

## Manuel d'utilisation

ASpect PQ

Logiciel pour ICP-OES



---

Fabricant                      Analytik Jena GmbH+Co. KG  
Konrad-Zuse-Strasse 1  
07745 Jena/Allemagne  
Téléphone : +49 3641 77 70  
Fax : +49 3641 77 9279  
E-mail : info@analytik-jena.com

Service technique            Analytik Jena GmbH+Co. KG  
Konrad-Zuse-Strasse 1  
07745 Jena / Allemagne  
Téléphone : +49 3641 77 7407  
Fax : +49 3641 77 9279  
E-mail : service@analytik-jena.com



Suivre ces instructions pour une utilisation correcte et en toute sécurité.  
Conserver ce manuel pour toute consultation ultérieure.

Informations générales      <http://www.analytik-jena.com>

Numéro de document          /

Édition                          C (04/2025)

Documentation technique      Analytik Jena GmbH+Co. KG

© Copyright 2025, Analytik Jena GmbH+Co. KG

# Sommaire

<b>1</b>	<b>Logiciel ASpect PQ.....</b>	<b>7</b>
1.1	Instructions relatives à la protection des données.....	7
1.2	Démarrer l'ASpect PQ.....	7
1.2.1	Fenêtre Démarrage rapide.....	8
1.2.2	Commencer avec une fiche de travail.....	9
1.2.3	Commencer sans fiche de travail.....	10
1.2.4	Ouvrir ASpect PQ en deuxième instance.....	11
1.2.5	Verrouiller ASpect PQ.....	11
1.3	Quitter ASpect PQ.....	11
1.4	Instructions générales d'utilisation.....	11
1.4.1	L'interface de travail.....	11
1.4.2	Utiliser l'aide.....	12
1.4.3	Aperçu de la barre de menu, d'outils et de symboles.....	13
1.4.4	Éléments de commande fréquemment utilisés.....	15
<b>2</b>	<b>Fiches de travail.....</b>	<b>18</b>
2.1	Création d'une fiche de travail.....	19
2.2	Éditer la fiche de travail.....	21
2.3	Ouvrir une fiche de travail.....	21
2.4	Supprimer la fiche de travail.....	21
<b>3</b>	<b>Méthodes.....</b>	<b>22</b>
3.1	Créer, enregistrer et charger des méthodes.....	22
3.1.1	Créer une nouvelle méthode.....	22
3.1.2	Enregistrer méthode.....	23
3.1.3	Charger la méthode.....	24
3.2	Spécifier les paramètres de méthode.....	25
3.2.1	Spécifier des lignes d'analyse (fenêtre Méthode   Raies).....	25
3.2.2	Régler les paramètres pour le plasma et l'optique de transfert (onglet Méthode   Plasma).....	32
3.2.3	Spécifier l'alimentation des échantillons (fenêtre Méthode   Débit d'échantillon).....	34
3.2.4	Évaluer les pics (fenêtre Méthode   Évaluation).....	36
3.2.5	Entrer les paramètres d'étalonnage (fenêtre Méthode   Étalonnage).....	40
3.2.6	Spécifier les évaluations statistiques (fenêtre Méthode   Statistiques).....	45
3.2.7	Spécifier le contrôle qualité (fenêtre Méthode   QCS).....	47
3.2.8	Spécifier le contrôle qualité (fenêtre Méthode   QCC).....	51
3.2.9	Spécifier des formats de génération (fenêtre Méthode   Édition).....	53
<b>4</b>	<b>Séquences.....</b>	<b>54</b>
4.1	Créer, enregistrer, ouvrir des séquences.....	54
4.1.1	Créer nouvelle séquence.....	54
4.1.2	Enregistrer séquence.....	54
4.1.3	Charger la séquence.....	55
4.2	Fenêtre Séquence.....	56
4.3	Spécifier des mesures et actions dans une séquence.....	57
4.4	Sélectionner des éléments / lignes pour une analyse d'échantillon / une action.....	60
<b>5</b>	<b>Données d'informations échantillon (ID échantillon).....</b>	<b>61</b>
5.1	Créer, enregistrer et ouvrir des données d'informations échantillon.....	61

5.2	Fenêtre ID échant.   Infos. échantillon .....	62
5.3	Spécifier des informations échantillons .....	64
<b>6</b>	<b>Effectuer les analyses et calculer les résultats .....</b>	<b>65</b>
6.1	Aperçu des commandes de menu et des boutons pour démarrer les analyses dans la fenêtre principale ..	65
6.2	Activer le spectromètre et allumer le plasma.....	65
6.3	Supprimer le plasma et éteindre le spectromètre.....	67
6.4	Démarrage de la routine de mesure .....	68
6.5	Affichage et sauvegarde des résultats pendant le déroulement de l'analyse .....	69
6.6	Interrompre et reprendre le déroulement de l'analyse.....	71
6.7	Répéter des actions de la séquence.....	71
6.8	Recalculer les résultats d'analyse .....	72
6.9	Exploiter des mesures en parallèle à une analyse en cours (mode Offline) .....	74
6.10	Affichage des résultats et du déroulement de l'analyse dans la fenêtre principale .....	75
6.10.1	Onglet Séquence/Résultats.....	75
6.10.2	Onglet Séquence.....	76
6.10.3	Onglet Résultats .....	76
6.10.4	Onglet Aperçu .....	79
6.11	Afficher et traiter des valeurs individuelles d'échantillons .....	80
6.12	Afficher et traiter des spectres d'intensité.....	82
6.12.1	Afficher les spectres - fenêtre Modifier les spectres / Afficher' .....	82
6.12.2	Évaluer la crête et déterminer la correction de fond - fenêtre Modifier les spectres   Evaluation .....	86
6.12.3	Supprimer les perturbations de spectre - fenêtre Modifier les spectres   Corrections spectrales' .....	88
6.13	Enregistrer le spectre d'ensemble .....	90
<b>7</b>	<b>Étalonnage.....</b>	<b>92</b>
7.1	Représentation de la courbe d'étalonnage.....	93
7.2	Afficher les résultats d'étalonnage.....	94
7.2.1	Étalonnage - onglet Tableau .....	94
7.2.2	Étalonnage - onglet Résidus .....	95
7.2.3	Étalonnage - onglet LD/ LQ .....	95
7.2.4	Étalonnage - onglet LD/ LQ .....	96
7.3	Traiter la courbe d'étalonnage .....	96
<b>8</b>	<b>Contrôle qualité .....</b>	<b>98</b>
8.1	Paramètres des onglets QC .....	98
8.2	Entrées et limites des onglets QC .....	99
8.3	Afficher les onglets QC .....	100
<b>9</b>	<b>Commander et contrôler l'appareil et les accessoires.....</b>	<b>102</b>
9.1	Spectromètre.....	102
9.1.1	Régler les paramètres du spectromètre et tester les fonctions.....	102
9.1.2	Diagnostic des paramètres de l'appareil.....	104
9.1.3	Procéder à une mesure continue de crête.....	104
9.1.4	Enregistrer la courbe du signal .....	105
9.2	Plasma.....	106
9.2.1	Allumer le plasma et régler les conditions du plasma .....	106
9.2.2	Contrôler l'alimentation d'échantillon de la pompe .....	109
9.2.3	Ajustement et optimisation du plasma .....	109

9.3	Distributeur d'échantillons .....	112
9.3.1	Afficher le distributeur d'échantillons connecté.....	113
9.3.2	Configurer le rack du distributeur d'échantillons .....	113
9.3.3	Paramètres techniques du distributeur d'échantillons .....	114
9.3.4	Tester les fonctions du distributeur d'échantillons .....	115
9.3.5	Afficher les positions des échantillons sur le distributeur d'échantillons .....	116
9.3.6	Fonction de dilution.....	117
9.4	Refroidisseur en circuit fermé .....	118
<b>10</b>	<b>Gestion des données .....</b>	<b>119</b>
10.1	Fonctions d'impression dans ASpect PQ.....	119
10.1.1	Imprimer des résultats d'analyse .....	119
10.1.2	Imprimer les autres paramètres d'analyse et réglages .....	122
10.1.3	Modèles de protocole .....	123
10.2	Gestion des données pour tous les types de données dans Aspect PQ .....	125
10.2.1	Gérer les méthodes et les séquences.....	125
10.2.2	Gérer les fichiers de résultats.....	127
10.2.3	Exporter les fichiers de lignes / longueurs d'onde .....	129
10.2.4	Gérer des modèles de correction .....	129
10.2.5	Supprimer les spectres de correction.....	130
10.2.6	Importer des modèles de protocole.....	130
10.2.7	Gérer les favoris de ligne.....	130
10.2.8	Importer, exporter et supprimer des fiches de travail .....	131
10.3	Enregistrer les résultats au format ASCII/CSV.....	132
10.4	Spécifier les unités .....	132
10.5	Gérer les bases de données pour les stocks et les échantillons QC.....	133
10.6	Créer des remarques prédéfinies .....	134
10.7	Utiliser le presse-papier Windows .....	134
<b>11</b>	<b>Adapter ASpect PQ .....</b>	<b>136</b>
11.1	Options de visualisation .....	136
11.2	Liens de sauvegarde .....	137
11.3	Options d'exportation .....	138
11.4	Options pour l'exportation continue ASCII .....	138
11.5	Options pour le déroulement de l'analyse.....	139
11.6	Réglages généraux pour l'étalonnage et la correction de valeur à blanc .....	141
<b>12</b>	<b>Mettre en place un échange de données avec un système externe de gestion des tâches .....</b>	<b>143</b>
12.1	Exporter des résultats de mesure .....	143
12.2	Importer des fichiers d'informations échantillon .....	145
12.3	Champs de l'exportation de résultats .....	145
12.4	Champs des fichiers d'informations échantillon .....	148
<b>13</b>	<b>Module de conformité FDA 21 CFR Part 11 en option .....</b>	<b>150</b>
13.1	Gestion des utilisateurs .....	150
13.1.1	Gestion des utilisateurs – Affichages et paramètres .....	150
13.1.2	Configurer les niveaux d'utilisateurs.....	151
13.1.3	Configurer les paramètres généraux de la gestion des utilisateurs.....	152
13.1.4	Créer un nouveau compte utilisateur .....	155
13.1.5	Modifier un compte d'utilisateur existant .....	156

---

13.2	Modifier le mot de passe.....	156
13.3	Afficher, imprimer et exporter la piste d'audit.....	157
13.4	Signatures électroniques.....	158
13.4.1	Signer les résultats de mesure.....	158
13.4.2	Afficher la signature.....	159
13.5	Protection des fichiers AJ.....	159
<b>14</b>	<b>Annexe.....</b>	<b>161</b>
14.1	Aperçu des marquages dans l'affichage des valeurs.....	161

# 1 Logiciel ASpect PQ

ASpect PQ est le logiciel de commande et d'évaluation pour les appareils ICP-OES suivants :

- PlasmaQuant PQ 9000
- PlasmaQuant 9100
- PlasmaQuant 9200

Pour les mesures, les paramètres de méthode peuvent être optimisés selon les exigences de l'échantillon. Les données de résultat peuvent être recalculées, exportées dans différents formats de fichier et imprimées.

En plus de la description du logiciel, ce mode d'emploi contient des instructions relatives à la maintenance et à l'entretien de l'appareil ICP-OES. De nombreux manuels de maintenance sont enrichis d'animations et de vidéos.

Version du logiciel décrite

Le document suivant concerne la version ASpect PQ 1.4.

Utilisation conforme à l'usage prévu

Le logiciel ASpect PQ sert exclusivement à piloter les appareils susmentionnés et à exploiter les données obtenues avec ces appareils.

Le fabricant décline toute responsabilité pour les problèmes ou les dommages résultant d'une utilisation non conforme de l'ASpect PQ.

ASpect PQ et l'appareil à commander avec ne doivent être utilisés que par un personnel compétent et formé. L'utilisateur doit être familiarisé avec le contenu de ce manuel et du manuel de l'appareil.

## 1.1 Instructions relatives à la protection des données

Le présent logiciel utilise des noms d'échantillon et permet, en option, une indication sur l'échantillon (notes). Le nom d'échantillon sert d'identificateur pour les résultats des tests d'un échantillon. Le nom d'échantillon permet d'attribuer des résultats de test à la personne physique sur laquelle les tests ont été réalisés, en particulier dans le domaine clinique. Les données personnelles doivent être le plus possible minimisées, afin de garantir que personne ne pourra modifier les informations personnelles provenant du nom d'échantillon ou des notes optionnelles. Aucun indicateur direct comme le nom, le numéro de sécurité sociale, le numéro d'identification nationale, la date de naissance ou d'autres attributs personnels, ne doit être utilisé. Il incombe au responsable du traitement des données du laboratoire de respecter la législation et les obligations relatives aux données applicables.

Analytik Jena peut demander que des fichiers de résultats de mesure qui contiennent également des noms d'échantillon ou des notes soient transmis dans le cadre d'activités de service, comme le support client, le dépannage et l'instruction de plaintes.

## 1.2 Démarrer l'ASpect PQ

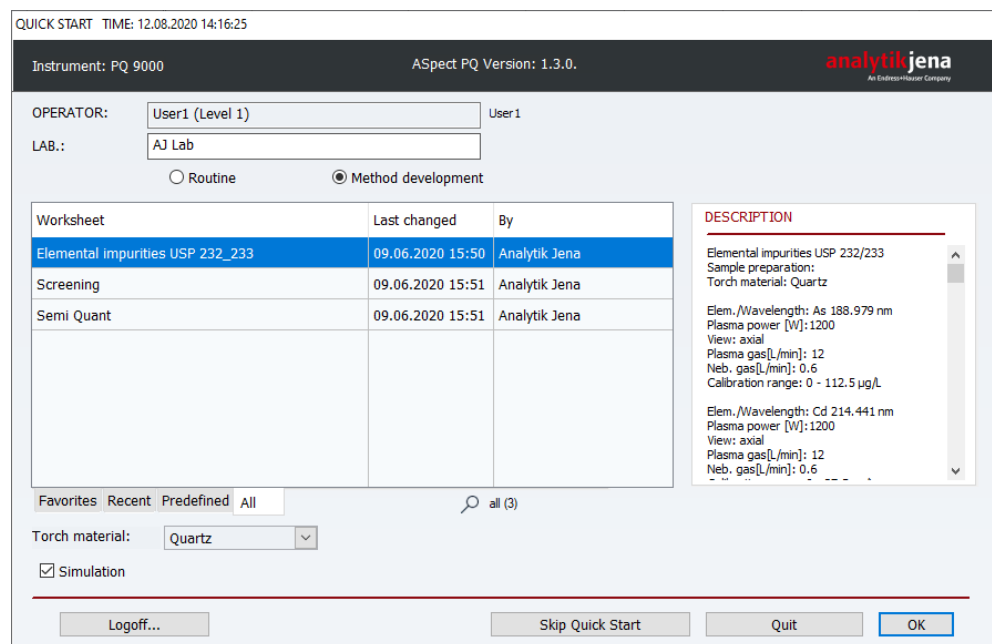
- ▶ Activer l'appareil et le distributeur d'échantillons comme suit.
- ▶ Cliquer sur l'icône ASpect PQ sur le bureau Windows.
  - ✓ L'ASpect PQ démarre.

- ▶ Si la gestion des utilisateurs (option) est installée, le système demande un nom d'utilisateur et un mot de passe. Le programme ASpect PQ n'est validé qu'une fois cette entrée effectuée.

Le menu Quickstart apparaît à l'ouverture du logiciel. Il permet de choisir des fiches de travail avec des méthodes et des séquences présélectionnées afin de pouvoir commencer rapidement à prendre des mesures ou de passer directement à l'interface d'ASpect PQ.

### 1.2.1 Fenêtre Démarrage rapide

La fenêtre **Démarrage rapide** apparaît après le démarrage du logiciel et l'identification d'un utilisateur (uniquement si la gestion des utilisateurs est installée). Il est ensuite possible de charger une fiche de travail ou d'ouvrir la fenêtre principale d'ASpect PQ. Dans ASpect PQ, vous pouvez également ouvrir la fenêtre **Démarrage rapide** avec la commande de menu **Fichier | Démarrage rapide**.



Réglages dans la fenêtre Démarrage rapide


Les options et les boutons suivants sont disponibles dans la fenêtre **Démarrage rapide**.

