность позволяет определить, приводят ли более высокие стандартные концентрации к более высоким значениям измерения.
Отображение результатов	Опция	Описание
	<b>Диагр. сигнал.</b>	Во время процесса анализа появляется окно с отображением зависящей от времени кривой сигнала измерения.
	<b>Диагр. спектра</b>	Во время процесса анализа появляется окно с отображением записанной спектральной области.
	<b>Бар-график</b>	Показывает измеренные интенсивности в виде столбчатой диаграммы
	<b>Шкалирование макс. знач. сигнала</b>	Задаёт максимальное значение по оси значений измерения для отображения кривой сигнала <b>авто:</b> Автоматическое масштабирование осей. Этот параметр можно также установить с помощью функции меню <b>Вид   Шкала.</b>
	<b>Окно отчета</b>	Во время процесса анализа отображается окно с данными о состоянии плазмы.
	<b>Конц. пробы на кал.кривой</b>	Отображает окно <b>Конц. пробы на кал.кривой</b> с текущей кривой калибровки и, если она уже измерена, кривой рекалибровки. После измерения пробы вычисление неправильной концентрации по данным эмиссии указывается дополнительными красными линиями. При дополнительной калибровке отображается пересчитанная калибровочная кривая.
Прочее	Опция	Описание
	<b>Присоед. дату/ время к имени файла рез-тов</b>	Текущее время ПК при запуске измерения автоматически добавляется к имени файла результата.
	<b>Послед. экспорт также во время репроцессинга</b>	После пересчета результаты экспортируются автоматически.
	<b>Не обновлять метку времени при обработке</b>	После повторного вычисления результатов сохраняется исходное время измерения.
	<b>Откл. газ продувки, когда плазма включена</b>	В целях экономии при гашении плазмы продувочный газ отключается.

#### См. также

📖 Калибровка [▶ 94]

📖 Ввод параметров калибровки (окно Метод | Калибровка) [▶ 41]

## 11.6 Общие настройки калибровки и коррекции бланка

Калибровка

В окне **Опции | Пос-ть анализ** задаются общие настройки калибровки и выбирается метод коррекции бланка.

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

Опция	Описание
<b>Correlation coefficient</b>	Выбор коэффициента для оценки степени соответствия калибровочной кривой <b>R:</b> Коэффициент корреляции <b>RI !:</b> Коэффициент определения <b>RI(настр.):</b> скорректированный коэффициент детерминации
<b>Показать прогноз. вместо доверит. инт-ла</b>	Если активировано, отображается прогнозируемый диапазон для калибровки. Доверительный диапазон установлен в стандартных настройках.
<b>"Авто" сравн. с квадратич. вместо рациональной функции</b>	«авто» обозначает автоматический выбор калибровочной функции. Если активировано, для сравнения используется квадратичная функция. По умолчанию здесь установлена дробно-рациональная функция.
<b>Вычислить наклон для средней концентрации вместо нуля</b>	Если активировано, наклон калибровочной кривой рассчитывается по средней концентрации диапазона калибровки. В стандартных настройках увеличение рассчитывается для концентрации 0.



Коррекция бланка

### ПРИМЕЧАНИЕ

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

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

С помощью метода расчета на основе конц2 сначала рассчитывается исходная концентрация бланка (конц2<sub>В</sub>) на основе идентификаторов проб бланка. При вычислении конц.2 пробы учитывается значение Conc2<sub>В</sub>

В методе расчета на основе конц.1, для расчета концентрации пробы используется концентрации бланка, вычисленная непосредственно из пробы (Conc1<sub>Blank</sub>). Этот метод можно использовать, если данные ID проб, например, разбавлений, не оказывают сильного влияния на концентрацию растворов бланка, и, следовательно, данные идентификатора пробы для бланка не вводятся.

Пример расчета для жидкой исходной пробы с предварительным разбавлением:

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

Conc1 <sub>Sample</sub>	Концентрация пробы без учета данных идентификатора пробы
Conc2 <sub>Sample</sub>	Исходная концентрация пробы
Conc1 <sub>Blank</sub>	Концентрация бланка без учета данных идентификатора пробы
Conc2 <sub>Blank</sub>	Исходное значение бланка
DF <sub>Sample</sub>	Фактор разбавления пробы

Предел детектирования и предел количественного определения

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

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. Используемые коэффициенты и количество повторных измерений выводятся в окне **Калибровка** и в отчетах печати калибровки и измерений результата/бланка.

Для редактирования коэффициентов и повторных измерений выберите **LOD и КФ**. Предусмотрены следующие стандартные настройки:

Параметр	Значение
Фактор LOD	3
ФакторLOQ	9
Повторы	11

## 12 Настройка обмена данными с внешней системой управления заданиями

Результаты измерений в формате ASCII/CSV ASpect PQ можно экспортировать в систему управления лабораторной информацией (LIMS) или в другую внешнюю программу через интерфейс данных.

Вы также можете импортировать данные с информацией о пробах (ID проб) в формате ASCII/CSV из внешних программ, таких как LIMS или приложений Microsoft Office.