Option/bouton	Description
<b>Utilisateur</b>	L'utilisateur connecté est indiqué lorsque la gestion des utilisateurs en option a été installée et est utilisée. Lorsque la gestion des droits n'est pas utilisée, un utilisateur peut être saisi manuellement ici.
<b>Labo</b>	Il est possible d'entrer jusqu'à 30 caractères. Le dernier nom saisi est mémorisé et ajouté à titre d'information dans les protocoles du résultat.
<b>Routine</b>	Démarrer le programme pour le fonctionnement de routine. En fonctionnement de routine, seules les méthodes validées pour le fonctionnement de routine sont validées.  Si le « Modul 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ » en option est installé, alors l'option <b>Routine</b> est pré-réglée. Il n'est pas possible de choisir entre <b>Routine</b> et <b>Développement de méthodes</b> .
<b>Développement de méthodes</b>	Démarrer entièrement le programme. Tous les paramètres dans le développement de la méthode sont validés.

Option/ bouton	Description
<b>Torche</b>	Choisissez le matériau de torche voulu (quartz ou céramique) pour adapter la sensibilité du capteur de plasma optique.
<b>Simulation</b>	À des fins de formation et de démonstration, il est possible d'utiliser ASpect PQ sans appareil d'analyse branché. Lors de l'activation, toutes les fonctions de l'appareil (enregistrement des valeurs mesurées et analyse) sont traitées en mode simulation.
<b>Passer le démarrage rapide</b>	Passer à l'interface d'ASpect PQ sans sélectionner une fiche de travail.
<b>Configurer les ports : AX/SDX</b>	Uniquement lorsque le système de dilution Teledyne Cetac SDXHPLD avec passeur d'échantillons ASX-560 est raccordé Les ports USB du distributeur d'échantillons et du système de dilution affectés sont automatiquement configurés après avoir cliqué sur le bouton. Si « Modul 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ » (gestion des utilisateurs) en option est installé, cette fonction peut uniquement être exécutée par un utilisateur possédant des droits d'administrateur.
<b>Quitter</b>	Fermer la fenêtre <b>Démarrage rapide</b> et quitter ASpect PQ.
<b>OK</b>	Passer à l'interface d'ASpect PQ après avoir sélectionné une fiche de travail.

Tableau des fiches de travail

Le tableau des fiches de travail liste les fiches de travail actuellement à disposition. Les 4 onglets facilitent l'accès à une fiche de travail :

Onglet	Contenu
<b>Favoris</b>	Fiches de travail avec marque <b>Favori</b>
<b>Récent</b>	Dernières fiches de travail utilisées
<b>Pré-défini</b>	Fiches de travail d'Analytik Jena installées lors de l'installation d'ASpect PQ
<b>Tous</b>	Toutes les fiches de travail
	L'icône de la loupe permet de filtrer les fiches de travail par élément. Un clic sur ce symbole affiche une liste d'éléments permettant de sélectionner un élément. Il est possible de répéter la sélection si la recherche porte sur des éléments supplémentaires. Lorsque plusieurs éléments sont marqués, alors toutes les fiches de travail qui comprennent au moins un de ces éléments dans la méthode ajoutée (logique OU) sont affichées. La recherche porte aussi bien sur les méthodes liées directement à une fiche de travail que sur des méthodes chargées dans une séquence liée.

## 1.2.2 Commencer avec une fiche de travail

Une fiche de travail est un dossier qui contient une méthode et une séquence. En option, une fiche de travail peut également contenir des paramètres sur l'identifiant d'un échantillon et sur l'enregistrement du fichier de résultats. Sélectionner une fiche de travail permet de commencer immédiatement une mesure. Lorsque plusieurs versions de la méthode et de la séquence existent, alors la version la plus récente est utilisée pour la mesure.

- ▶ Installez les accessoires sur l'appareil d'analyse, puis mettez les accessoires et l'appareil en marche.
- ▶ Démarrer le logiciel.
  - ✓ La fenêtre **Démarrage rapide** apparaît.

- ▶ Procéder aux entrées nécessaires dans les champs **Utilisateur** et **Labo**.
- ▶ Sous **Torche**, sélectionner Verre de quartz ou Céramique.
- ▶ Marquer la fiche de travail souhaitée dans le tableau des fiches de travail.
- ▶ Cliquez sur **OK**.

✓ L'interface d'ASpect PQ apparaît. La méthode et la séquence sont déjà chargées.

Selon la configuration de la fiche de travail, il est à présent possible de relier la méthode et la séquence chargées avec la fiche de travail à un fichier d'ID d'échantillons ou de démarrer directement la mesure.

### 1.2.3 Commencer sans fiche de travail

En l'absence d'une fiche de travail préparée, charger la méthode, la séquence et l'ID échantillon pour la mesure ou créer une nouvelle configuration.

- ▶ Installez les accessoires sur l'appareil d'analyse, puis mettez les accessoires et l'appareil en marche.
- ▶ Démarrer le logiciel.
  - ✓ La fenêtre **Démarrage rapide** apparaît.
- ▶ Procéder aux entrées nécessaires dans les champs **Utilisateur** et **Labo**.
- ▶ Sous **Torche**, sélectionner Verre de quartz ou Céramique.
- ▶ Cliquez sur **Passer le démarrage rapide**.
  - ✓ L'interface d'ASpect PQ apparaît.

Déroulement général d'une procédure de mesure

Spécifier une méthode et une séquence pour l'analyse et lancer la procédure de mesure. Les actions suivantes sont nécessaires pour une procédure manuelle ou automatique de mesure :

- ▶ Spécifier les **Paramètres de la méthode** dans une méthode (développement de la méthode). Charger la méthode.
- ▶ Créer une **Séquence**. La séquence des échantillons et actions est présentée dans l'ordre de traitement. Certaines données décrivant les échantillons comme leur désignation et leur position sur le distributeur d'échantillons peuvent être entrées directement et enregistrées avec la séquence.
- ▶ Pour les analyses de routine, il est intéressant de créer un **fichier d'identification d'échantillon** (ID échantillon). Celui-ci comporte les données de description de l'échantillon comme la désignation, le facteur de dilution et la position sur le distributeur d'échantillons. Ces données sont nécessaires s'il faut recalculer la concentration par rapport à l'échantillon d'origine. Les fichiers d'identification d'échantillon sont des fichiers de texte et peuvent être créés avec des programmes externes.
- ▶ Démarrer la **mesure**.

Au cours de la mesure, les résultats sont immédiatement entrés dans la base de résultats. L'accès à ce fichier de résultats central se fait avec les fonctions de gestion de données (p. ex. exportation, impression).

Après le démarrage de la mesure, les valeurs de résultat sont entrées dans la liste de résultats dans la fenêtre principale. Pour un affichage détaillé (p. ex. valeurs individuelles, spectres), il est possible de sélectionner la ligne d'échantillon correspondante. Les résultats mesurés en dernier sont toujours ajoutés à la fin du tableau et il n'est pas possible d'écraser les résultats.

Si nécessaire, il est possible d'effectuer une nouvelle exploitation des données par un nouveau calcul. Les données de mesure peuvent être préparées pour l'impression d'un protocole ou exportées.

### 1.2.4 Ouvrir ASpect PQ en deuxième instance

Si une application est déjà en cours, une autre instance de programme de l'application est ouverte en mode Offline. Dans ce mode, il n'y a pas de liaison avec l'appareil. Toutes les autres fonctions comme la création de méthodes ou le chargement et l'exploitation des résultats peuvent cependant être utilisées dans la première instance de programme en parallèle avec le mode mesure en cours.

- ▶ Démarrer le programme dans la deuxième instance avec le point de menu **Fichier | Démarrer la version du programme hors ligne**.

### 1.2.5 Verrouiller ASpect PQ

L'application peut être verrouillée pour la commande, mais les mesures continuent d'être effectuées. En liaison avec l'administration utilisateur disponible en option, une confirmation par mot de passe est demandée pour débloquer l'écran.

- ▶ Sélectionner le point de menu **Extras | Verrouiller**.
- ▶ Pour déverrouiller l'application, cliquez sur le symbole verrou sur l'écran.

## 1.3 Quitter ASpect PQ

- ▶ Éteindre le plasma.
- ▶ Terminer le programme en sélectionnant le point de menu **Fichier | Quitter**.
- ▶ Si à ce moment des données d'information sur la méthode, la séquence ou l'échantillon ne sont pas enregistrées, un message de commande s'affiche. Cliquez sur **Oui** si vous voulez enregistrer ces données.
- ▶ L'appareil ICP-OES a besoin de temps après la désactivation du plasma pour le refroidissement du système. Si la température cible n'est pas atteinte, une fenêtre de progrès s'affiche avec un message quand l'appareil peut être arrêté de manière sûre. Désactivez l'appareil ASpect PQ après avoir quitté ASpect PQ.



### REMARQUE

Si ASpect PQ est quitté alors que le plasma brûle, le plasma est automatiquement éteint après une demande !

#### Voir également

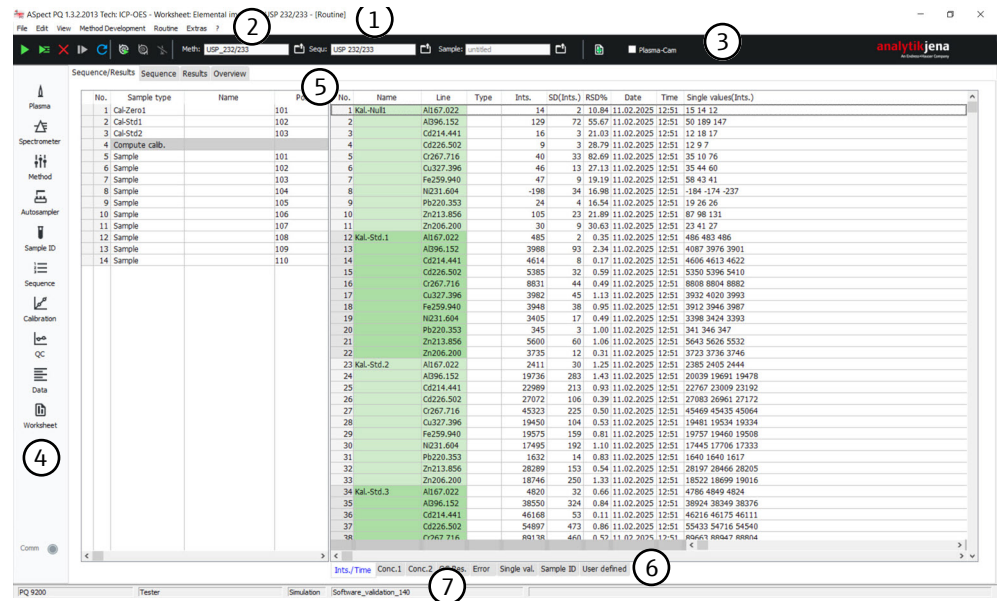
- 📖 Activer le spectromètre et allumer le plasma [▶ 65]


## 1.4 Instructions générales d'utilisation

### 1.4.1 L'interface de travail



Après le démarrage du programme ASpect PQ s'ouvre d'abord la fenêtre **Démarrage rapide**. Elle permet d'atteindre l'interface de travail.

Composants principaux de l'interface de travail



N°	Description
1	La <b>ligne de titre</b> contient des informations sur la version du logiciel, l'appareil connecté, la technique et (le cas échéant) la fiche de travail ouverte.
2	La <b>barre de menu</b> permet d'accéder à toutes les fonctions de programmation du logiciel.
3	La <b>barre d'outils</b> contient les boutons pour démarrer et mettre en pause les séquences de mesure. Elle indique la méthode actuellement ouverte, la séquence et le fichier d'ID échantillon. Un clic sur le bouton  à droite des champs permet de charger l'enregistrement. Le bouton de création d'une nouvelle fiche de travail se trouve également ici.
4	La <b>barre de symboles</b> permet d'accéder aux fenêtres principales (fonctions) du logiciel. Dès qu'une des fenêtres est ouverte, le symbole correspond apparaît en rouge. Lorsque plusieurs fenêtres sont ouvertes, cliquer une nouvelle fois sur le symbole pour afficher cette fenêtre au premier plan.
5	Dans la <b>fenêtre principal</b> , la séquence et les résultats de mesure sont affichés dans différents.
6	Certains onglets principaux comportent d'autres <b>sous-onglets</b> situés en bas de la fenêtre.
7	La <b>barre de statut</b> au niveau du bord inférieur fournit des informations sur l'appareil branché, l'utilisateur connecté et le nom de la base de données de résultats actuellement à l'écran.

Voir également

-  Affichage des résultats et du déroulement de l'analyse dans la fenêtre principale [\[> 75\]](#)
-  Fenêtre Démarrage rapide [\[> 8\]](#)

1.4.2 Utiliser l'aide

Vous trouverez de l'aide à la commande d'ASpect PQ au point de menu ? | **Rubriques d'aide**. Pendant le travail avec les fenêtres d'ASpect PQ, vous pouvez appuyer sur la touche de fonction **F1** pour obtenir une aide contextuelle.

Le programme affiche des informations courtes (infobulles) sur les boutons des barres d'outils et de symboles, sur les autres boutons de symboles et pour le titre de colonne dans les fenêtres **Méthode**, **Séquence** und **ID échant.** quand vous déplacez la souris dessus.

### 1.4.3 Aperçu de la barre de menu, d'outils et de symboles










Fonctions dans la barre de menu

En haut de l'interface d'ASpect PQ se trouve la barre de menu qui permet de déclencher toutes les commandes du logiciel. Les menus et boutons qui ne sont pas actifs sur l'interface de travail apparaissent en gris. Certains points de menu, p. ex. la fonction d'impression, sont affichés en selon les autres fenêtres ouvertes.

Point de menu	Description
<b>Fichier</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Créer, ouvrir et enregistrer des méthodes, séquences et données d'information</li> <li>■ Ouvrir les résultats</li> <li>■ Supprimer des méthodes et des séquences</li> <li>■ Exporter les données spectrales</li> <li>■ Imprimer la fenêtre ou le protocole actif</li> <li>■ Afficher le mode Ébauche de protocoles</li> <li>■ Démarrer l'instance de programme offline ou online</li> <li>■ Ouvrir la fenêtre <b>Démarrage rapide</b></li> <li>■ Quitter l'application</li> <li>■ Ouvrir directement les dernières méthodes et séquences ouvertes</li> </ul>
<b>Modifier</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Copier et insérer le contenu de champs de texte et de saisie</li> <li>■ Copier les lignes sélectionnées dans la liste de résultats dans le presse-papier</li> <li>■ Effacer le contenu de la liste de résultats</li> </ul>
<b>Visée</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Ouvrir et fermer les fenêtres qui comportent des représentations et des informations, p. ex. la courbe du signal</li> <li>■ Sélectionner l'échelle de l'axe de signaux des représentations</li> </ul>
<b>Outils</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Ouvrir les fenêtres nécessaires pendant le développement des méthodes</li> <li>■ Enregistrer le spectre d'ensemble</li> </ul>
<b>Routine</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Démarrer, mettre en pause et interrompre le déroulement de la mesure</li> <li>■ Recalculer les résultats</li> <li>■ Supprimer l'étalonnage</li> <li>■ Supprimer le plasma</li> <li>■ Rincer le système</li> </ul>
<b>Système</b>	<p>Disponible lorsque le module en option « 21 CFR partie 11 Compliance ASpect PQ » est installé</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Configurer la gestion des utilisateurs</li> <li>■ Modifier le mot de passe</li> <li>■ Afficher la piste d'audit</li> <li>■ Signer les résultats</li> </ul>
<b>Extras</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Ouvrir les fenêtres <b>Données et Options</b></li> <li>■ Ouvrir la liste des lignes</li> <li>■ Chercher des échantillons</li> <li>■ Imprimer l'écran actuel</li> <li>■ Contrôler et effectuer les maintenances (refroidisseur en circuit fermé)</li> <li>■ Verrouiller le poste de travail</li> </ul>
<b>?</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Afficher l'aide et les informations de version</li> </ul>




## Barre d'outils








Les boutons de la barre d'outils servent principalement à démarrer / interrompre et à poursuivre la mesure de séquence. Les méthodes, séquences et identifiants d'échantillons actuellement chargés sont affichés dans les champs de la barre d'outils.

Outils	Description
	Démarrage de la routine de mesure
	Mesurer les lignes marquées dans la séquence
	Démarrer la routine de mesure
	Poursuivre la mesure de séquence interrompue
	Recalculer les résultats
	Démarrer/stopper la pompe sur l'appareil ICP-OES
	
	Faire tourner la pompe plus vite (rincer le trajet d'échantillon)
	Supprimer le plasma (arrêt d'urgence)
	Ouvrir des fichiers Il est possible de charger des méthodes, des séquences ou des ID d'échantillon dans le programme et de les utiliser pour l'analyse actuelle.
	Créer une fiche de travail
<b>Check plasma')</b>	Activer la caméra du plasma Le logiciel affiche en permanence l'image de la caméra avec enregistrement du plasma. Les irrégularités éventuelles, comme la formation d'un plasma en anneau pendant l'allumage, sont détectées rapidement.  L'image de la caméra peut être adaptée avec la commande de menu <b>Paramètres   Rogner image caméra</b> dans la fenêtre de la caméra.