### 12.1 Экспорт результатов измерений

Настройка параметров экспорта

Экспортировать результаты измерений для дальнейшей обработки в других приложениях, например, в LIMS, можно как автоматически, так и вручную в текстовых форматах ASCII/CSV.

- ▶ Откройте окно **Опции** с помощью пункта меню **Прочее | Опции**.
- ▶ В вкладке **Папка в Экспорт/Импорт** задайте путь сохранения для экспорта данных результатов.
- ▶ Во вкладке **ASCII/CSV экспорт** задайте разделители:
  - **Десятичн. разделитель**: выбрать разделитель десятичных разрядов.
  - **Разделитель списка**: выбрать символ, с помощью которого разделяются элементы списка.
- ▶ Определите поля для экспорта результатов:
  - **все**: экспортировать все столбцы списка результатов, включая все вложенные вкладки.
  - **только выдел. поля**: щелчок по значку **...** открывает список, в котором можно выбрать столбцы для экспорта.
- ▶ Примените настройки экспорта, нажав кнопку **Принять**.
  - ✓ Вы задали параметры экспорта. Настройки действительны для автоматического и ручного экспорта.

Настройка автоматического экспорта

Настройте автоматический экспорт данных результатов в процессе анализа. Программа обновляет файл экспорта сразу после вывода новой строки в окне процесса и результатов. При этом новые данные добавляются к существующему файлу экспорта.

- ▶ В окне **Опции** перейдите во вкладку **Послед. ASCII экспорт**.
- ▶ Активируйте флажок в поле **Послед. ASCII экспорт данных результатов**.
- ▶ Задайте имя файла экспорта:
  - **"Имя метода".csv**: Имя файла соответствует имени метода, расширение файла .csv.
  - **"Имя файла рез-тов".csv**: Имя файла соответствует имени файла результатов, расширение файла .csv.
  - **другое**: щелчком по кнопке **...** откройте стандартное окно **Сохранить как**. Задайте путь сохранения и имя файла.
- ✓ Программа записывает данные в файл непрерывно, пока Вы не присвоите ему новое имя или не выберете другой вариант идентификации файла.

- ▶ Установите флажок в поле **Создать отдельн файл для каждой пробы (число строк рез-тов и имя пробы будут добавлены к имени файла)**, если Вы хотите создать файл для каждой пробы.
  - ✓ Программа добавляет к имени файла номер строки списка результатов и имя пробы. Недопустимые символы заменяются символами подчеркивания (например, метод тестирования-001 QC 1 mg\_L.csv).
- ▶ Установите флажок в поле **Послед. экспорт спектра (CSV)**, если Вы планируете также автоматически экспортировать спектры. Выберите в разделе **Путь экспорта** путь хранения.
- ▶ Примените настройки экспорта, нажав кнопку **Принять**.
- ▶ Перейдите во вкладку **Пос-ть анализов**.
- ▶ Установите флажок в поле **Послед. экспорт также во время репроцессинга**, если Вы планируете автоматически экспортировать результаты даже после пересчета.
- ▶ Закройте окно, нажав кнопку **ОК**.
  - ✓ Вы настроили автоматический экспорт данных.

Экспорт результатов вручную

Экспортировать результаты измерений можно также вручную.

- ▶ В главном окне перейдите во вкладку **Результаты**.
- ▶ Выделите пробы в списке результатов. Удерживая нажатой клавишу Ctrl или Shift, выберите данные для экспорта, щелкнув по соответствующей строке пробы. Выделить все строки проб можно с помощью пункта меню **Ред. | Выдел.всеCtrl+A**.
- ▶ Выберите пункт меню **Ред. | Сохр. выделение**.
- ▶ В стандартном окне **Сохр. как** введите имя файла. Для подтверждения введенных данных нажмите **ОК**.
  - ✓ Программа экспортирует результаты в формате ASCII/CSV с расширением файла .csv.
- ▶ При выборе пункта меню **Ред. | Копир. только видим. столб.Ctrl+C** или **Копир. все столб.** программа скопирует данные в буфер обмена. Вы можете перенести данные в открытый файл Excel с помощью сочетания клавиш Ctrl+V.

Формат данных

Программа разделяет записи в текстовом файле, используя указанный разделитель элементов списка. Каждая строка заканчивается символом конца строки (CR/LF).

- Файл экспорта начинается с основных данных, содержащих информацию об устройстве, версии используемого программного обеспечения, а также дату и время создания файла.
- Дата форматируется в соответствии с настройками панели управления Windows. При этом используется формат даты (короткий).
- Далее следует пустая строка, а затем список полей для экспорта.
- Основные данные генерируются только один раз. За основными данными следуют измеренные значения.