## Barre de symboles

La barre de symboles permet un accès rapide aux fonctions principales du programme ASpect PQ. En cliquant sur l'icône, on ouvre la fenêtre avec la fonction de programme correspondante. Après l'installation, la barre de symboles se trouve sur le bord gauche de l'écran. Elle peut être déplacée à n'importe quel autre endroit en maintenant le bouton de la souris enfoncé.

Icône	Description
	Contrôler l'atomisation : <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Allumage / extinction du plasma</li> <li>▪ Réglages des débits de gaz</li> <li>▪ Contrôler la pompe pour l'alimentation en échantillon du nébuliseur</li> <li>▪ Ajustement de l'optique de transfert</li> <li>▪ Optimisation de la puissance du plasma et du gaz du gaz nébuliseur</li> </ul>
	Contrôler les fonctions du spectromètre : <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Données d'appareil</li> <li>▪ Test des corrections de longueur d'onde</li> <li>▪ Démarrer la mesure sur une longueur d'onde de test</li> <li>▪ démarrer une mesure continue pour les optimisations d'appareils</li> </ul>
	Ouvrir la fenêtre des méthodes

Icône	Description
	Spécifier le distributeur d'échantillons
	Ouvrir la fenêtre avec les données d'informations échantillons
	Ouvrir la fenêtre de séquence
	Ouvrir la fenêtre avec l'étalonnage
	Ouvrir la fenêtre avec les données du contrôle qualité
	Ouvrir la gestion des données
	Gérer les fiches de travail, ouvrir les fiches de travail enregistrées



#### 1.4.4 Éléments de commande fréquemment utilisés

Les différentes fonctions des boutons, de la souris et du clavier sont toujours utilisées au sein d'ASpect PQ avec une signification identique ou très proche.

Ces éléments de commande sont décrits ici de manière générale ; si nécessaire, vous trouverez des informations spécifiques dans la description dans la fenêtre correspondante.

##### Boutons généraux

La signification des boutons de symbole est affichée par une infobulle quand vous passez la souris sur le symbole correspondant.

Bouton	Description
OK	Fermer la fenêtre et accepter les paramètres
Annuler	Fermer la fenêtre, rejeter les modifications
Accepter	Accepter les paramètres sans fermer la fenêtre
Fermer	Fermer la fenêtre, impossible d'enregistrer les paramètres durablement
Ouvrir	Ouvrir une fenêtre de sélection pour charger un fichier ou un enregistrement
Enregistrer	Ouvrir une fenêtre de sélection pour enregistrer un fichier ou un enregistrement
	Ouvrir une fenêtre de sélection de données, p. ex. un dialogue de sélection de l'emplacement
	La fenêtre <b>Imprimer</b> s'ouvre. Le contenu de la fenêtre actuelle peut être imprimé ou exporté dans un fichier

## Tableaux

No.	Line	Calib. func.	Intercept	Weighting	Check	Unit
1	AB96.152	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
2	As188.979	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
3	As193.698	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
4	Cd214.441	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
5	Cd226.502	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
6	Cr267.716	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
7	Cu324.754	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
8	Fe259.940	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
9	Mn257.610	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
10	Ni231.604	linear	calculate	1/conc	none	µg/L

Stocks... Calibration Table




Dans certaines fenêtres, les valeurs sont entrées directement dans un tableau. En fonction du type d'entrée, la case du tableau se comporte comme un champ de saisie, une liste de sélection ou un champ de saisie pour une plage de valeurs numériques limitée avec touches flèche.

- ▶ Pour marquer une case du tableau, cliquez dans la première colonne du tableau à fond gris sur la ligne voulue. La barre de marquage peut ensuite être déplacée avec les flèches du clavier.
- ▶ Pour modifier la largeur de colonne, déplacez le curseur de la souris sur la ligne séparant deux colonnes jusqu'à ce qu'une flèche double apparaisse. Appuyez sur la touche gauche de la souris et adaptez la largeur de la colonne.

Dans les champs de saisie, les fonctions supplémentaires suivantes sont à disposition :





- ▶ F2 active le mode Édition. Dans ce mode, les flèches du clavier servent à éditer un caractère après l'autre. En appuyant de nouveau sur **F2**, on active le mode standard dans lequel les touches de curseur permettent de naviguer entre les cases.
- ▶ Les points du menu **Modifier | Copier** et **Modifier | Insérer** ou la combinaison de touches CTRL+C et CTRL+V permettent de copier du texte dans le presse-papier Windows et de le coller à nouveau.

## Boutons dans les tableaux

Bouton	Fonction
Ajouter	Ajoute une nouvelle ligne de tableau à la fin de la liste.
Insérer	Ajoute une nouvelle ligne de tableau avant une ligne de tableau marquée.
Effacer	Supprime la ligne du tableau marquée.
	Déplace la ligne du tableau marquée d'une position vers le haut. <b>Remarque :</b> Pour déplacer une ligne du tableau, celle-ci doit être marquée en entier. Cliquer pour cela dans la première colonne du tableau sur le numéro de la ligne concernée.
	Déplace la ligne du tableau marquée d'une position vers le bas.
	Reprend la valeur de la cellule sélectionnée dans toutes les lignes suivantes du tableau du même type d'échantillon (échantillon, étalons, QC, etc.). Quand la case de contrôle <b>inc.</b> (pour incrément) est active, cette valeur est automatiquement augmentée, par exemple Échantillon001, Échantillon002 ...

## Graphiques

Sur les graphiques, il est possible d'ouvrir un menu contextuel avec le bouton droit de la souris ou de copier toute la fenêtre au format graphique dans le presse-papier Windows. Plusieurs fenêtres de graphiques comprennent en outre des boutons de symboles supplémentaires :

Symbole	Fonction
	Active le mode Zoom Après activation du bouton, tirer un cadre autour de la zone du graphique à agrandir en gardant le bouton gauche de la souris appuyé, puis le relâcher.
	Désactive le mode zoom et fait repasser l'affichage à l'échelle d'origine
	Active le mode Texte Après activation du bouton, dessiner un cadre dans le graphique en gardant le bouton gauche de la souris appuyé et saisir un texte. Un double-clic sur un texte existant ouvre la fenêtre permettant de modifier ou de supprimer un texte. La combinaison Ctrl + clic droit permet de déplacer un texte existant.
	Active le mode marquage dans les représentations de courbes de signaux ou de spectres Le bouton gauche de la souris permet d'ajouter des inscriptions aux points de mesure.

## Touches de fonction

Symbole	Fonction
F1	Ouvrir une aide contextuelle
F2	Éditer les cases du tableau
F5	Démarrer l'impression de l'écran
F6	Mesurer la ligne sélectionnée de la séquence (point de menu <b>Routine   Exécuter ligne(s) de séquence...</b> )
F7	Afficher la fenêtre supplémentaire (par ex. courbe du signal)
F8	Fermer la fenêtre supplémentaire
F10	Pour utiliser le clavier, commuter entre la ligne de menu de la zone de travail et la fenêtre de résultats
F11	Poursuivre le déroulement de la mesure interrompue (point de menu <b>Routine   Continuer</b> )
F12	Démarrer et arrêter le déroulement de la mesure (points de menu <b>Routine   Démarrer la séquence...</b> et <b>Routine   Arrêt</b> )

## Utiliser l'imprimante

ASpect PQ utilise l'imprimante standard configurée dans Windows.

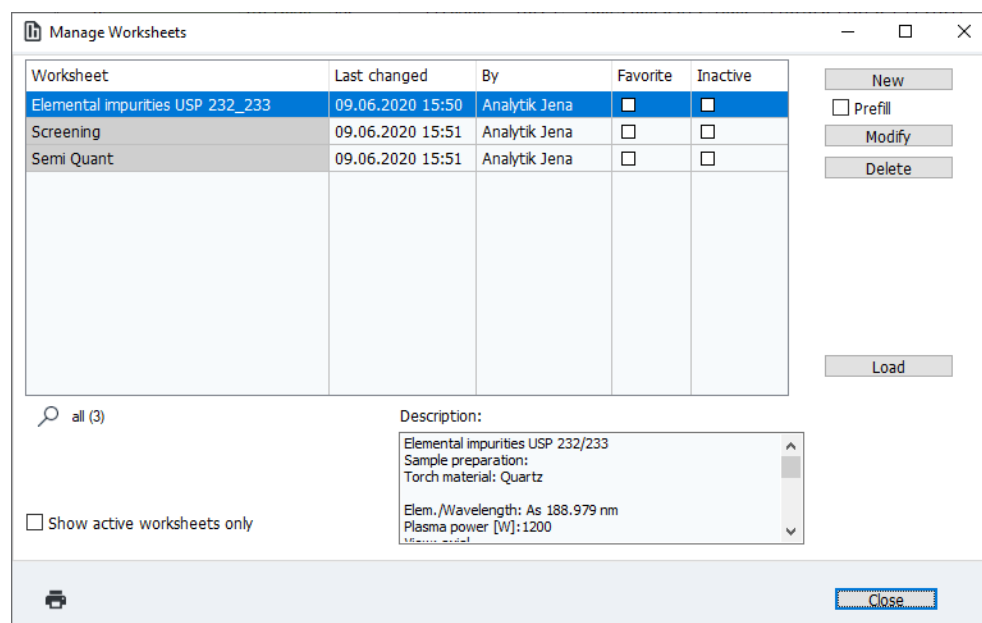
## 2 Fiches de travail

Une fiche de travail est un dossier qui regroupe une méthode et une séquence. Par ailleurs, il est possible d'enregistrer dans une fiche de travail les paramètres d'un fichier d'ID échantillon et des données de résultats. Une fiche de travail ouverte permet de lancer directement la routine de mesure.

Il est possible de créer, modifier, supprimer, désactiver ou bien ouvrir des fiches de travail. Les fonctions se trouvent dans la fenêtre **Gérer les feuilles**.

La fenêtre **Gérer les feuilles** s'ouvre en cliquant sur  dans la barre de symboles.

Éléments dans la fenêtre Gérer les feuilles



Boutons/options	Description
<b>Nouveau</b>	Créer une fiche de travail
<b>Pré-remplissage</b>	Une séquence et une méthode déjà chargées sont enregistrées.
<b>Modifier</b>	Éditer la fiche de travail sélectionnée
<b>Effacer</b>	Supprimer la fiche de travail sélectionnée
<b>Charger</b>	Ouvrir la fiche de travail sélectionnée pour une mesure
<b>Afficher les feuilles actives uniquement!)</b>	Masquer dans le tableau toutes les fiches de travail marquées comme <b>Inactif</b> .
<b>Description</b>	Description de la fiche de travail sélectionnée Ces informations sont indiquées lors de la création de la fiche de travail.

Les informations suivantes sur les fiches de travail sont indiquées dans le tableau :

Colonne du tableau	Description
<b>Feuille</b>	Nom de la fiche de travail
<b>Dernière modification!)</b>	Date de la dernière modification de la fiche de travail
<b>Par</b>	Cet utilisateur a procédé à la dernière modification. Le nom de l'utilisateur affiché dans le Quickstart est utilisé.
<b>Favori</b>	Si activée, la fiche de travail est affichée dans l'onglet <b>Favoris</b> dans la fenêtre <b>Démarrage rapide</b>

Colonne du tableau	Description
Inactif	Si activée, cette fiche de travail n'est pas affichée dans le Quickstart. Une fiche de travail marquée comme inactive peut toutefois être ouverte à partir de la fenêtre <b>Gérer les feuilles</b> .

### Voir également



📖 Commencer avec une fiche de travail [▶ 9]

## 2.1 Création d'une fiche de travail



La fenêtre **Nouvelle feuille** permet de créer une fiche de travail.

Éléments dans la fenêtre Nouvelle feuille

Champ/option	Description
<b>Nom</b>	Saisir le nom de la fiche de travail
<b>Méthode</b>	Méthode enregistrée dans la fiche de travail Ouvrir la fenêtre de la base de données avec  et sélectionnez la méthode.
<b>Séquence</b>	Séquence enregistrée dans la fiche de travail Ouvrir la fenêtre de la base de données avec  et sélectionnez la séquence.
<b>ID échant.</b>	En option, vous pouvez procéder au paramétrage permettant d'ouvrir un fichier d'ID échantillon : <b>(aucun)</b> : Aucun paramètre n'est enregistré pour le fichier d'ID échantillon.

Champ/op-tion	Description
	<p><b>Ouvrir le dossier contenant les fichiers ID échantillon:</b> Un dossier contenant le fichier d'ID échantillon est ouvert après le chargement de la fiche de travail. Cliquer sur  et sélectionner le dossier.</p> <p><b>Charger le fichier ID échantillon:</b> Un fichier d'ID échantillon est chargé automatiquement en ouvrant la fiche de travail. Cliquer sur  et sélectionner le fichier. Les caractères de substitution « * » et « ? » permettent aussi de définir un formulaire de fichier.</p>
<b>Fichier de résultats</b>	<p>En option, vous pouvez procéder au paramétrage d'enregistrement des résultats :</p> <p><b>(aucun)</b> La mesure commence par la fenêtre Démarré où le nom du fichier de résultats et l'emplacement d'enregistrement sont indiqués.</p> <p><b>Toujours créer un nouveau fichier (mettre à jour date et heure)</b> Les fichiers des résultats d'une séquence sont enregistrés à chaque fois dans un nouveau fichier. Le nom du fichier se compose d'une partie fixe (nom) et de la date et heure de la mesure. Sélectionner un dossier où enregistrer le fichier et lui donner un nom.</p> <p><b>Créer et ajouter au fichier</b> Le fichier de résultats est généré lors du premier démarrage de la séquence. Pour chaque démarrage de séquence supplémentaire, les résultats sont ajoutés à la suite de ce fichier.</p>
<b>Description</b>	<p>Dans le champ <b>Description</b>, certains paramètres d'analyse extraits de la méthode sont tout d'abord prédéfinis. Ils peuvent être modifiés librement pour donner des informations concrètes sur l'utilisation de la fiche de travail. Les informations apparaissent dans le Quickstart et dans la fenêtre <b>Gérer les feuilles</b> pour une fiche de travail sélectionnée.</p>
<b>Favori</b>	<p>Cliquer sur l'étoile permet de marquer la fiche de travail en tant que favori :</p> <p>Étoile jaune : favori Étoile grise : pas de favori</p>
<b>Inactif</b>	<p>Si activée, cette fiche de travail n'est pas affichée dans le Quickstart.</p> <p>Une fiche de travail marquée comme inactive peut être ouverte à partir de la fenêtre <b>Gérer les feuilles</b>.</p>

Spécifier une fiche de travail


- ▶ Pour créer une nouvelle fiche de travail, cliquez sur  dans la liste des symboles pour ouvrir la fenêtre **Gérer les feuilles** et cliquez sur **Nouveau**.  
Vous pouvez également cliquer sur  dans la barre d'outils.
  - ✓ La fenêtre **Nouvelle feuille** apparaît.
- ▶ Sélectionnez une méthode et une séquence.  
**Remarque :** Des méthodes supplémentaires peuvent être ouvertes par la suite en tant qu'actions dans une séquence.
- ▶ En option, vous pouvez spécifier des dispositions pour l'enregistrement du fichier de résultats, l'utilisation d'un fichier d'ID échantillon et éditer la description (voir ci-dessous).
- ▶ Quittez la fenêtre en cliquant sur **OK**.
  - ✓ La nouvelle fiche de travail apparaît dans la fenêtre **Gérer les feuilles** et peut être ouverte.

#### Voir également

-  Démarrage de la routine de mesure [▶ 68]


## 2.2 Éditer la fiche de travail

Tous les paramètres d'une fiche de travail existante peuvent être édités.

- ▶ Cliquez sur  dans la barre de symboles pour ouvrir la fenêtre **Gérer les feuilles**.
- ▶ Sélectionnez la fiche de travail et cliquez sur **Modifier**.  
La fenêtre **Modifier la feuille** apparaît.
- ▶ Procédez aux modifications de la même manière que pour créer une nouvelle fiche de travail.

## 2.3 Ouvrir une fiche de travail

Une fiche de travail peut être sélectionnée dans **Démarrage rapide** ou ouverte dans la fenêtre **Gérer les feuilles** :

- ▶ Ouvrir la fenêtre **Gérer les feuilles** en cliquant sur  dans la barre de symboles.
- ▶ Sélectionner la fiche de travail dans le tableau via un clic de la souris et cliquer sur **Charger**.
  - ✓ La fiche de travail est chargée et la séquence s'affiche dans la fenêtre principale.