Пример файла экспорта:

```
Instrument: PQ 9200 #10587200262BB0101 Tech: ICP-OES
SW-Version: ASpect PQ 1.3.2.2007 Created: 29.10.2024 14:04

Nr.;Name;Linie;Typ;Einheit;Konz.1;SD1;RSD%;VB;VF;Einheit;
Konz.2;SD2;RSD%;VB;100%
norm.;QC;QC;QC;Bem.;Ints.;SD(Ints.);RSD%;Datum;Zeit;
Norm.Ints.;SD;RSD%;Masse;Einh.;Feuchte[%];RHF[%];Einw.[mg];
Fehler;Pos;Vor-VF;Einw.[g];Vol.[mL];Ges.einw.
[[g];Name(2);AS-VF;BW-
Korr.;Faktor;Einzelwerte(Ints.);;Untergrund(Ints.);
1;Sample1;Co237.863;0;µg/L;1968;47.49;
2.41;215.9;1;mg/L;1.968;0.0475; 2.41;0.2159;;;;;>
KAL;257059;6194; 2.41;29.10.2024;14:04;;;;;;101;
1.000;;;;; 1;aus;
0.00;256411;251214;263551;20389;9786;27849;
2;Sample1;Ni231.604;0;µg/L;1537;62.95;
4.10;93.89;1;mg/L;1.537;0.0630;
4.10;0.0939;;;;;254729;10328;
4.05;29.10.2024;14:04;;;;;;101; 1.000;;;;; 1;aus;
0.00;246002;252054;266131;4598;16546;33369;
3;Sample2;Co237.863;0;µg/L;2289;17.01;
0.74;254.0;1;mg/L;2.289;0.0170; 0.74;0.2540;;;;;>
KAL;298914;2219; 0.74;29.10.2024;14:04;;;;;;102;
1.000;;;;; 1;aus;
0.00;300902;299321;296520;27198;27379;28180;
4;Sample2;Ni231.604;0;µg/L;1755;20.57;
1.17;108.4;1;mg/L;1.755;0.0206; 1.17;0.1084;;;;;>
KAL;290377;3374; 1.16;29.10.2024;14:04;;;;;;102;
1.000;;;;; 1;aus;
0.00;294115;287557;289459;26485;9243;18241;
```

Изобр. 1 Экспорт CSV

## 12.2 Импорт файлов с информацией о пробах

Вы можете создавать файлы с информацией о пробах (ID проб) в формате ASCII/CSV с помощью программы LIMS или приложений Microsoft Office и импортировать их вручную.


Для успешного импорта убедитесь, что отдельные строки файла с информацией о пробах завершаются символами конца строки (CR/LF).

Пример правильного файла с информацией о пробах:

```
Sample1;101;1.000000;mg/L;0.001;0;;100.000000;ID154-21;
1.000000;0;-1.000000;0.000000;allie
Sample2;102;1.000000;mg/kg(liq);0.001;2;5.6;100.000000;
ID154-22;5.000000;0;-1.000000;0.000000;Co
```

Изобр. 2 Импорт CSV

Импорт ID проб вручную

- ▶ Открыть ID пробы можно одним из следующих способов:
  - На панели инструментов щелкните по значку  рядом с полем **Пробы**.
  - Выберите пункт меню **Файл | Открыть файл инф. о пробе**.
  - В окне **Имя пробы** нажмите кнопку **Откр..**
- ▶ В стандартном окне **Открыть** выберите файл.
  - ✓ ID пробы отобразится в окне **Имя пробы**, и его можно будет использовать для последующего анализа.

## 12.3 Поля экспорта результатов

Имя поля	Описание	Тип данных
№	Номер в список последовательностей	Целое число

Имя поля	Описание	Тип данных
Назв.	Наименование пробы, стандартного раствора или пробы КК/ стандартного раствора КК	Последовательность символов, макс. 20 символов
Линия	Элементная линия	Последовательность символов, макс. 10 символов
Тип	Аналит или внутренний стандарт 0 = аналит IS1 ... x = внутренний стандарт	Целое число
Един.1	Единица концентрации 1 (концентрация анализируемой пробы)	Последовательность символов, макс. 10 символов
Конц.1	Концентрация аналита в пробе/в стандартном растворе	Десятичное число
CO1	Стандартное отклонение конц. 1 (статистика среднего значения)	Десятичное число
СКО%	Относительное стандартное отклонение конц. 1 (статистика среднего значения)	Десятичное число
Cf	Доверительный интервал конц. 1	Десятичное число
ФР	Коэффициент разбавления при автоматическом разбавлении пробы (учитывается при расчете конц.)	Десятичное число
Един.2	Единица концентрации 2 (концентрация исходной пробы)	Последовательность символов, макс. 10 символов
Конц.2	Концентрация исходной пробы	Десятичное число
CO2	Стандартное отклонение конц. 2 (статистика среднего значения)	Десятичное число
СКО%	Относительное стандартное отклонение конц. 2 (статистика среднего значения)	Десятичное число
Cf	Доверительный интервал конц. 2	Десятичное число
100% норм.	Стандартизированная конц. на основе процентного содержания 2	Десятичное число
КК	Информация о контроле качества и калибровке	Последовательность символов, макс. 30 символов
КК	Информация о контроле качества и калибровке	Последовательность символов, макс. 30 символов
КК	Информация о контроле качества и калибровке	Последовательность символов, макс. 30 символов
Рем.	Комментарии	Последовательность символов, макс. 40 символов
Интенс.	Среднее значение измеренных отдельных интенсивностей	Десятичное число
CO (Интенс.)	Стандартное отклонение (статистика среднего значения)	Десятичное число
СКО%	Относительное стандартное отклонение (статистика среднего значения)	Десятичное число

Имя поля	Описание	Тип данных
Дата	Дата измерения	Настройка Windows для короткого формата даты, например 30.01.2024
Время	Время измерения	чч:мм, например, 14:29
Норм. инт-ть.	(не используется в ASpect PQ)	/
CO	(не используется в ASpect PQ)	/
СКО%	(не используется в ASpect PQ)	/
Масса	(не используется в ASpect PQ)	/
Един.	(не используется в ASpect PQ)	/
Влажн. [%]	(не используется в ASpect PQ)	/
RHF [%]	(не используется в ASpect PQ)	/
Wt. [мг]	(не используется в ASpect PQ)	/
Ошибка	Сообщение об ошибке, если во время измерения произошла ошибка	Последовательность символов
Поз.	Позиция пробы в дозаторе	Целое число
Фактор предразб.	Фактор предварительного разбавления Коэффициент, обозначающий разбавление исходной пробы перед ее помещением в автосамплер или ее подачей к плазме при работе без автосамплера. Коэффициент необходим для расчета концентрации исходной пробы ( <b>Конц. 2</b> ).	Десятичное число
Wt. [мг]	Навеска в миллиграммах. Навеска исходной пробы, которая была растворена при подготовке пробы (используется для расчета конц. 2)	Десятичное число
Объем [мл]	Объем растворителя, в котором была растворена соответствующая навеска в мл (используется для расчета конц. 2)	Целое число
Общая масса. [г]	Общая навеска пробы и растворителя в граммах	Десятичное число
Назв.(2)	Дополнительное наименование пробы	Последовательность символов, макс. 20 символов
Разб.АС	Коэффициент разбавления автосамплера или системы разбавления	Десятичное число
Холост корр.	Коррекция бланка <b>выкл.</b> Коррекция бланка не проводится. <b>вкл.</b> Для расчета концентрации исходной пробы вычитается последнее измеренное в последовательности значение бланка.	0   1
Фактор	(не используется в ASpect PQ)	/

Имя поля	Описание	Тип данных
Единиичн. знач.(Интенс.)	Отдельные значения измерений интенсивности	Последовательность символов десятичных разрядов, разделенных пробелами, не более 1000 символов
Фон(Интенс.)	Интенсивность фона на элементной линии	Последовательность символов десятичных разрядов, разделенных пробелами, не более 1000 символов

## 12.4 Поля файлов с информацией о пробах

Имя поля	Описание	Тип данных
Поз.	Позиция пробы в дозаторе	Целое число
Назв.	Наименование пробы, стандартного раствора или пробы КК/ стандартного раствора КК	Последовательность символов, макс. 20 символов
Фактор предразб.	Фактор предварительного разбавления Коэффициент, обозначающий разбавление исходной пробы перед ее помещением в автосамплер или ее подачей к плазме при работе без автосамплера. Коэффициент необходим для расчета концентрации исходной пробы (Конц. 2).	Десятичное число
Един.	Единица измерения концентрации пробы	Последовательность символов, макс. 10 символов
Фактор	Коэффициент единицы измерения  Коэффициент 1 соответствует 1 мкг/л или мкг/кг, коэффициент 1000 соответствует 1 нг/л или нг/кг	Последовательность символов, макс. 10 символов
Тип	Тип единицы измерения 0 = жидкость 1 = твердое вещество 2 = жидкость гравиметрическая	Целое число
Wt. [мг]	Навеска в миллиграммах. Навеска исходной пробы, которая была растворена при подготовке пробы (используется для расчета конц. 2)	Десятичное число
Объем [мл]	Объем растворителя, в котором была растворена соответствующая навеска в мл (используется для расчета конц. 2)	Целое число
Общая масса. [г]	Общая навеска пробы и растворителя в граммах	Десятичное число
Назв.(2)	Дополнительное наименование пробы	Последовательность символов, макс. 20 символов

Имя поля	Описание	Тип данных
Разб.АС	Коэффициент разбавления авто-сAMPLера или системы разбавления	Десятичное число
Холост корр.	Коррекция бланка <b>выкл.</b> Коррекция бланка не проводится. <b>вкл.</b> Для расчета концентрации исходной пробы вычитается последнее измеренное в последовательности значение бланка.	0   1
Тип пробы	Проба и бланк 0 = проба 1 = реактив - бланк	Целое число
Элементы	Анализируемые в пробе элементы или линии  все = все элементы метода  Символы элементов, разделенные запятыми, например, Fe, Co, Ni	Последовательность символов, макс. 10 символов

## 13 Дополнительный модуль соответствия FDA 21 CFR Part 11

Дополнительный модуль соответствия FDA 21 CFR Part 11 для ASpect PQ 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

Система управления пользователями по умолчанию включает 6 уровней доступа. Эти уровни можно свободно настраивать и дополнять дополнительными уровнями.

При установленной настроенной системе управления пользователями активируется пункт меню **Система** в ASpect PQ, который обеспечивает доступ к функциям системы управления пользователями.

Любые изменения пользовательских данных после закрытия соответствующего окна будут постоянно сохраняться в закодированной базе данных.