Selon la configuration de la fiche de travail, il est à présent possible de relier la méthode et la séquence chargées avec la fiche de travail à un fichier d'ID d'échantillons ou de démarrer directement la mesure.



---

### REMARQUE


En ouvrant une fiche de travail, seule la version la plus récente de la méthode et de la séquence est utilisée.

L'ouverture d'une méthode ou d'une séquence différente de la fiche de travail réinitialise les paramètres du fichier de résultats et des ID échantillons dans la fiche de travail.

---

## 2.4 Supprimer la fiche de travail

Il est possible de supprimer une fiche de travail inutile.


- ▶ Cliquez sur  dans la barre de symboles pour ouvrir la fenêtre **Gérer les feuilles**.
- ▶ Sélectionnez la fiche de travail et cliquez sur **Effacer**.
  - ✓ La fiche de travail est supprimée après un message de confirmation.

## 3 Méthodes

Les paramètres nécessaires pour une analyse sont enregistrés dans les méthodes :

- Sélection des lignes d'analyse
- Paramètres pour l'exploitation de ligne
- Paramètres du plasma et du spectromètre
- Type d'alimentation des échantillons
- Paramètres d'étalonnage
- Évaluations statistiques
- Paramètres pour le contrôle et l'assurance qualité
- Paramètres pour la fourniture de valeurs de mesure

Des séquences de mesures peuvent être créées en se basant sur une méthode. Les séquences définissent l'ordre de traitement des échantillons et des actions au sein de la routine de mesure. Les méthodes enregistrées peuvent être utilisées pour des analyses avec différentes séquences.

La fenêtre **Méthode** s'ouvre en cliquant sur  dans la barre de symboles. La dernière méthode active est affichée. Si, après le démarrage d'ASpect PQ, vous n'avez chargé aucune méthode, les fenêtres affichent les préreglages ou sont vides.

### 3.1 Créer, enregistrer et charger des méthodes

Les méthodes sont enregistrées dans une base de données. Si vous avez modifié une méthode présente et enregistré la méthode modifiée sous le même nom, le logiciel crée une nouvelle version de la méthode. La méthode existante ne peut donc pas être écrasée et ainsi supprimée par erreur.


D'autres fonctions pour l'exportation, l'importation ou la suppression de méthodes sont disponibles dans la fenêtre **Données | Gestion des données**.

#### Voir également

-  Gérer les méthodes et les séquences [[▶ 125](#)]

#### 3.1.1 Créer une nouvelle méthode

Lors de la création d'une nouvelle méthode, il est possible d'utiliser les paramètres par défaut, les paramètres d'une méthode enregistrée ou les paramètres de méthode actuels.

- ▶ Sélectionnez le point de menu **Fichier | Créer nouvelle méthode**.  
Si vous n'avez encore activé aucune méthode, vous pouvez également cliquer sur .
- ▶ Activez une des trois options dans la fenêtre **Nouvelle méthode** :
  - **Basée sur les valeurs par défaut**: ouvrir la fenêtre **Méthode** seulement avec les préreglages pour l'étalonnage et les statistiques.
  - **Basée sur les paramètres actuels**: ouvrir la fenêtre **Méthode** avec les paramètres de méthode actuels.
  - **Basée sur méthode enregistrée**: sélectionner une méthode dans la fenêtre de la base de données **Ouvrir méthode**.
- ▶ Confirmez la sélection avec **OK**.
  - ✓ La fenêtre **Méthode** apparaît avec les préreglages sélectionnés.

- ▶ Spécifiez la méthode dans les différents onglets et procédez aux optimisations nécessaires.
- ▶ Enregistrez les paramètres de méthode réglés à l'aide du bouton **OK** ou **Accepter**.
  - ✓ La méthode peut maintenant être enregistrée ou utilisée pour la prochaine analyse. Pour l'analyse, créer une séquence se basant sur la méthode et remplir éventuellement un tableau d'ID échantillon. Commencer ensuite la mesure.

### Voir également

📄 Spécifier les paramètres de méthode [▶ 25]

## 3.1.2 Enregistrer méthode

Après la saisie des paramètres de la méthode, enregistrer la méthode dans la base de données. Cela permet de charger plus tard la méthode pour d'autres mesures ou de l'intégrer à une fiche de travail. Les méthodes sont enregistrées dans la fenêtre **Enregistrer méthode** de la base de données. Il est possible de saisir d'autres informations afin de catégoriser et de retrouver plus facilement la méthode.

Éléments dans la fenêtre Enregistrer méthode

Option	Description
<b>Nom</b>	Nom de la méthode
<b>Cat.</b>	Catégorie (trois caractères) pour une autre désignation et un autre classement des méthodes  Cette entrée est en option. Si le module de conformité FDA 21 CFR Part 11 est installé, vous pouvez identifier une méthode comme validée avec des catégories sélectionnées. Vous pouvez définir les catégories pour les méthodes validées dans les réglages de la gestion des utilisateurs.
<b>Tableau</b>	Aperçu des méthodes disponibles
<b>Trier par</b>	Les options dans ce groupe permettent de trier la liste des méthodes. Lorsque l'option <b>Version actuelle uniquement</b> est activée, seule la version la plus récente des méthodes portant le même nom s'affiche.
<b>Utiliser en routine</b>	Quand elle est activée, la méthode est disponible dans le mode de programme <b>Routine</b> . La sélection du mode de programme se fait dans la fenêtre <b>Démarrage rapide</b> .

Option	Description
	Si le « Modul 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ » en option est installé, alors l'option n'est pas disponible.
<b>Méthodes pré-définies</b>	Enregistrer les courbes d'étalonnage disponibles avec la méthode Les courbes d'étalonnage peuvent être utilisées pour d'autres analyses.
<b>Description</b>	En option, entrer des explications plus détaillées sur la méthode  Cliquer sur <b>...</b> permet d'ouvrir une liste avec des remarques prédéfinies. La gestion de ces remarques se fait dans la fenêtre <b>Données   Remarques prédéfinies</b>

Enregistrer méthode

- ▶ Dans la fenêtre **Méthode**, cliquez sur **Enregistrer** ou sélectionnez le point de menu **Fichier | Enregistrer | Méthode**.
  - ✓ La fenêtre **Enregistrer méthode** apparaît.
- ▶ Saisissez le nom de la méthode et sélectionnez d'autres paramètres.
  - ✓ La méthode est enregistrée dans la base de données. En cas d'utilisation d'un nom de méthode existant, une nouvelle version est enregistrée dans la base de données.



## REMARQUE

La méthode est également enregistrée dans le fichier de résultats de la mesure. Après avoir accédé au fichier de résultats, vous pouvez restaurer la méthode à partir de celui-ci. D'autres fonctions de gestion des méthodes sont disponibles dans la fenêtre **Données | Gestion des données**.


### Voir également

- 📖 Configurer les paramètres généraux de la gestion des utilisateurs [▶ 152]
- 📖 Fenêtre Démarrage rapide [▶ 8]
- 📖 Gérer les méthodes et les séquences [▶ 125]

### 3.1.3 Charger la méthode

Des méthodes enregistrées peuvent être chargées et une routine de mesure peut être lancée avec une séquence. Il est possible de charger les paramètres de la méthode à partir de la base de données de méthodes ou d'un fichier de résultats existant.


Charger à partir de la base de données

- ▶ Ouvrir la fenêtre de la base de données de l'une des manières suivantes :
  - Dans la barre d'outils, cliquer sur le symbole de dossier  à côté du champ **Méthode**.
  - Sélectionner le point de menu **Fichier | Ouvrir méthode**.
  - Dans la fenêtre **Méthode**, cliquer sur **Ouvrir**.
- ▶ Sélectionner dans la liste la méthode voulue.
- ▶ Dans le champ **Cat.**, vous pouvez restreindre les méthodes affichées en sélectionnant une catégorie. Si vous voulez voir toutes les méthodes, effacez l'entrée dans le champ **Cat.**
- ▶ Cocher la case **Version actuelle uniquement** pour afficher seulement la méthode ayant la version la plus élevée s'il y a plusieurs méthodes du même nom.

- ▶ Quitter la fenêtre **Méthode** avec **OK**.
  - ✓ Vous avez chargé la méthode souhaitée. La méthode est affichée dans la barre d'outils sous **Méth..**

Charger à partir du fichier de résultats

Il est possible d'extraire la méthode d'un fichier de résultats affiché dans la fenêtre principale.

- ▶ Faire un clic droit sur l'un des échantillons.
- ▶ Dans le menu contextuel, sélectionner le point **Charger la méthode à partir des résultats**.
- ▶ Après qu'il vous a été demandé si les paramètres actuels de la méthode devaient être écrasés, vous pouvez afficher la méthode en cliquant sur .



## 3.2 Spécifier les paramètres de méthode

Dans la fenêtre **Méthode**, spécifier les paramètres de mesure et d'exploitation des résultats pour une analyse.

Cliquer sur  pour ouvrir la fenêtre **Méthode**.

Boutons dans la fenêtre Méthode

Des boutons toujours disponibles se trouvent en bas de la fenêtre.

Bouton	Description
Ouvrir	Ouvrir une méthode enregistrée
Enregistrer	Enregistrer les paramètres de méthode actuels
	Imprimer les paramètres de méthode
	Consulter les propriétés de la méthode
OK	Accepter les paramètres dans la fenêtre et fermer la fenêtre
Accepter	Accepter les paramètres dans la fenêtre, mais garder la fenêtre ouverte
Annuler	Ne pas accepter les paramètres modifiés et fermer la fenêtre

### 3.2.1 Spécifier des lignes d'analyse (fenêtre Méthode | Raies)

Dans la fenêtre **Méthode | Raies**, sélectionner les lignes d'analyse pour la mesure.

## Fenêtre Méthode | Raies

Method

Lines Plasma Sample introduction Evaluation Calibration Statistics QCS QCC Output

No.	Elem.	Wavel. [nm]	Line	Type	Principal line	Read time [s]	Autointegr. Range	Order
1	<input checked="" type="checkbox"/> Al	396.1520	Al396.152	Analyte		3.0	Peak	1
2	<input checked="" type="checkbox"/> As	188.9790	As188.979	Analyte		10.0	Peak	2
3	<input type="checkbox"/> As	193.6980	As193.698	Analyte		10.0	Peak	3
4	<input checked="" type="checkbox"/> Cd	214.4410	Cd214.441	Analyte		3.0	Peak	4
5	<input type="checkbox"/> Cd	226.5020	Cd226.502	Analyte		3.0	Peak	5
6	<input checked="" type="checkbox"/> Cr	267.7160	Cr267.716	Analyte		1.0	Peak	6
7	<input checked="" type="checkbox"/> Cu	324.7540	Cu324.754	Analyte		1.0	Peak	7
8	<input checked="" type="checkbox"/> Fe	259.9396	Fe259.940	Analyte		1.0	Peak	8
9	<input checked="" type="checkbox"/> Mn	257.6100	Mn257.610	Analyte		1.0	Peak	9
10	<input checked="" type="checkbox"/> Ni	231.6036	Ni231.604	Analyte		1.0	Peak	10

Line

Append... Insert... Delete Modify... ★

Multi-line evaluation...





Assign internal std....

Delete lines not in use

Open... Save... OK Accept Cancel

## Paramètres du tableau

Colonne du tableau	Description
N°	Ordre des lignes sélectionnées dans le tableau
<input type="checkbox"/> <input checked="" type="checkbox"/>	<p>Disponible uniquement dans le mode <b>Outils</b> (pas avec le « Modul 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ »)</p> <p>Le marquage facilite le développement de la méthode, dans laquelle plusieurs lignes d'un élément sont mesurées puis la ligne appropriée est sélectionnée. Si une ligne d'éléments est cochée, celle-ci est utilisée et mesurée pour l'analyse. Les lignes non cochées sont exclues de l'analyse suivante et ne sont pas mesurées. Les lignes non cochées ne sont pas encore explicitement effacées du tableau de lignes.</p>
Élém.	Symbole d'éléments de l'élément à analyser
Raie	Afficher la longueur d'onde de la ligne d'analyse en nm
Raie	<p>Désignation de la ligne d'analyse</p> <p>Dans le pré-réglage, la désignation de la ligne est constituée du symbole de l'élément et de la longueur d'onde. La désignation peut être librement éditée et doit être claire.</p>
Type	Sélection entre <b>Analyte</b> (ligne à analyser) et <b>Étal.int.</b> (ligne de référence interne)
Raie principale	<p>Sélection et affichage de la ligne d'analyse avec laquelle la ligne actuelle est mesurée en mesure simultanée</p> <p>La durée de mesure peut être raccourcie en saisissant les signes proches avec un réglage du spectromètre. Cliquer sur <b>Regrouper les raies!</b> permet d'afficher les combinaisons possibles.</p>
Temps inté.	Durée de mesure totale pour une ligne d'analyse
Intégr.auto Plage	<p>Sélectionner automatiquement la durée d'intégration de manière à ce que le détecteur CCD soit éclairé de manière optimale et qu'il n'y ait pas de surexposition</p> <p>En cas de surexposition, la charge non saisie par un pixel passe aux pixels voisins et entraîne une erreur de mesure (effet blooming). Pour la détermination de la durée d'intégration, sélectionner la plage considérée :</p>

Colonne du tableau	Description
	<p><b>Spectre</b> La durée d'intégration est optimisée sur la crête la plus haute dans la plage de spectre de la ligne. Cette option est préréglée et permet d'obtenir un résultat sûr.</p> <p><b>Pic</b> Le temps d'intégration est optimisé sur la crête de l'analyse. Lors de la sélection de cette option, la plage dynamique du détecteur CCD est utilisée de manière optimale pour l'analyse. Cependant, veiller à ce qu'il n'y ait pas une crête plus élevée à proximité immédiate du pixel de l'analyse. Dans ce cas, le résultat de la mesure risquerait d'être faussé par l'effet blooming.</p> <p><b>Détecteur</b> La durée d'intégration est adaptée à la crête la plus élevée sur le détecteur. Avec cette option, aucune zone du détecteur n'est privée d'éclairage, mais dans certains cas, les pixels de la crête de l'analyse ne sont pas éclairés de manière optimale.</p>
<b>Ordre</b>	<p>Ordre dans l'analyse</p> <p>L'ordre de mesure peut être librement défini.</p> <p><b>Remarque :</b> Après le marquage d'un nombre, en cliquant sur , on attribue les nombres aux lignes suivantes par ordre croissant. Vous pouvez ainsi ordonner des lignes sélectionnées (lignes d'éléments) dans le tableau avec  et , entrer « 1 » dans la première ligne sous le numéro d'ordre sous ordre et attribuer avec  l'ordre croissant de mesure à toutes les autres lignes d'analyse.</p>

Boutons dans le groupe Raies

Les boutons **Ajouter**, **Insérer** et **Modifier** permettent d'ajouter d'autres lignes d'analyse ou de modifier une ligne sélectionnée. Un clic sur l'un de ces boutons ouvre la fenêtre **Sélectionner élément/raie** pour effectuer d'autres entrées. Le bouton **Effacer** permet de supprimer une ou plusieurs lignes d'analyse sélectionnées de la méthode.

Autres boutons et cases

Bouton	Description
<b>Regrouper les raies')</b>	<p>Trouver des combinaisons de lignes d'analyse, qui peuvent être saisies avec un réglage du spectromètre</p> <p>Ces lignes d'analyse peuvent être mesurées simultanément.</p>
<b>Attribuer étal.int.</b>	Relier les analyses internes à un étalon interne et les corriger
<b>Supprimer les raies non utilisées</b>	<p>Disponible uniquement dans le mode de programme <b>Outils</b> (pas avec le « Modul 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ »)</p> <p>Supprimer de la liste de méthode toutes les lignes non cochées.</p> <p><b>Remarque :</b> Les méthodes ne peuvent être enregistrées et utilisées que comme méthodes de routine si toutes les lignes sont utilisées dans le tableau de lignes.</p>
<b>Optim. ordre de mesure</b>	<p>Trier automatiquement les lignes d'analyse en fonction des longueurs d'onde et des conditions de mesure, de sorte à réduire le temps de mesure total</p> <p>Lorsque la case est cochée, aucun tri manuel des lignes d'analyse n'est possible.</p>

Bouton	Description
	<p><b>Remarque :</b> La durée de mesure dépend du nombre et du tri des lignes d'analyse ainsi que des conditions de mesure. Ainsi, la sélection des paramètres similaires pour le plasma et l'optique de transfert permet de réduire la durée de mesure pour de nombreuses lignes d'analyse.</p>

**Voir également**

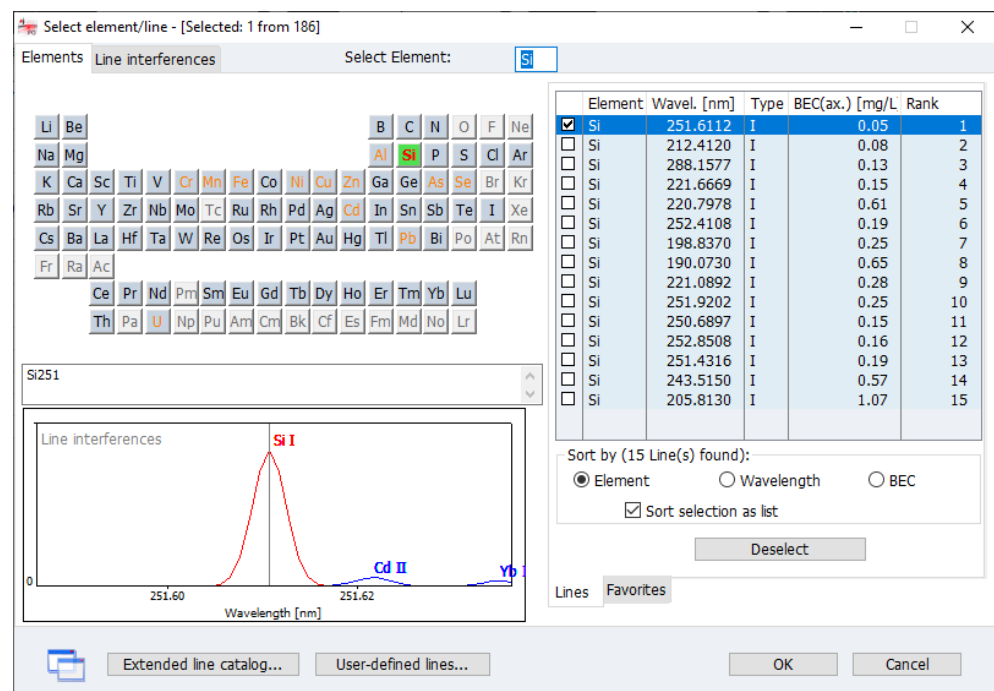
- 📖 Mesurer plusieurs lignes en même temps [▶ 30]
- 📖 Éléments de commande fréquemment utilisés [▶ 15]
- 📖 Définir des étalons internes [▶ 32]

### 3.2.1.1 Insérer des lignes d'analyse dans le tableau de lignes

La sélection des lignes d'analyse se fait dans la fenêtre **Sélectionner élément/raie**.

Éléments dans la fenêtre Sélectionner élément/raie

L'onglet **Éléments** contient le système périodique avec tous les éléments analysables avec la technique ICP OES (avec boutons gris foncé et symboles d'éléments noirs). Les éléments « grisés » ne sont pas disponibles. L'onglet **Interférences de la raie** montre pour une ligne sélectionnée les interférences possibles connues avec les sensibilités relatives.



Le tableau **Favoris** comprend une sélection de lignes avec les applications recommandées (mots-clés). Si ces lignes sont sélectionnées, les paramètres optimisés de la méthode sont simultanément transférés dans la méthode. Il est également possible d'ajouter ses propres lignes à ces favoris.

Le tableau **Raies** comprend toutes les lignes sélectionnables avec les indications suivantes :

Colonne du tableau	Description
Élément	Élément
Long. d'onde	Longueur d'onde d'analyse en nm

Colonne du tableau	Description
Type	Affichage du type d'atomisation : I : ligne d'atomes II : ligne d'ions
BEC	Valeur BEC caractéristique de la ligne d'analyse  La valeur BEC (concentration équivalente de fond) est la concentration de l'analyte qui génère une intensité équivalente au fond. Une valeur plus faible correspond ainsi à une sensibilité plus élevée.  Les valeurs BEC ont été déterminées dans les conditions suivantes : observation axiale, puissance 1200 W, débit de gaz plasma 12 L/min, débit de gaz auxiliaire 0,5 L/min, débit de gaz nébuliseur 0,6 L/min.
Rang	Rang dans la recommandation de la ligne d'analyse  La recommandation d'une ligne d'analyse dépend à la fois de la sensibilité et des perturbations possibles par des lignes voisines d'autres éléments. Plus une ligne se trouve en début de classement, meilleures sont les chances d'obtenir de bons résultats avec la ligne d'analyse.

L'option **Élément, Raie** ou **BEC** vous permet de trier le tableau de lignes par ordre croissant de symbole chimique, de longueur d'onde ou de BEC.

Si l'option **Trier la sélection comme une liste** est cochée, les lignes sont insérées dans le tableau de lignes dans l'ordre de classement de la liste (**Trier par**). Si cette option est désactivée, les lignes sont insérées dans l'ordre du marquage.

Sélectionner des lignes

- ▶ Dans la fenêtre **Méthode | Raies**, cliquez sur **Ajouter** ou **Insérer**.
  - ✓ La fenêtre **Sélectionner élément/raie** apparaît.
- ▶ Si vous cliquez sur un des symboles d'élément gris foncé dans le système périodique, seules les lignes de l'élément sélectionné sont affichées dans les tableaux **Raies** et **Favoris**.  
Vous pouvez également entrer le symbole d'élément dans le champ **Sélectionner élément**.  
Supprimer l'entrée dans le champ **Sélectionner élément** pour afficher la liste d'éléments complète dans le tableau de lignes.
- ▶ Dans le tableau **Favoris**, marquer les lignes selon leur utilisation ou cocher dans le tableau **Raies** les cases de contrôle des lignes voulues.
- ▶ Passer à l'onglet **Interférences de la raie** et vérifier l'absence d'interférences connues au niveau des lignes sélectionnées.
- ▶ Continuer jusqu'à avoir sélectionné les lignes pour chaque analyte. Quittez la fenêtre avec **OK**.
  - ✓ Les lignes marquées sont reprises dans la fenêtre **Méthode | Raies**.

**Remarque :**

Pendant l'élaboration de la méthode, sélectionner plusieurs lignes pour chaque analyte.

Catalogue amélioré de lignes

La liste de lignes comprend après l'installation une présélection de lignes d'analyse. Celle-ci peut être complétée par des lignes d'analyse du catalogue de lignes élargi.

- ▶ Dans la fenêtre **Sélectionner élément/raie | Éléments**, cliquer sur **Raies supplémentaires**.
- ▶ Marquer les lignes voulues en cliquant dans la liste.  
En cliquant de nouveau sur une ligne donnée, vous supprimez le marquage. Supprimer toutes les sélections avec **Désélectionner**.

- ▶ Transférer la sélection dans la liste de lignes en cliquant sur **Ajouter à la table de raies**.



Créer et modifier ses propres lignes d'analyse

## REMARQUE

Les lignes ajoutées depuis le catalogue de lignes élargi ne peuvent plus être supprimées du catalogue.

Il est possible de créer ses propres lignes d'analyse et de les utiliser pour l'analyse.

- ▶ Dans la fenêtre **Sélectionner élément/raie**, cliquer sur **Raies personnalisées**.
- ▶ Dans la fenêtre **Modifier les raies**, entrer les données pour **Elément** et **Raie**, puis les sélectionner **Type** dans le champ de liste.
- ▶ Transférer les entrées avec **Ajouter** dans votre propre liste de lignes.
- ▶ Un clic sur **Fermer** permet de reprendre vos propres lignes dans la liste de lignes.

Vous pouvez modifier certaines lignes ou les supprimer à nouveau de la liste de lignes.

- ▶ Pour modifier une ligne dans votre propre liste, la sélectionner via un clic de la souris dans la liste de la fenêtre **Modifier les raies**.  
Entrer les nouvelles données de ligne puis cliquer sur **Modifier**.
- ▶ Vous pouvez retirer une entrée sélectionnée dans la liste en cliquant sur **Effacer**.

### Voir également

- 📖 Définir vos propres lignes favorites [▶ 31]

### 3.2.1.2 Mesurer plusieurs lignes en même temps

Les lignes saisies avec un réglage du spectromètre peuvent être mesurées simultanément, le temps d'analyse étant ainsi réduit. La fonction **Regrouper les raies'** vous permet de trouver ces lignes dans la méthode actuelle et de les combiner pour l'analyse.

- ▶ Dans la fenêtre **Méthode | Raies**, cliquez sur **Regrouper les raies'**.  
La fenêtre portant le même nom apparaît avec un aperçu des combinaisons de lignes possibles.

Éléments dans la fenêtre Regrouper les raies')

La fenêtre **Regrouper les raies'** liste les combinaisons de lignes possibles. Un diagramme à barres montre la position des lignes sur le détecteur pour la ligne de la liste sélectionnée.

Multi-line evaluation						
Principal line		Additional line		Meas.wavel.	Status	
Line	Wavel. [nm]	Line	Wavel. [nm]	[nm]		
<input checked="" type="checkbox"/>	P178.224	178.2240	I178.218	178.2180	178.2210	OK
<input checked="" type="checkbox"/>	S182.565	182.5650	B182.581	182.5810	182.5730	OK
<input checked="" type="checkbox"/>	Ge265.157	265.1568	Ge265.117	265.1172	265.1606	OK
<input checked="" type="checkbox"/>	Ge265.157	265.1568	Hg265.204	265.2040	265.1606	OK


Line positions on CCD [nm]  Show all line positions

Colonnes du tableau / Bouton	Contenu
Cases de contrôle	Lorsqu'activées, la combinaison de lignes concernée est mesurée simultanément dans la méthode.
<b>Raie principale</b>	Les paramètres de mesure de la <b>Raie principale</b> sont utilisés pour la mesure de la combinaison de lignes. <b>Raie</b> Désignation de la ligne principale <b>Long. d'onde</b> Longueur d'onde en nm de la ligne principale
<b>Raie additionnelle</b>	<b>Raie</b> Désignation de la ligne supplémentaire à analyser <b>Long. d'onde</b> Longueur d'onde en nm de la ligne supplémentaire à analyser
<b>Long. d'onde.</b>	Longueur d'onde de mesure en nm (point médian de la ligne du détecteur)
<b>Statut</b>	Remarques
<b>Aucune raie combinée</b>	Supprimer toutes les sélections Aucune ligne n'est mesurée avec d'autres dans la méthode.
<b>Intervertir la priorité des raies</b>	Intervertir dans une combinaison de lignes la ligne principale et la ligne supplémentaire

Pour une combinaison de lignes, la ligne principale et la ligne supplémentaire sont déterminées automatiquement. Les lignes supplémentaires reprennent l'heure d'analyse et les paramètres de plasma de la ligne principale. Cette attribution peut être inversée avec **Intervertir la priorité des raies**.


### 3.2.1.3 Définir vos propres lignes favorites

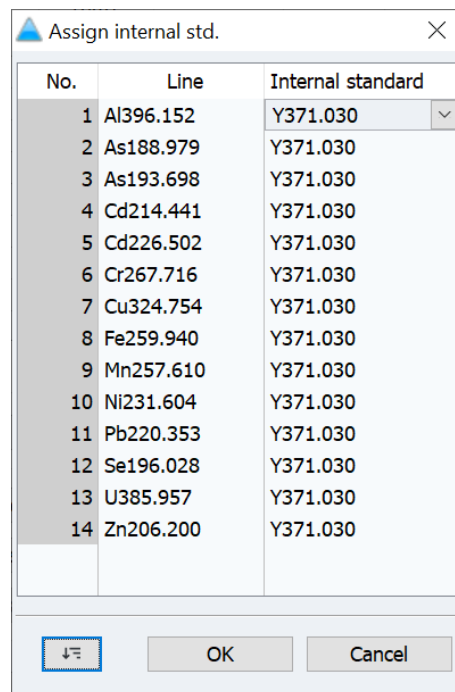
Vous pouvez ajouter des lignes d'analyse privilégiées à une liste de favoris avec des indications sur l'application privilégiée. Les données sur la ligne d'analyse sont enregistrées sous cette entrée avec tous les paramètres de méthode relatifs à la ligne. La liste de favoris est disponible à chaque sélection de lignes d'éléments.

- ▶ Sélectionner la ligne dans le tableau de la fenêtre **Méthode | Raies** et cliquer sur .
- ▶ Dans la fenêtre **Ajouter aux favoris**, modifier la désignation de la ligne.
- ▶ Dans le champ **Commentaire**, vous pouvez d'autres notes sur la ligne.
- ▶ Sélectionnez dans la liste **Mots-clés** une ou plusieurs applications.  
Vous pouvez compléter la liste par vos propres entrées. Les mots-clés prédéfinis sont marqués en bleu.
  - ✓ La liste reste disponible dans la fenêtre **Sélectionner élément/raie**.

### 3.2.1.4 Définir des étalons internes

Les étalons internes servent principalement à corriger les perturbations non spectrales, par exemple résultant du transport des échantillons. Vous pouvez définir les étalons internes dans le tableau de lignes de la fenêtre **Méthode | Raies**.

- ▶ Ajouter la ligne d'analyse que vous voulez utiliser comme étalon interne dans le tableau de lignes et sélectionner dans la colonne du tableau **Type** l'option **Étal.int..**
- ▶ Cliquez sur **Attribuer étal.int..**  
La fenêtre **Attribuer étal.int.** apparaît.
- ▶ Attribuer les lignes d'analyse souhaitées au ou aux étalon(s) interne(s) dans le tableau. Pour ce faire, cliquer sur la ligne correspondante dans la colonne **Étalon interne** et sélectionner l'étalon interne dans la liste.
- ▶ Avec un clic , vous transférez les réglages pour une ligne d'analyse sur toutes les lignes suivantes dans le tableau.
- ▶ Les réglages sont repris dans la méthode avec **OK**.



### 3.2.2 Régler les paramètres pour le plasma et l'optique de transfert (onglet Méthode | Plasma)

Dans la fenêtre **Méthode | Plasma**, effectuer les réglages suivants :

- Début de gaz pour le plasma dans la torche
- Sélection de la direction d'observation du plasma et son ajustement

Éléments dans la fenêtre  
Méthode | Plasma

Oxygen flow [L/min]: 0.00

No.	Line	Power [W]	Plasma gas [L/min]	Aux. gas [L/min]	Nebulizer gas [L/min]	Direction	x-offset [mm]	y-offset [mm]
1	A396.152	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
2	As188.979	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
3	As193.698	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
4	Cd214.441	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
5	Cr226.502	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
6	Cr267.716	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
7	Cu324.754	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
8	Fe259.940	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
9	Mn257.610	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
10	Ni231.604	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0

Buttons: Open..., Save..., OK, Accept, Cancel

Colonne du tableau	Description
N°	Ordre des lignes sélectionnées dans le tableau
Raie	Désignation de la ligne d'analyse
Puissance	<p>Puissance efficace du plasma en Watt</p> <p>Une augmentation de la puissance du plasma améliore la stabilité du plasma, par ex. en cas de solvants organiques ou d'échantillons à forte teneur en sel. Dans le même temps, une puissance de plasma élevée nécessite un débit de gaz plasma élevé afin d'éviter que la torche ne fonde ou soit endommagée.</p>
Plasma	<p>Débit de gaz plasma en L/min</p> <p>Le gaz plasma s'écoule entre les tubes de quartz intérieur et extérieur de la torche. Il est amené à l'état de plasma via l'induction de la bobine et refroidit simultanément le tube extérieur de la torche. Un débit de gaz plasma élevé peut améliorer la durée de vie de la torche.</p>
Auxiliaire	<p>Débit de gaz auxiliaire en L/min</p> <p>Le gaz auxiliaire s'écoule entre le tube de quartz intérieur et l'injecteur. Il permet la formation du canal de mesure et presse le plasma à distance de la pointe de l'injecteur. Un débit de gaz auxiliaire élevé est nécessaire en cas de solutions de mesure avec des solvants organiques ou des concentrations en sel élevées.</p>
Nébuliseur	<p>Débit de gaz nébuliseur en L/min</p> <p>Le gaz de nébuliseur est amené au nébuliseur. Il nébulise l'échantillon et l'amène à travers la chambre de nébulisation et l'injecteur dans le plasma.</p>
Visée	<p>Direction d'observation du plasma</p> <p>L'optique de transfert permet de coupler le rayonnement émis par le plasma depuis le plasma dans deux sens dans le spectromètre. Selon la ligne d'analyse, il est possible de sélectionner le sens d'observation.</p> <p><b>radial</b></p> <p>L'observation du plasma a lieu depuis le côté à une certaine hauteur au-dessus du bord supérieur de la bobine.</p>

Colonne du tableau	Description
	<p><b>axial</b></p> <p>L'observation a lieu depuis le haut le long de l'axe longitudinal du plasma.</p> <p>Les deux sens d'observation peuvent également être affaiblis. À haute intensité, le débordement du détecteur est ainsi évité et la zone d'analyse est agrandie.</p>
<b>Offset x</b> et <b>Offset y</b>	<p>Correction de l'optique de transfert en mm</p> <p>Le déplacement de l'optique le long du canal de mesure (en cas d'observation radiale) depuis le milieu du canal de mesure (en cas d'observation radiale et axiale) permet de scanner les différences de température et ainsi de détecter la température d'émission optimale de la ligne d'analyse.</p> <p>Vous pouvez laisser déterminer automatiquement la valeur optimale pour une ligne dans la fenêtre <b>Plasma</b>.</p>



## REMARQUE

Pendant la première phase du développement de la méthode (sélection des lignes adéquates), les paramètres de plasma préréglés sont suffisants. Il est possible de modifier ces paramètres après avoir défini les lignes d'analyse, les corrections de fond nécessaires et déterminé la plage de linéarité afin d'optimiser encore mieux les paramètres de la méthode.