### 13.1 Управление пользователями

#### 13.1.1 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.

- ▶ В ASpect PQ откройте пункт меню **Система | User Management**.
- ▶ Кроме того, Вы можете открыть систему управления пользователями не в ASpect PQ, используя меню Windows **ASpect PQ | User Management**.
- ▶ Введите учетные данные пользователя с правами управления пользователями.
  - ✓ 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.

Подробная информация о профиле пользователя

Для пользователя, выбранного в списке, отображаются следующие данные:

Опция	Описание
User ID	Логин пользователя
User level	Назначенный уровень доступа с правами пользователя
Full name	Полное имя пользователя
E-signature	<b>Yes:</b> пользователь авторизован для электронной подписи данных результатов. <b>No:</b> пользователь не авторизован для электронной подписи.
Status	<b>Active:</b> логин можно использовать (зеленый круг).

Опция	Описание
	<b>Disabled:</b> логин деактивирован и не может быть использован (красный круг).
<b>Passwd. protect.</b>	<b>Active:</b> для входа в систему требуется пароль. <b>Not active:</b> вход в систему возможен без пароля. Щелчок по значку замка открывает окно <b>Modify user data</b> . Когда замок закрыт, активна защита паролем.
<b>Valid until:</b>	<b>Indefinitely:</b> неограниченный срок действия пароля. <b>Date/days:</b> пользователь должен сменить пароль по истечении указанного периода времени. Этот параметр не отображается при входе в систему через Active Directory.
Экранная кнопка	Описание
<b>New ...</b>	Создание нового пользователя Откроется окно <b>Add user data</b> .
<b>Modify ...</b>	Изменить данные пользователя для отмеченных строк таблицы Для выбранного пользователя откроется окно <b>Modify user data</b> . Окно можно также открыть двойным щелчком кнопкой мыши по пользователю.
<b>Active users only</b>	Показывать только активных пользователей
<b>Audit trail</b>	Открытие журнала событий
<b>Permissions</b>	Назначение прав доступа пользователям в программном обеспечении
<b>Exit</b>	Завершение работы программы

Экранные кнопки

### 13.1.2 Настройка уровней пользователей

Начиная с версии модуля соответствия FDA 21 CFR Part 11 2.0 система управления пользователями имеет новый функционал для настройки уровней пользователей. Если в предыдущих версиях программного обеспечения доступные разрешения уровней пользователей были определены, то теперь Вы можете свободно настраивать уровни пользователей. В списке программных функций активируйте или деактивируйте функции, которые должны быть доступны на уровне пользователя.

Количество доступных уровней пользователей

Система управления пользователями по умолчанию включает 6 уровней доступа. Эти уровни можно свободно настраивать и дополнять дополнительными уровнями.

- **Уровень администратора (уровень 0)**  
Администратор обладает полными правами на управление пользователями и может настраивать управление пользователями, права на уровне пользователей, а также создавать или блокировать пользователей. По умолчанию администратор не имеет разрешения на ASpect PQ и не может войти в программу.
- **Уровень 1**  
Пользователи этого уровня обладают всеми разрешениями для ASpect PQ для разработки методов и процедур и могут настраивать программное обеспечение.
- **Уровень 2 – 4**  
пользователи этого уровня имеют многоуровневые разрешения для выполнения операций анализа, при этом применяется следующее: уровень 2 > уровень 3 > уровень 4. У них нет прав на настройку ASpect PQ.

- Уровень пользователя 5  
Пользователи на этом уровне имеют разрешения на вход в систему администрирования пользователей и ASpect PQ с минимальными полномочиями, например, для целей аудита.

По желанию можно создать до 4 дополнительных уровня (от 6 до 9) для специальных конфигураций.

Настройка уровней пользователей

- ▶ В окне **User Management** выберите **Permissions**.
  - ✓ Откроется окно **Change user permissions**.
- ▶ В матрице Полномочия/уровни Вы можете активировать функцию на уровне, установив соответствующий флажок.  
Щелкнув правой кнопкой мыши по флажку, можно использовать контекстное меню, чтобы выбрать или снять все флажки на этом уровне или применить полномочия другого уровня.
- ▶ Если Вы хотите добавить в матрицу дополнительные уровни, нажмите кнопку **Configure**. Активируйте параметр **Additional user levels (max.4)**: и установите нужное число в списке.
- ▶ Если Вы хотите сбросить разрешения до настроек по умолчанию, нажмите **Configure**. Активируйте опцию **Reset permissions and levels to default**. Если пользователям уже назначены дополнительные уровни доступа, появится требование изменить соответствующий профиль пользователя.
- ▶ Каждому функциональному разрешению присвоен идентификатор (ID). Если пользователь попытается выполнить действие, на которое у него нет разрешения, в предупреждении/сообщении об ошибке будет отображаться этот идентификатор. Этот идентификатор позволяет однозначно идентифицировать отсутствующую разрешение. При необходимости активируйте параметр **Show column "ID"**.

Информация о правах пользователей

Индивидуальные права пользователя связаны с общими настройками в системе управления пользователями. Доступ к этим настройкам можно получить в окне **User Management** через пункт меню **Extras | Preferences**.