Utiliser de l'oxygène

Pour des applications spéciales, par exemple avec des matrices organiques, on peut utiliser de l'oxygène comme gaz complémentaire.

- ▶ Dans le champ **Débit oxygène**, régler le débit de gaz.

### Voir également

- 📖 Ajustement et optimisation du plasma [▶ 109]

### 3.2.3 Spécifier l'alimentation des échantillons (fenêtre Méthode | Débit d'échantillon)

Dans la fenêtre **Méthode | Débit d'échantillon**, effectuer les réglages suivants pour l'appareil d'analyse :

- Débits de pompe de la pompe sur l'appareil d'analyse
- Utilisation du distributeur d'échantillons
- Options de rinçage

Fenêtre Méthode | Débit d'échantillon

Période de pompage sur l'appareil ICP-OES

Option	Description
<b>Mode normal</b>	Vitesse normale de la pompe à laquelle l'échantillon est transporté pendant l'analyse  Cette vitesse doit permettre de garantir une nébulisation optimale de l'échantillon et se référer au débit de pompage recommandé du nébuliseur utilisé.
<b>Mode rapide</b>	Vitesse augmentée permettant de rincer (avec du liquide de rinçage) entre les pauses de mesure et de transporter l'échantillon jusqu'au nébuliseur  Quand cette vitesse est activée, le temps de transport est optimisé. Cependant, cette vitesse ne doit pas être utilisée pendant le temps de mesure car elle ne garantit plus une nébulisation homogène de l'échantillon.
<b>Délai stabilisation</b>	Temps entre le début de l'aspiration et le démarrage effectif de la mesure  Cette durée est nécessaire pour rincer tout le trajet d'échantillon y compris la torche avec l'échantillon et ainsi garantir une atomisation stable.  <b>Remarque :</b> Le temps de temporisation comprend également le temps paramétré dans le champ <b>Délai mode rapide</b> .
<b>Délai mode rapide</b>	Durée pendant laquelle l'échantillon est transporté avec un débit de pompe élevé pendant le temps de temporisation



## REMARQUE

Dans la fenêtre **Méthode | Débit d'échantillon**, régler le débit de pompage de la pompe tubulaire de l'appareil ICP-OES. Vous pouvez régler le débit de pompe sur le distributeur d'échantillons pour le refoulement du liquide de rinçage avec le bouton rotatif au-dessus de la pompe sur le distributeur d'échantillons ou, avec le passeur d'échantillons Cetac, dans la fenêtre **Passeur | Paramètres tech.**

Utiliser le passeur d'échantillon

Si un distributeur d'échantillons est utilisé pour l'analyse, activer l'option **Passeur**. Via **Paramètres**, vous arrivez aux réglage du distributeur d'échantillons.

Laver et contrôle du nettoyage Pendant le traitement d'une séquence, vous pouvez régler les étapes de rinçage après chaque mesure d'échantillon. Le liquide de rinçage est prélevé lors de la mesure automatique dans la coupelle de rinçage du distributeur d'échantillons. Lors de la mesure manuelle, il vous est demandé de préparer le liquide de rinçage.

Si la concentration de l'échantillon provoque un dépassement de la courbe d'étalonnage de plus de 10 % le trajet d'échantillon et la torche peuvent être rincés pour supprimer les contaminations de la mesure précédente. Pendant le rinçage, l'intensité est mesurée pour le contrôle du résultat du nettoyage et le rinçage se poursuit jusqu'à ce que la limite de contrôle soit atteinte. Le contrôle automatique du nettoyage est recommandé après la mesure d'échantillons hautement concentrés.

Option	Description
<b>Rinçage</b>	<b>arrêt</b> Le lavage est éteint. Il n'y a pas de lavage automatique. <b>Entre chaque éch.</b> Lavage après chaque échantillon, mais pas au sein d'une série statistique
<b>Temps de rinçage</b>	Pendant cette période, le trajet d'échantillon est rincé jusqu'à la torche.
<b>Mode rapide pendant le rinçage</b>	L'étape de rinçage est uniquement effectuée avec le temps de marche rapide. Si l'option est désactivée, le rinçage est d'abord effectué en marche rapide pendant le temps de marche rapide ( <b>Délai mode rapide</b> ) indiqué et en marche normale pour le reste du temps.
<b>Contrôle rinçage</b>	Si elle est activée, un nettoyage contrôlé est effectué automatiquement en cas de dépassement de la concentration
<b>Limite (Ints.)</b>	Valeur du niveau de signal qui doit être atteint avant la mesure de la solution suivante
<b>Raie</b>	Ligne d'éléments prises en compte en tant que ligne de contrôle

### 3.2.4 Évaluer les pics (fenêtre Méthode | Evaluation)

Dans la fenêtre **Méthode | Evaluation**, définir les paramètres pour l'évaluation des pics.



#### REMARQUE

Dans le développement de la méthode, vous déterminez les paramètres optimaux pour la correction du fond de la ligne d'analyse dans la fenêtre **Modifier les spectres | Evaluation** et vous les transférez ensuite dans la méthode.

## Fenêtre Méthode | Evaluation

No.	Line	Range [nm]		Peak eval.	Poly.deg.	Correction	BGC fit	BGC pixel pos.
		low.	upp.					
1	Al396.152	-0.22	0.22	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
2	As188.979	-0.12	0.12	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
3	As193.698	-0.12	0.12	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
4	Cd214.441	-0.13	0.13	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
5	Cd226.502	-0.13	0.13	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
6	Cr267.716	-0.16	0.16	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
7	Cu324.754	-0.19	0.19	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
8	Fe259.940	-0.15	0.15	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
9	Mn257.610	-0.15	0.15	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15
10	Ni231.604	-0.14	0.14	3 pixel	auto	off	dynamic	-15,15

Spectral corrections... (none)

IEC factors... (none)

Open... Save... OK Accept Cancel

Colonne du tableau	Description
N°	Ordre des lignes sélectionnées dans le tableau
Raie	Désignation de la ligne d'analyse
Plage	<p><b>inf.</b> Limite inférieure de la plage de longueur d'onde pour l'exploitation spectrale relative à la longueur d'onde</p> <p><b>sup.</b> Limite supérieure de la plage de longueur d'onde relative à la longueur d'onde de mesure</p>
Degré poly.	<p>Sélection du degré de polynôme de la courbe de régression en correction de fond statique</p> <p>Les degrés de polynôme 0, 1, 2, et 3 ou la recherche automatique du degré de polynôme sont disponibles (Option <b>auto</b>).</p>
Evaluation Pic	<p>Sélection de l'évaluation des pics</p> <p><b>pixels</b> nombre de pixels pris en compte pour l'exploitation de l'intensité et à partir desquels les valeurs de mesure sont finalement constituées. Les intensités des pixels sont additionnées. De cette façon, il est possible de réduire les inexactitudes d'analyse dues aux variations de la position de crête. Nombre recommandé de pixels de sélection : 3</p> <p><b>Hauteur</b> Interpolation du maximum de crête</p> <p><b>Personnalisé</b> Libre choix du pixel d'exploitation, p. ex. pour l'exploitation de multiplets. Exemple d'entrée : 50,120-130 constitue la somme des valeurs mesurées des pixels 50 et 120 à 130</p>
Correction	<p>Algorithme pour la correction spectrale (voir ci-dessous).</p> <p><b>arrêt</b> Ne pas effectuer de correction spectrale</p> <p><b>LSM</b> Correction spectrale avec la méthode du plus petit carré du coefficient</p>

Colonne du tableau	Description
	<b>IEC</b> Correction spectrale avec correction inter-éléments (Inter Element Correction)
<b>Correction fond</b>	Adapter le pixel pour la correction de fond <b>arrêt</b> Ne procéder à aucune correction de fond <b>dynamique</b> Les pixels pour la correction du fond sont trouvés automatiquement par le logiciel. <b>statique</b> Les pixels pour la correction du fond sont préalablement donnés par l'utilisateur dans la colonne <b>Pos.pixel corr.fond</b> .
<b>Pos.pixel corr.fond</b>	Position du pixel par rapport au pixel de mesure en adaptation statique de la correction de fond Entrer les numéros de pixel pour la correction de fond.

Boutons

Boutons	Description
<b>Corrections spectrales')</b>	Attribuer aux lignes d'analyse un modèle pour la correction spectrale
<b>Facteurs IEC</b>	Attribuer aux lignes d'analyse une correction inter-éléments

**Voir également**

- Évaluer la crête et déterminer la correction de fond - fenêtre Modifier les spectres | Evaluation [► 86]

**3.2.4.1 Corrections spectrales avec la méthode du plus petit carré du coefficient**

Les corrections spectrales permettent de supprimer par calcul les émissions de fond structurées causées par exemple par la superposition des lignes d'analyse avec les lignes des éléments de la matrice. Pour cela, il faut que pour la ligne d'analyse concernée, les spectres perturbateurs possibles soient regroupés dans un modèle de correction.

- ▶ Dans la fenêtre **Méthode | Evaluation**, cliquer sur **Corrections spectrales')** et régler séparément pour chaque ligne le modèle de correction adéquat.
  - ✓ Les lignes auxquelles est attribué un modèle de correction sont indiquées dans la colonne **Correction** avec **LSM**.

**Voir également**

- Supprimer les perturbations de spectre - fenêtre Modifier les spectres | Corrections spectrales') [► 88]

**3.2.4.2 Correction inter-element**

La correction inter-éléments permet de corriger les superpositions de lignes. Pour cela, la longueur d'onde de la ligne interférante doit rester non perturbée.

Avec une solution mono-élément (solution IEC), on détermine le rapport des deux lignes de l'interférence (ligne d'analyse superposée et ligne non perturbée). Le quotient (facteur IEC) est utilisé lors des mesures d'échantillons suivantes pour soustraire l'intensité ou la concentration apparente de la ligne interférante de la ligne d'analyse.

Éléments dans la fenêtre Attribuer les éléments IEC

Assign IEC Elements						
	Analyte line	Interferent	IEC solution	IEC blank	IEC factor	manually
1	Al396.152	Cr267.716	Cr IEC solution	Cr IEC blank		<input type="checkbox"/>

Interelement correction is based on  
 Intensities
  apparent concentrations

Élément de commande	Explication
<b>Solutions IEC</b>	Entrée de la désignation, de la concentration, de l'unité et de la position du distributeur d'échantillons pour les solutions d'éléments IEC et les valeurs à blanc utilisées
<b>Ajouter</b>	Ajouter une nouvelle ligne à la fin de la liste
<b>Insérer</b>	Ajouter une nouvelle liste à l'emplacement marqué dans la liste
<b>Supprimer</b>	Supprimer la ligne marquée
<b>Correction inter-éléments basée sur')</b>	<b>Intensités</b> La correction se fait en soustrayant l'intensité  <b>Concentration</b> La correction se fait en soustrayant les
<b>Extraire les facteurs des résultats</b>	Extraire les facteurs IEC calculés d'un fichier de résultats chargé

Contenu du tableau

Colonne du tableau	Description
<b>Raie de l'analyte</b>	Désignation de la ligne d'analyse perturbée
<b>Interférence</b>	Désignation de la ligne perturbatrice
<b>Solution IEC</b>	Désignation de la solution mono-élément qui contient l'interférent. Les solutions IEC sont spécifiées au moyen du bouton <b>Solutions IEC</b> .
<b>Blanc IEC</b>	Désignation de la solution de valeur à blanc soustraite de l'intensité ou de la concentration de l'interférent. Les solutions de valeur à blanc sont spécifiées au moyen du bouton <b>Solutions IEC</b> .
<b>Facteur IEC</b>	Facteur de correction IEC  Les facteurs calculés sont surlignés en gris.
<b>manuel</b>	Quand cela est activé, il est possible d'entrer un facteur IEC manuellement. Aucune solution de mesure n'est nécessaire.

Attribuer une correction inter-éléments

- ▶ Dans la fenêtre **Méthode | Evaluation**, cliquer sur **Facteurs IEC**.
  - ✓ La fenêtre **Attribuer les éléments IEC** apparaît.
- ▶ Spécifier d'abord les solutions IEC. Pour chaque interférent, vous avez besoin d'une valeur à blanc et d'une solution IEC (solution mono-élément).
  - Cliquer sur **Solutions IEC**.

Specify IEC solutions

Type	Name	Conc.	Unit	Pos
IEC blank1	Cr IEC blank	0	mg/L	1
IEC solution1	Cr IEC solution	1	mg/L	2

- Ajouter dans le tableau de la fenêtre **Spécifier les solutions IEC** une valeur à blanc et une solution IEC pour chaque interférant en cliquant sur **Ajouter un blanc** et **Ajouter une solution IEC**.
  - Entrer dans les colonnes correspondantes un nom pour chaque solution.
  - Pour les solutions IEC, entrez dans la colonne **Concentration** la concentration de l'interférant dans la solution IEC.
  - Confirmer l'entrée avec **OK**.
- ▶ De retour dans la fenêtre **Attribuer les éléments IEC**, sélectionner dans la colonne du tableau **Raie de l'analyte** la ligne perturbée de l'analyte.
  - ▶ Choisir dans la colonne **Interférence** la ligne non perturbée de l'interférant.
  - ▶ Dans les colonnes **Solution IEC** et **Blanc IEC**, régler la solution mono-élément correspondante et la solution de valeur à blanc.
  - ▶ Sélectionner le type de Correction par incréments, soit sur la base des **Intensités** soit sur la base des **Concentrations apparentes**.
  - ▶ Confirmer l'entrée avec **OK**.
    - ✓ Les lignes auxquelles une correction inter-éléments est attribuée sont caractérisées par **IEC** dans le tableau de lignes de la fenêtre **Méthode | Evaluation** dans la colonne **Correction**.

Dans la séquence, la mesure des solutions IEC doit être effectuée après la mesure des étalons ou le calcul de l'étalonnage.

Entrer des facteurs manuellement

Au lieu de déterminer les facteurs pour la correction inter-éléments, il est possible d'entrer les facteurs connus directement dans le tableau :

- ▶ Après avoir entré la **Raie de l'analyte** et la **Interférence**, cocher la case **manuel**.
- ▶ Dans la colonne **Facteur IEC**, entrer le facteur déjà déterminé.

### 3.2.5 Entrer les paramètres d'étalonnage (fenêtre Méthode | Étalonnage)

Dans la fenêtre **Méthode | Étalonnage**, définir le type d'étalonnage et la correction de la valeur à blanc. En général, des étalons composés de plusieurs éléments, qui peuvent être entrés en tant qu'étalons de solution mère, sont utilisés pour l'étalonnage.

## Fenêtre Méthode | Étalonnage

No.	Line	Calib. func.	Intercept	Weighting	Check	Unit
1	Al396.152	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
2	As188.979	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
3	As193.698	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
4	Cd214.441	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
5	Cd226.502	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
6	Cr267.716	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
7	Cu324.754	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
8	Fe259.940	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
9	Mn257.610	linear	calculate	1/conc	none	µg/L
10	Ni231.604	linear	calculate	1/conc	none	µg/L

Sélectionner le procédé

Dans la liste **Mode étalonnage**, sélectionner le procédé :

Procédé d'étalonnage	Description
<b>Pas d'étalonnage</b>	Les résultats de l'échantillon sont publiés uniquement comme intensité. Aucun étalonnage n'est nécessaire pour ces mesures. Aucune autre entrée n'est nécessaire dans l'onglet <b>Étalonnage</b> . La liste des séquences doit, de façon logique, uniquement être composée d'échantillons.
<b>Étalonnage externe</b>	L'étalonnage se fait avec des échantillons comprenant l'analyte dans une concentration connue (étalons). Les échantillons de concentration inconnue sont mesurés par rapport à cet étalonnage.
<b>Ajouts</b>	L'échantillon inconnu est enrichi et mesuré avec différentes quantités d'un échantillon connu. Le résultat de l'égalisation correspond à la concentration d'analyte dans l'échantillon.
<b>Ajouts dosés</b>	La courbe d'étalonnage permettant de déterminer d'autres concentrations est générée par un ajout d'étalon. Simultanément, la concentration du premier échantillon est déterminée.