Полномочие	Описание
<b>Skip calibration interval (ME003)</b>	В настройках системы управления пользователями опционально можно указать период действия калибровки. Если Вы активировали этот период времени, а у пользователя нет таких полномочий, он не сможет запустить измерение.
<b>Measurement with unreleased methods (categories) (ME004)</b>	При сохранении можно присвоить методам атрибут <b>Cat.</b> (категория), тем самым отметив методы для использования. В системе управления пользователями можно указать до 5 меток категорий, которые будут помечать методы как утвержденные.  Если у пользователя есть такое право, он может начать измерение с помощью метода, который еще не утвержден.

Информация об обновлениях

Если Вы уже настроили управление пользователями, пользователям будут назначены новые уровни доступа: администратор и уровень 1 - уровень 4. Проверьте, соответствуют ли установленные разрешения Вашим потребностям, и измените права на уровнях соответствующим образом. Обратите внимание, что в новой установке администратор по умолчанию имеет доступ только к системе управления пользователями и больше не имеет прав на управление ASpect PQ.

### 13.1.3 Общие настройки системы управления пользователями

В окне **Preferences** доступны следующие параметры настройки системы управления пользователями:

- Вход в систему и указания по использованию пароля
- Использование каталогов данных
- Настройки для использования калибровок и методов
- Подписи

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 PQ User Management** выберите пункт меню **Extras | Settings....**  
Откроется окно **Preferences** .
- ▶ Слева выберите панель команд, которую необходимо изменить.
- ▶ Выполните необходимую настройку.  
Нажатие кнопки **Default settings** восстанавливает настройки по умолчанию для выбранной панели команд. Это не затрагивает настройки других областей.
- ▶ Примените настройки, нажав кнопку **OK**.

#### User access

Вы можете настроить вход локально через систему управления пользователями или через сервер входа с использованием Active Directory.

Для локального входа выберите в окне **User access** параметр **Local (with user management)** и настройте общие правила для новых входов в систему и паролей:

Опция	Описание
<b>Number of login attempts:</b>	Количество неправильных вводов пароля (макс. 10) При завершении попыток ASpect PQ по истечении периода ожидания будет закрыт и для повторного входа в систему потребуются его перезапуск. В файл журнала событий будет добавлена запись (предупреждение).
<b>Disable account after failed login attempts</b>	Заблокировать пользователя при превышении максимального количества попыток авторизации
<b>Minium user name length:</b>	Минимальное количество символов для новых имен пользователей (макс. 10)
<b>Enforce login with password</b>	Для новых имен пользователей должен быть назначен пароль.
<b>Password with letters and numbers:</b>	Назначать можно только пароли, содержащие как буквы, так и цифры. Эта политика также применяется при изменении пароля.
<b>Password and user ID must be different</b>	Назначать можно только те пароли, которые отличаются от имени пользователя. Эта политика также применяется при изменении пароля.
<b>User must change password at next login is active</b>	Новые пользователи должны изменить свой пароль при первом входе в систему.
<b>Password expires in</b>	По истечении этого срока пользователю при входе в систему будет предложено изменить пароль. После этого пароль будет продлен на период, указанный в руководстве (макс. 999 дней). Это значение будет использоваться по умолчанию.
<b>Minium password length:</b>	Минимальное количество символов для новых паролей Кол-во символов: От 3 до 10

Для входа на основе сервера активируйте опцию **Server-based (with Active Directory)** и настройте следующее:

Опция	Описание
<b>Domain name(s)</b>	Доменное имя сервера входа в систему Вы можете указать 2 сервера.
<b>Allow local login if login server not reached</b>	Если вход через сервер не удастся, пользователи с соответствующими правами могут войти в систему локально в системе управления пользователями через меню «Пуск» Windows. Для этого пользователям также должен быть назначен локальный пароль. В системе управления пользователями авторизованные пользователи могут активировать опцию <b>Local (with user management)</b> , чтобы обеспечить локальный вход в ASpect PQ.
<b>Allow local login for AJService account</b>	Активация этой опции позволяет персоналу службы AJ проводить обслуживание устройства без дополнительной поддержки со стороны администратора.

#### Folders

Можно указать рабочую папку аналитической программы, а также каталог для файла журнала событий.

Опция	Описание
<b>ASpect working directory</b>	Настройка рабочей директории Рабочая директория содержит базы данных методов и последовательностей, а также файлы результатов. Рабочая директория была задана при установке ASpect PQ и может быть изменена здесь.
<b>Audit trail</b>	Настройка пути к файлу журнала событий Путь можно изменить.
<b>Folder with user database</b>	Отображение пути к базе данных пользователей Этот путь можно изменить только с помощью программы установки.
<b>AJ File Protection</b>	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.

#### Permissions (Details)

В этой группе выполняются общие настройки для методов и калибровок, которые влияют на разрешения на уровнях пользователей.

Опция	Описание
<b>Calibration validity period [h:mm]:</b>	Опциональное указание периода действия калибровки Если разрешение <b>Skip calibration interval</b> отключено для пользователя (см. уровни пользователей), после истечения периода действия пользователь не сможет запустить последовательность. Если разрешение <b>Skip calibration interval</b> активно, пользователь сможет запустить последовательность. Отображается сообщение о том, что период действия калибровки истек.
<b>Method categories for released methods</b>	Здесь можно указать до 5 категорий, чтобы отметить методы как одобренные. Категории вводятся в поле <b>Cat.</b> при каждом сохранении метода.