Production des étalons

Option	Description
<b>manuellement</b>	Les solutions étalons sont préparées manuellement.
<b>prép. par passeur.</b>	Uniquement en cas d'utilisation du distributeur d'échantillons Cetac SDXHPLD avec fonction de dilution automatique  La production des étalons s'effectue en diluant une solution mère dans le récipient de mélange du vortex du distributeur d'échantillons.

Corrections de la valeur à blanc

Le procédé par ajout d'étalon et l'étalonnage par ajout nécessitent une correction de la valeur à blanc. Dans la liste **Correction du blanc**, sélectionner le procédé :


Correction	Description
<b>Intensité</b>	Pour chaque ajout d'échantillon, la valeur à blanc est aussi mesurée et la valeur d'intensité mesurée avant le calcul des lignes d'ajustement est soustraite de toutes les valeurs mesurées. Ce procédé a été longtemps courant, mais il conduit à des résultats erronés avec de nombreux échantillons réels.
<b>Concentration</b>	Avec la solution de valeur à blanc, un ajout d'étalon avec les mêmes additions de concentration qu'avec l'échantillon est d'abord effectué. La concentration déterminée est automatiquement soustraite de toutes les autres concentrations déterminées par ajout d'échantillon (conc. 2).

Paramètres d'étalonnage spécifiques à une ligne

Les paramètres spécifiques à une ligne sont réglés dans le tableau :

Colonne du tableau	Description
<b>N°</b>	Ordre des lignes sélectionnées dans le tableau
<b>Raie</b>	Désignation de la ligne d'analyse
<b>Fonction étal.</b>	<p>Seulement pour l'étalonnage selon l'étalonnage standard</p> <p><b>linéaire</b> Déroulement linéaire de la fonction Étalonnage <math>y = a + bx</math></p> <p><b>non lin. ratio.</b> Déroulement non linéaire de la fonction d'étalonnage décrit par une fonction rationnelle fractionnelle <math>y = \frac{a + bx}{1 + cx}</math></p> <p><b>non lin. quadr.</b> Déroulement non linéaire de la fonction d'étalonnage décrit par une fonction quadratique <math>y = a + bx + cx^2</math></p> <p><b>automatique</b> Pour l'étalonnage, une fonction linéaire et une fonction non linéaire sont calculées. Les sommes des résidus sont comparés (test de Mandel). Si la somme pour la fonction non linéaire est significativement inférieure à celle pour la fonction linéaire, le déroulement non linéaire de la courbe d'étalonnage est sélectionné ; sinon, le déroulement linéaire de la courbe d'étalonnage est choisi. La fonction non linéaire est sélectionnée dans la fenêtre <b>Options   Étalonnage</b>. La fonction rationnelle fractionnelle est prévue ici comme paramètre par défaut.</p> <p><b>Remarque :</b> Pour le procédé par ajout d'étalon et l'étalonnage par ajout, seules les courbes linéaires sont autorisées.</p>
<b>Ord. à l'origine</b>	<p><b>Forcer par 0</b> La courbe d'étalonnage est exactement définie par le point de valeur zéro mesuré.</p> <p><b>Calculer</b> La valeur zéro est intégrée dans le calcul comme tous les autres points d'étalonnage.</p>
<b>Pondération</b>	<p><b>Aucun</b> Prendre en compte tous les points d'étalonnage de la même manière.</p> <p><b>1/conc.</b> Prendre en compte davantage les points d'étalonnage de faibles concentrations.</p>

Colonne du tableau	Description
	<p><b>1/SD</b> Prendre en compte davantage les points ayant un écart plus faible au sein des mesures répétées d'un échantillon (prérequis : la statistique de valeur médiane est activée).</p> <p><b>1/(SD*conc.)</b> Combinaison des procédés de calcul <b>1/conc.</b> et <b>1/SD</b></p>
<b>Contrôle</b>	<p>Le logiciel permet de contrôler automatiquement les courbes d'étalonnage déterminées au moyen d'une bande de pronostic calculée sur la base d'une sécurité statistique sélectionnée manuellement.</p> <p><b>Aucun</b> Tous les points d'étalonnage mesurés et non effacés sont utilisés pour le calcul de la courbe. Les points d'étalonnage ne sont ni marqués ni éliminés.</p> <p><b>Supprimer val. aber.')</b> Si des points d'étalonnage se trouvent en dehors de la bande de pronostic calculée, une élimination des valeurs extrêmes est effectuée au moyen d'un test F (qui contrôle si la non-prise en compte d'un point entraîne une amélioration significative de la variation résiduelle) :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Un test f est effectué avec le point d'étalonnage qui se trouve le plus en-dehors de la bande de pronostic. Si la non-prise en compte de ce point n'entraîne pas d'amélioration significative de la variation résiduelle, le point est pris en compte et la courbe d'étalonnage n'est pas optimisée davantage.</li> <li>■ Si la non-prise en compte entraîne une amélioration significative, le point d'étalonnage est considéré comme valeur extrême (indiqué dans le tableau par un « ! » et dans le graphique en rouge) et la courbe d'étalonnage est de nouveau calculée sans ce point.</li> <li>■ Pour le point qui s'écarte désormais le plus de la bande de pronostic, un test F est de nouveau effectué. Ce processus est répété jusqu'à ce que toutes les valeurs extrêmes soient supprimées.</li> <li>■ Tous les points d'étalonnage qui se trouvent en dehors de la nouvelle bande de pronostic et qui n'ont pas été éliminés comme valeurs extrêmes sont indiqués dans le tableau par un « ? » et dans le graphique en bleu.</li> </ul>
Unité	Entrer les unités de concentration séparément pour chaque élément.

Avec , la valeur de la cellule actuelle est reprise dans toutes les cellules suivantes de la colonne du tableau. Le bouton **Concentrations** permet d'ouvrir le tableau pour entrer la concentration de la solution étalon.

#### Voir également

 Options pour le déroulement de l'analyse [▶ 139](#)

### 3.2.5.1 Spécifier les étalons de solution mère

Utiliser des étalons de solution mère vous permet d'entrer à la place des concentrations les facteurs de dilution pour chaque étalon. Pour cela, spécifier les standards de stock avant de remplir le tableau d'étalonnage, ce qui vous permet d'utiliser plusieurs stocks avec plusieurs éléments et concentrations.

- ▶ Dans la fenêtre **Méthode | Étalonnage**, cliquer sur **Sol. mère**.
  - ✓ La fenêtre **Solutions mère** s'ouvre.
- ▶ Cliquer sur **Nouveau** ou **Insérer** pour ajouter une nouvelle ligne dans la liste des solutions mères.  
Nbre max. de standards de stock : 20

- ▶ Avec l'option **Base de donnée sol. mère**, sélectionner la désignation du stock. La base de données des solutions mères est gérée dans la fenêtre **Données | Sol. mère/ Échant. QC**.
- ▶ Sélectionner l'option **Entrer manuellement** si vous ne voulez pas utiliser de stock de la base de données..
- ▶ En revenant dans la fenêtre **Solutions mère**, entrer les données du stock directement dans le tableau :

Colonne du tableau	Description
<b>Nom</b>	Nom de l'étalon
<b>Éléments et concentrations</b>	Éléments et concentrations correspondantes de l'étalon Avec <b>Concentrations</b> , ouvrir une liste pour entrer les concentrations. Vous pouvez également entrer les valeurs au format d'entrée suivant dans la ligne au format <i>Symbole d'éléments - espace - concentration</i> , par exemple du nickel à une concentration de 0,5 mg/L : Ni 0,5 Les autres éléments et leurs concentrations sont simplement séparés par un point-virgule. Vous trouverez un symbole du format d'entrée sous la liste de stocks.
<b>Unité</b>	Unité de concentration des éléments dans l'étalon

### Voir également

- 📄 Gérer les bases de données pour les stocks et les échantillons QC [▶ 133]

## 3.2.5.2 Entrer le tableau d'étalonnage

Vous pouvez entrer les données standard dans le tableau.

Fenêtre Concentrations

Calibration Table - □ ×

Number of standards

Calb-Zero standards:

Calibration standards:

Allow deactivated lines  
Deactivate individual lines from stock dilutions by clearing the field.  
Reactivate with plus key (+).

Name	Unt	Cal-Zero1	Cal-Std1	Cal-Std2
Position		101	102	103
Stock				
Dil.fac.				
Recal.				
Ar420.068				
As188.979	µg/L	0	37.5	112.5
Cd214.441	µg/L	0	12.5	37.5
Hg184.886	µg/L	0	75	225
Pb220.353	µg/L	0	12.5	37.5
Co237.863	µg/L	0	125	375
Ni231.604	µg/L	0	500	1500
V292.464	µg/L	0	250	750
Ag328.068	µg/L	0	375	1125
Se196.028	µg/L	0	375	1125
Tl190.796	µg/L	0	20	60
Au242.795	µg/L	0	250	750

Shift selected column:      inc.

- ▶ Dans la fenêtre **Méthode | Étalonnage**, cliquer sur **Concentrations**.

- ▶ Entrer d'abord le nombre de standards dans les champs d'entrée. Selon le procédé d'étalonnage sélectionné, différents standards doivent être sélectionnés.

Avec le procédé d'étalonnage, le nombre d'étalons (**Solutions étalon**) et les étalons zéro pour l'étalonnage (**Étalon zéro**) doivent être entrés. Il peut être nécessaire d'entrer plusieurs étalons, par exemple si les éléments à examiner sont présents dans plusieurs solvants. Dans ce cas, régler la concentration sur « 0 » dans les lignes d'éléments voulues ; les autres colonnes restent vides.

Pour **Ajouts** et **Ajouts dosés** le nombre d'**Solutions d'ajout** doit être entré.

- ▶ Pour la préparation des étalons via un système de dilution raccordé, vous devez sélectionner, pour chaque étalon, l'étalon de solution mère dans la ligne **Sol. mère** de l'étalon de solution mère utilisé et le facteur de dilution dans la ligne **Fact.dil.**  
Les facteurs de dilution suivants peuvent être sélectionnés dans la dilution : 1, 2, 5, 10, 15, 20, 25, 50, 75, 100, 200, 250, 500, 1000, 1500, 2000, 2500, 5000. Le nombre de facteurs de dilution est limité en fonction des réglages dans la fenêtre **Passeur | Dilution**. Pour des facteurs de dilution 1 ... 100, la dilution est effectuée en une phase, et en deux phases si les valeurs sont plus élevées..
  - ✓ Après avoir sélectionné l'étalon de solution mère et le facteur de dilution, le logiciel calcule automatiquement la concentration pour chaque étalon et chaque ligne d'analyse.
- ▶ Les concentrations d'étalon qui ne doivent pas être mesurées peuvent être supprimées manuellement du tableau après avoir coché des cases **Sélection flexible**.  
Pour réactiver les entrées supprimées, entrer un « Plus » (+) dans les champs correspondants et confirmer avec la touche d'entrée ou avec un changement de cellules via la souris.
- ▶ Si les étalons sont produits manuellement, les concentrations de ceux-ci peuvent également être calculés par le logiciel en sélectionnant un étalon de solution mère et en saisissant un facteur de dilution.  
Il est également possible d'entrer dans le tableau la concentration pour chaque ligne d'analyse pour chaque étalon.
- ▶ Si les étalons sont produits manuellement, il est possible de définir la position de l'étalon dans le distributeur d'échantillons dans la ligne **Pos**.  
Si le distributeur d'échantillons n'est pas utilisé, les entrées dans cette ligne ne sont pas prises en compte.  
Pour les distributeurs d'échantillons avec fonction de dilution, la position de la solution mère peut être reprise dans la base de données des solutions mères.  
L'affectation des positions du distributeur d'échantillons peut être entrée ou modifiée dans la séquence.
- ▶ Pour les réétalonnages spécifiés comme action de séquence ou comme conséquence d'actions QC, sélectionner au moins un étalon zéro et un étalon ou au moins deux étalons à la ligne **Ré-étal.**. Si plus de deux étalons de réétalonnage sont utilisés pour une ligne, l'étalon de réétalonnage le plus bas et celui le plus élevé sont utilisés.

#### Voir également

- 📖 Spécifier les étalons de solution mère [▶ 43]
- 📖 Fonction de dilution [▶ 117]

### 3.2.6 Spécifier les évaluations statistiques (fenêtre Méthode | Statistiques)

Dans la fenêtre **Méthode / Statistiques**, sélectionner les procédés statistiques à appliquer pour l'étalonnage et la mesure de l'échantillon. Les paramètres ne dépendent pas du procédé d'étalonnage sélectionné et ne varient pas lors d'un changement de procédé.

Fenêtre Méthode | Statistiques

Type de statistiques

Option	Description
<b>Statistiques sigma</b>	Calculer la moyenne et l'écart-type Statistique d'erreur selon la moyenne arithmétique : L'échantillon est mesuré plusieurs fois après les cycles à vide. La moyenne arithmétique ainsi que l'écart-type et l'écart-type standard sont calculés à partir des résultats de mesure.
<b>Statistiques médianes</b>	Calculer la médiane et l'étendue (E). Statistique d'erreur selon le procédé de médiane : L'échantillon est mesuré plusieurs fois après les pseudo-mesures et les valeurs mesurées sont classées par taille. La valeur médiane affichée est alors : <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ En cas de nombre impair de cycles de mesure, la valeur du milieu de la liste triée</li> <li>▪ En cas de nombre pair de cycles de mesure, la moyenne des deux valeurs au milieu de la liste triée</li> </ul> Comme les valeurs mesurées minimale et maximale n'ont pas d'incidence sur le résultat de la mesure, la statistique médiane est appropriée pour éliminer les valeurs extrêmes.

Nombre de mesures répétées

Option	Description
<b>Échantillons</b>	Nombre de mesures répétées par échantillon
<b>Étalons</b>	Nombre de mesures répétées par échantillon de calibrage
<b>QC</b>	Nombre de répétitions de mesure par mesure QC
<b>Avant mesure</b>	Nombre de répétitions de pseudo-mesures Les pseudo-mesures sont des mesures avec un échantillon qui sont effectuées avant la série de statistiques et ne sont pas prises en compte pour le calcul du résultat.

Test de valeur extrême de Grubbs

Pour la statistique de la moyenne avec au moins 3 mesures répétées par échantillon

État	Description
Désactivé	Prendre en compte toutes les valeurs de la série de statistiques pour le calcul de la moyenne.
Activé	Les défauts sont alors éliminés et ne seront pas utilisés pour calculer les grandeurs statistiques. Les moyennes définies sont alors marquées dans le tableau d'édition par un « ! ».

Calcul intervalle confiance


La base pour le calcul de confiance est la sécurité statistique sélectionnée, voir plus bas. Dans la plage de confiance, à côté de l'erreur lors de la mesure d'échantillon, on trouve surtout l'erreur d'étalonnage, si bien que même quand la fonction statistique est désactivée, une valeur est entrée.

Réglage	Description
<b>arrêt</b>	Ne pas calculer la plage de confiance
<b>absolu</b>	Afficher la plage de confiance en valeurs absolues (dans l'unité de mesure de la concentration)
<b>relatif</b>	Afficher la plage de mesure en valeurs relatives (en pourcentage de la valeur de concentration)

Probabilité

La **Niveau de confiance** (sélection possible de 68,3 ... à 99,9 %) est utilisée pour calculer la plage de confiance des échantillons et des bandes de pronostic des courbes d'étalonnage.

#### Voir également

 Spécifier le contrôle qualité (fenêtre Méthode | QCS) [▶ 47]

### 3.2.7 Spécifier le contrôle qualité (fenêtre Méthode | QCS)

Dans la fenêtre **Méthode | QCS**, spécifier les échantillons pour le contrôle de la qualité (échantillons QC). Durant le déroulement de la séquence, des mesures de contrôle avec des échantillons sont insérées à des points prédéterminés ; elles doivent donner les résultats de mesure connus. La valeur absolue (absorbance/concentration) ou la différence de concentration par rapport à l'échantillon précédent est alors connue. Il est possible de définir plusieurs types d'échantillons pour le contrôle qualité.

Les résultats des mesures de contrôle peuvent être documentés automatiquement dans les onglets de contrôle qualité (onglets QC). Le système d'onglets QC sert à surveiller la qualité sur une période prolongée. Les onglets QC sont enregistrés avec la méthode et complétés à chaque mesure avec la méthode.