Опция	Описание
	Если разрешение <b>Measurement with unreleased methods (categories)</b> отключено для пользователя, он не сможет запустить последовательность, если соответствующий метод не отмечен одной из указанных категорий.

Signatures

В списке показаны значения подписей и соответствующий пользовательский уровень, который можно выбрать при подписании.

Экранная кнопка	Описание
<b>Add</b>	Добавление нового значения подписи После нажатия кнопки откроется окно <b>Edit list of signature meanings</b> , в котором можно выбрать новое значение подписи и действительный уровень пользователя.
<b>Modify</b>	Редактирование выделенного значения подписи
<b>Delete</b>	Удаление выделенного значения подписи

### 13.1.4 Создание новой учетной записи пользователя

Создать новую учетную запись могут только пользователи с соответствующими правами. В настройках уровня пользователя уровню «администратор» присваиваются права управления пользователями. Конфигурация нового пользователя с соответствующими правами осуществляется в окне **Add user data**.

Параметры в окне Add user data

Опция	Описание
<b>User ID</b>	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.
<b>Full name</b>	Полное имя пользователя Это имя используется как часть электронной подписи. Макс. кол-во символов: 32
<b>Description</b>	Поле для комментариев Ввод является опциональным.
<b>User level</b>	Выбор пользовательского уровня с соответствующими правами
<b>Password</b>	Установка пароля При вводе пароля имеет значение регистр символов. 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
<b>Символ замка</b>	<b>Закрытый:</b> Защита паролем активна (пароль установлен). <b>Открытый:</b> защита паролем еще не активна.
<b>Password never expires</b>	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. Этот параметр скрыт, если вход в систему осуществляется через сервер входа и Active Directory.

Опция	Описание
<b>User-specific working directory</b>	Для пользователя создается собственная рабочая директория по следующей схеме: \ASpect-рабочая директория\имя пользователя. Структура директории создается при первом входе пользователя в систему.
<b>Use e-signature</b>	Пользователь имеет право электронной подписи документов. При этом доступные ему значения подписи зависят от его уровня пользователя.
<b>Disable user ID</b>	Деактивация учетной записи пользователя  Имя пользователя можно временно деактивировать. Деактивация учетной записи пользователя не позволяет повторно присваивать это имя пользователя новым пользователям.
<b>User must change password at next login</b>	При следующем входе в систему пользователю будет предложено изменить пароль.

Определение данных пользователя

- ▶ В окне **User Management** выберите **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 PQ User Management**.

**См. также**

- 📖 Общие настройки системы управления пользователями [▶ 153]

### 13.1.5 Изменение существующей учетной записи пользователя

Свойства учетной записи пользователя можно изменить.

- ▶ В окне **User Management** выделить учетную запись 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 [▶ 156]

## 13.2 Изменение пароля

Эта функция доступна только для локального входа в ASpect PQ или для администрирования пользователей. При входе в систему через сервер входа пароли и их действительность контролируются там.

В зависимости от условий соглашения в учетной записи пользователь должен регулярно менять назначенный ему пароль при локальном входе в систему.

- ▶ В **ASpect PQ** выберите пункт меню **Система | Change password** .  
Появится окно **Change password** .
- ▶ Ввести старый пароль и два раза новый пароль и нажать кнопку **OK** для подтверждения.

- ✓ При правильном вводе появится сообщение **Password was changed**.

### 13.3 Просмотр, печать и экспорт журнала событий

Файл журнала событий регистрирует системные события, а также все предупреждения и сообщения об ошибках ASpect PQ и системы управления пользователями. Для просмотра журнала событий требуются соответствующие права в учетной записи.

Чтобы открыть журнал событий в ASpect PQ выберите пункт меню **Система | Журнал** или в системе управления пользователями выберите **Audit Trail**.

Доступны следующие функции журнала событий:

- Дисплей
- Фильтр
- Обновление
- Распечатать
- 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
<b>Type</b>	Отображение типа события  Контрольный журнал сохраняет записи следующих типов событий и обозначает их символами: информация, предупреждение, ошибка, вход в систему и выход из системы
<b>Date/Time</b>	Дата и время события (по часам ПК)  Кнопки со стрелками [+] и [-] позволяют упорядочить записи в шапке таблицы обоих столбцов по возрастанию или по убыванию даты и времени.
<b>Time zone</b>	Часовой пояс, к которому относится время события (система управления Windows)
<b>User</b>	Пользователь, авторизованный в системе на момент события
<b>Source</b>	Дифференциация по событиям в системе управления пользователями или в ASpect PQ
<b>Description</b>	Подробная информация о выбранном событии

Выбор вида

Если Вы открыли журнал событий в окне **User Management**, Вы увидите события в ASpect PQ, а также в системе управление пользователями. В списке View можно ограничить отображение: события в ASpect PQ или административные события.

Если Вы открыли журнал событий в ASpect PQ с помощью пункта меню **System | Audit Trail**, отображаются только события в ASpect PQ.

Применение фильтра к журналу событий

Щелчок по кнопке **Filter** позволяет выполнить поиск по вошедшим в систему пользователям, типам записей или периодам времени. Вы также можете уточнить поиск действиями, относящимися к методам, последовательностям, результатам или рабочим листам. Кнопка **Deactivate filter** позволяет сбросить ограничения установленного фильтра.

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.

Печать журнала событий

Журнал событий можно распечатать. После того, как к журналу был применен фильтр, на печать выводятся только отфильтрованные записи.

Экспорт журнала событий

- ▶ Печать текущего представления журнала событий запускается кнопкой **Print**. Откроется окно печати.
- ▶ В списке **Direct to** выберите формат вывода данных.
- ▶ Запустите печать, нажав кнопку **Start**.
  - ✓ Журнал событий будет выведен на печать в выбранном формате вывода.

Записи журнала событий можно экспортировать CSV-файл-файл. Функция экспорта доступна только в том случае, если журнал событий был открыт в системе управления пользователями. Если фильтр активирован, экспортируются только отфильтрованные записи.

- ▶ Нажмите кнопку **Export**, чтобы открыть окно **Сохранить как**.
- ▶ Указать путь и имя и нажмите кнопку **OK** для подтверждения.
  - ✓ Файл журнала событий будет экспортирован.

## 13.4 Электронные подписи

ASpect PQ позволяет подписывать данные результатов электронным способом. Подпись является завершением работы над файлом, при последующих изменениях файла подпись становится недействительной. Значения подписей и соответствующие им уровни разрешений настраиваются в общих настройках системы управления пользователями. Параметры, разрешающие пользователю подписывать документы, настраиваются в его учетной записи. Таким образом пользователь может подписать документ, если эта функция активирована в его учетной записи, и если подписи предусмотрены для его уровня авторизации.

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.

### См. также

- 📖 Общие настройки системы управления пользователями [▶ 153]
- 📖 Настройка уровней пользователей [▶ 152]

### 13.4.1 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
<b>Имя пользователя</b>	Учетное имя текущего пользователя Имя пользователя можно изменить. Это позволяет поставить подпись другим пользователям.
<b>Пароль</b>	Пароль пользователя
<b>Значение</b>	Значение подписи Список значений подписей задается администратором системы управления пользователями.

Опция	Описание
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.
- ▶ Нажмите **Подпис..**
  - ✓ Появится вопрос, следует ли поставить подпись или отменить процесс. Успешная установка подписи будет подтверждена.

**См. также**

- 📖 Создание новой учетной записи пользователя [▶ 156]
- 📖 Общие настройки системы управления пользователями [▶ 153]

## 13.4.2 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: <b>Valid</b> 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. <b>Invalid (missing or invalid signature file)</b> Файл подписи, принадлежащий записи данных, не найден или неправильный. <b>Invalid (TPS data)</b> Файл результатов был изменен после его подписания. Сравнение вновь вычисленных и сохраненных контрольных сумм показывает различия. <b>Invalid (SPK data)</b> Файл, содержащий необработанные данные спектра, был изменен после подписания. Сравнение вновь вычисленных и сохраненных контрольных сумм показывает различия.
Meaning	Значение подписи
Comment	Оptionальный комментарий к подписи

## 13.5 AJ File Protection

Оptionальная 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 авторизованным для этого приложениям, в то время как доступ другим приложениям блокирует.

ется. 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 носителе.

В сочетании с отдельными правами на автоматическое сохранение и экспорт, программа AJ File Protection обеспечивает полную безопасность данных при создании методов, записи и оценке данных.

## 14 Приложение

### 14.1 Обзор обозначений, используемых при отображении значений

Примечание	Значение	Значения	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
< NWG	Значение пробы меньше предела детектирования	Средние значения	Окно процесса и результата
< BG	Значение пробы меньше предела количественного определения и больше предела детектирования	Средние значения	Окно процесса и результата
RSD!	Среднее значение пробы или среднее значение стандарта лежит за пределами диапазона заданного относительного стандартного отклонения	Средние значения	Окно процесса и результата
RR!	Среднее значение пробы или среднее значение стандарта лежит за пределами диапазона заданного относительного диапазона	Средние значения	Окно процесса и результата
Фактор!	Превышение предела фактора рекалибровки для калибровочной кривой	Калибровочная кривая	Окно процесса и результата
R <sub>2</sub> (наст.) или R	Коэффициент детерминации регрессии R <sub>2</sub> (наст.) или R (в зависимости от выбора в окне <b>Опции   Пос-ть анализов</b> ) калибровочной кривой ниже заданного значения	Калибровочная кривая	Окно процесса и результата Окно <b>Калибровка</b>
#MAN.	Отдельное значение пробы или отдельное значение стандарта было вручную исключено из расчета средних значений пробы	Отдельные значения пробы	Окно <b>Детальн. рез-ты</b>
#KOR.	Отдельное значение пробы или отдельное значение стандарта было автоматически исключено из вычисления средних значений пробы по тесту выбросов Граббса	Отдельные значения пробы	Окно <b>Детальн. рез-ты</b>