Éléments dans la fenêtre Méthode | QCS

Éléments	Description
<b>Type</b>	Cet échantillon QC est affiché dans le tableau des lignes. Les paramètres de l'échantillon QC peuvent être modifiés ici.
<b>Nom</b>	Nom de l'échantillon QC affiché
<b>Action</b>	Voici le procédé lorsque les résultats de l'échantillon QC dépassent ou n'atteignent pas les limites définies
<b>Nouveau/Modifier</b>	Définir un nouvel échantillon QC ou un échantillon QC déjà existant
<b>Effacer</b>	Effacer l'échantillon QC affiché
<b>Correction du blanc</b>	En option, une correction de la valeur à blanc peut être activée pour chaque échantillon QC, à l'exception des étalons QC et des valeurs à blanc QC
<b>Unité</b>	Indication de l'unité de concentration
<b>Aperçu des éch. QC</b>	Ouvrir une liste avec les paramètres spécifiques de ligne de tous les échantillons QC
<b>Tableau Lignes</b>	Dans le tableau sont affichés les paramètres de l'échantillon QC sélectionné dans le champ de liste <b>Type</b>

Types d'échantillons QC

Les types d'échantillons QC suivants peuvent être spécifiés :

Option	Description
<b>Échantillon QC</b>	<p>Définir un échantillon comme échantillon QC</p> <p>Les concentrations de l'échantillon QC peuvent soit être chargées depuis la base de données, soit être saisies directement.</p> <p><b>base de données</b> Sélectionner l'échantillon QC concerné dans le champ de liste voisin. La gestion de la base de données des échantillons QC se fait dans la fenêtre <b>Méthode   QCS</b>.</p> <p><b>entrer manuellement</b> Saisir les concentrations de l'échantillon QC directement dans le tableau</p> <p>Nombre max. d'échantillons QC : 50</p>

Option	Description
<b>Étal. QC</b>	Définir un étalon comme échantillon QC Chaque étalon défini dans le tableau d'étalonnage peut être utilisé comme étalon QC. Nombre possible d'échantillons QC = Nombre d'échantillons dans le tableau d'étalonnage (max. 65)
<b>Blanc QC</b>	Définir l'échantillon à blanc comme échantillon QC
<b>Ajout QC</b>	Définir un échantillon enrichi comme échantillon QC Avec cette option, les résultats de mesure d'un apport de concentration défini dans un ou plusieurs échantillons sont contrôlés. Pour cela, après un échantillon au choix dans le tableau, définir un échantillon de solution mère QC (Échantillon de solution mère QC = échantillon + addition d'une solution de concentration connue). Après la mesure, la différence de concentration (Conc1 et l'échantillon de stock QC) est comparée avec la « Hausse de concentration attendue » (Augm.conc.attendue) et le taux de récupération est calculé.

Si l'y a pas d'échantillons de contrôle certifiés, le contrôle de qualité peut également être effectué à l'aide de déterminations doubles :

Option	Description
<b>Tendance QC</b>	La concentration mesurée est enregistrée à la première apparition de l'échantillon de contrôle dans le déroulement de l'analyse. Lors de la prochaine apparition, la différence de concentration est constituée et exploitée. Il est recommandé de mesurer ces échantillons de contrôle au début et à la fin d'une série de mesure pour qu'ils remplissent leur fonction.
<b>Matrice QC</b>	Un échantillon d'analyse est fractionné avant la préparation de l'échantillon. Les deux parties parcourent séparément toutes les étapes de la préparation d'échantillon et sont placés séparément sur le distributeur d'échantillons comme Tendance QC et Matrice QC. La différence de concentration est exploitée.

Procédure en cas de dépassement des limites d'erreur

Pour les types d'échantillons QC, il est possible de sélectionner différentes procédures comme réaction au dépassement des limites d'erreur :

Option	Description
<b>Échantillon QC</b>	<b>signaler</b>
<b>Étal. QC</b>	La valeur mesurée est désignée dans le tableau d'échantillon et le programme de mesure continue à l'échantillon suivant. <b>ré-étal. + cont.</b> Un réétalonnage a lieu. Ensuite, l'échantillon QC est de nouveau mesuré. Si l'échantillon QC est maintenant dans la plage, la mesure est poursuivie avec l'échantillon suivant, sinon le programme de mesure est interrompu. <b>étal. + cont.</b> Un nouvel étalonnage a lieu. Ensuite, l'échantillon QC est de nouveau mesuré. Si l'échantillon QC est maintenant dans la plage, la mesure est poursuivie avec l'échantillon suivant, sinon le programme de mesure est interrompu. <b>ré-étal. + remesurer</b> Un réétalonnage a lieu. Ensuite, l'échantillon QC est de nouveau mesuré. Si l'échantillon QC est en-dehors de la plage, le programme de mesure est interrompu. S'il est dans la plage, tous les échantillons

Option	Description
	<p>sont de nouveau mesurés après le dernier échantillon QC ou le dernier (ré)étalonnage. Si l'échantillon QC est de nouveau en dehors de la limite d'erreur, le programme de mesure est interrompu.</p> <p><b>étal. + remesurer</b> Un nouvel étalonnage a lieu. Ensuite, l'échantillon QC est de nouveau mesuré. Si l'échantillon QC est en dehors de la plage, le programme de mesure est interrompu. Si il est dans la plage, tous les échantillons sont de nouveau mesurés après le dernier échantillon QC ou le dernier (ré)étalonnage. Si l'échantillon QC est de nouveau en dehors de la limite d'erreur, le programme de mesure est interrompu.</p> <p><b>Méthode suivante</b> Le programme de mesure actuel est arrêté et le programme de mesure de la prochaine méthode est démarré si la séquence contient une autre méthode.</p> <p><b>Arrêter</b> Le programme de mesure actuel est arrêté.</p>
<b>Ajout QC</b>	<p><b>signaler</b></p> <p><b>ré-étal. + cont.</b></p> <p><b>étal. + cont.</b></p> <p><b>Méthode suivante</b></p> <p><b>Arrêter</b></p>
<b>Blanc QC</b>	<p><b>signaler</b></p> <p><b>Méthode suivante</b></p> <p><b>Arrêter</b></p>
<b>Tendance QC</b>	Pas de réaction
<b>Matrice QC</b>	

Paramètres spécifiques à une ligne des types d'échantillons QC

Entrer dans le tableau des lignes les paramètres spécifiques à une ligne des différents types d'échantillons QC.

Option	Description
<b>Raie</b>	Noms de la ligne d'analyse
<b>Conc. attend.</b>	<p>Pour <b>Échantillon QC</b> et <b>Étal. QC</b></p> <p>Concentration attendue dans l'échantillon QC</p>
<b>Augm.conc.attendue</b>	<p>Pour <b>Ajout QC</b></p> <p>Hausse de la concentration attendue entre l'échantillon et l'échantillon enrichi</p> <p>Entrer la valeur correspondant à la quantité enrichie et à la concentration de la solution mère.</p>
<b>Ints.attend.</b>	<p>Pour <b>Blanc QC</b></p> <p>Intensité attendue dans la valeur à blanc QC</p>
<b>Limite inf.</b>	Plage inférieure de la limite d'erreur en pourcentage
<b>Limite sup.</b>	Plage supérieure de la limite d'erreur en pourcentage
<b>Carte de contrôle</b>	Si il est marqué par « + », le résultat du contrôle de qualité pour cette ligne est émis sur l'onglet QC.
<b>Réact.')</b>	Utiliser cette procédure en cas de dépassement de la limite de la plage d'erreur. Si plusieurs lignes sont marquées d'un « + », il suffit que les limites d'erreur soient dépassées pour l'une de ces lignes pour déclencher la réaction (Logique OU).

Option	Description
Unité	Pour <b>Étal. QC</b> Unité de la concentration attendue

Entrer les paramètres pour les échantillons QC

- ▶ Cliquer sur **Nouveau/Modifier** pour créer un nouveau jeu de paramètres pour un type d'échantillon QC ou modifier le type d'échantillon sélectionné.
  - ✓ La fenêtre **Ajouter/modifier type échant. CQ** s'ouvre.
- ▶ Dans la liste **Type**, sélectionner le type d'échantillon.
- ▶ Échantillons QC uniquement : Si vous définissez plusieurs échantillons QC, attribuez un numéro consécutif dans le champ de liste.
- ▶ Étalon QC uniquement : dans le champ de liste, sélectionner le numéro de solution étalon en respectant l'ordre dans le tableau d'étalonnage.
- ▶ Entrer les paramètres spécifiques de ligne dans le tableau.
  - ✓ Les échantillons QC sont définis dans la méthode.

### Voir également

📄 Gérer les bases de données pour les stocks et les échantillons QC [▶ 133]

## 3.2.8 Spécifier le contrôle qualité (fenêtre Méthode | QCC)

Dans la fenêtre **Méthode | QCC** spécifier les paramètres pour le contrôle de qualité pendant de déroulement de la séquence :

- Écart-type relatif (statistique moyenne) ou étendue relative (statistique médiane)
- Le contrôle d'étalonnage
- Contrôle de ré-étalonnage
- Procédure en cas de dépassement des limites d'erreur

Plusieurs contrôles avec différentes limites d'erreur peuvent être sélectionnés en même temps.

The screenshot shows the 'Method | QCC' window with the following settings:

- RSD/RR% check: no react.
- Calib. check: no react.
- Recal. check: no react.

The table below shows the QC samples defined in the method:

No.	Line	RSD/RR% <	RSD !	R <sup>2</sup> (adj.) >	R <sup>2</sup> !	Rec.Fact. >	Rec.Fact. <	Rec. !
1	Al396.152	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
2	As188.979	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
3	As193.698	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
4	Cd214.441	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
5	Cd226.502	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
6	Cr267.716	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
7	Cu324.754	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
8	Fe259.940	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
9	Mn257.610	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
10	Ni231.604	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+

At the bottom of the window, there are buttons for 'Open...', 'Save...', 'OK', 'Accept', and 'Cancel'.

## Types de contrôle de qualité

Type de contrôle	Description
<b>Contrôle RSD/RR%</b>	Contrôle de l'écart-type relatif ou de l'étendue relative
<b>Contrôle étal.</b>	Contrôle du degré d'exactitude de l'étalonnage
<b>Contrôle ré-étal.</b>	Contrôle du facteur de réétalonnage

## Réactions au dépassement des limites d'erreur

Réaction	Description
<b>Aucun</b>	Ne pas effectuer le contrôle concerné
<b>signaler</b>	En cas de dépassement des limites d'erreur, marquer l'échantillon concerné, l'étalonnage ou le réétalonnage dans le tableau d'échantillons
<b>répét. + cont.</b>	Uniquement avec <b>Contrôle RSD/RR%</b> En cas de dépassement de la limite de précision sérielle, répéter la mesure de l'échantillon concerné avant de mesurer l'échantillon suivant
<b>étal. + cont.</b>	Uniquement <b>Contrôle étal.</b> et <b>Contrôle ré-étal.</b> En cas de dépassement des limites d'erreur pour l'étalonnage ou du facteur de réétalonnage, effectuer un nouvel étalonnage puis poursuivre la mesure avec l'échantillon suivant
<b>Méthode suivante</b>	Uniquement <b>Contrôle étal.</b> et <b>Contrôle ré-étal.</b> En cas de dépassement des limites d'erreur, le programme de mesure actuel est interrompu et le programme de mesure de la ligne d'élément suivante dans la méthode est démarré. L'option ne peut être sélectionnée que si plusieurs lignes d'élément ont été spécifiées dans la méthode.
<b>Arrêter</b>	Uniquement <b>Contrôle étal.</b> et <b>Contrôle ré-étal.</b> En cas de dépassement des limites d'erreur, terminer la mesure de la méthode actuelle.

## Paramètres spécifiques à une ligne des contrôles de qualité

Entrer dans le tableau les paramètres spécifiques à une ligne des différents contrôles de qualité. Pour chaque ligne analysée, déterminer si elle est prise en compte dans le contrôle. Si une ou plusieurs des lignes contrôlées dépasse les limites d'erreur, alors la réaction décidée plus haut est déclenchée.

Contrôle qualité	Paramètre / signification
<b>Contrôle RSD/RR%</b>	<b>RSD/RR% &lt;</b> Si les écarts-types relatifs ou les étendues relatives sont supérieures ou égales à la valeur entrée, on réagit avec la procédure décidée. <b>RSD !</b> Avec les lignes marquées par « + » RSD% ou RR% est contrôlé.
<b>Contrôle étal.</b>	<b>R<sup>2</sup>(aj.)</b> La mesure d'exactitude de la régression R <sup>2</sup> (aj.) doit être supérieure ou égale à la valeur entrée. Sinon, on réagit avec la procédure décidée. <b>R<sup>2</sup> !</b> Avec les lignes marquées par « + », R <sup>2</sup> (aj.) est contrôlé.
<b>Contrôle ré-étal.</b>	<b>Fact. ré-étal. &gt;</b> Limite supérieure du facteur de réétalonnage <b>Fact. ré-étal. &gt;</b> Limite inférieure du facteur de réétalonnage Avec des facteurs d'étalonnage en-dehors de ces valeurs limites pré-définies, la réaction est déclenchée.

Contrôle qualité	Paramètre / signification
	<b>Ré-étal. !</b> Avec les lignes marquées par « + », le facteur de réétalonnage est contrôlé.

### Voir également

☰ Spécifier les évaluations statistiques (fenêtre Méthode | Statistiques) [▶ 45]

## 3.2.9 Spécifier des formats de génération (fenêtre Méthode | Édition)

Dans la fenêtre **Méthode | Édition**, spécifier le nombre de décimales des résultats à l'écran et à l'impression, les types d'analyse supplémentaires ainsi que l'ordre des lignes dans une analyse multi-éléments dans l'impression.

Définir séparément pour chaque élément dans la liste le nombre de décimales pour l'affichage de l'intensité et de la concentration ainsi que l'ordre d'impression.

Éléments dans la fenêtre  
Méthode | Édition

No.	Line	Signif. figures Ints.	Dec. places Conc.	Signif. figures Conc.	100% norm.	Oxide factor	Print order
1	Al396.152	9	4	4	-		3
2	As188.979	9	4	4	-		4
3	As193.698	9	4	4	-		5
4	Cd214.441	9	4	4	-		7
5	Cd226.502	9	4	4	-		8
6	Cr267.716	9	4	4	-		9
7	Cu324.754	9	4	4	-		10
8	Fe259.940	9	4	4	-		13
9	Mn257.610	9	4	4	-		19
10	Ni231.604	9	4	4	-		21

Éléments	Description
<b>Chiffres signif. Ints.</b>	Nombre de positions significatives des valeurs d'intensité
<b>Décimales Conc.</b>	Nombre de positions après virgule des valeurs de concentration
<b>Chiffres signif. Conc.</b>	Nombre de positions significatives des valeurs de concentration
<b>Norm. 100 %</b>	La concentration de génération <b>Conc. 2</b> est convertie en pourcentage de la concentration totale. La concentration totale est la somme des concentrations des lignes marquées d'un « + ».
<b>Facteur d'oxy.</b>	La concentration de génération <b>Conc. 2</b> est convertie en concentration / taux de l'oxyde si un oxyde a été sélectionné. Le facteur d'oxyde est donné entre parenthèses, par exemple Ti est converti par multiplication par 1.6681 en TiO <sub>2</sub> .
<b>Ordre d'impression</b>	Ordre dans lequel les lignes sont affichées dans le rapport

## 4 Séquences

La séquence définit l'ordre de traitement des échantillons et des actions au sein de la routine de mesure. Certaines données de description des échantillons comme la désignation d'échantillon et sa position sur le rack d'échantillons peuvent également être entrées directement. Ces données sont enregistrées avec la séquence.

Une séquence est basée sur une méthode chargée contenant les informations relatives au type d'étalonnage, aux analyses statistiques, aux contrôles qualité, etc.

### 4.1 Créer, enregistrer, ouvrir des séquences


Les séquences comme les méthodes sont enregistrées dans une base de données. Il est possible de créer, modifier, enregistrer et ouvrir des séquences. D'autres fonctions de gestion des séquences sont disponibles dans la fenêtre **Données | Gestion des données**.

#### Voir également

 Gérer les méthodes et les séquences [► 125]

#### 4.1.1 Créer nouvelle séquence

Commencer par créer ou charger une méthode. À partir de la méthode, il est possible de spécifier une nouvelle séquence à partir des mesures d'échantillon et d'actions.

- ▶ Sélectionner le point de menu **Fichier | Nouvelle séquence**.
- ▶ Sinon, ouvrir la fenêtre avec les paramètres de séquence actuels en cliquant sur  ou en passant par le point de menu **Outils | Séquence**.
  - ✓ La fenêtre **Séquence** apparaît. Il est maintenant possible de définir les mesures et l'ordre des actions.

#### 4.1.2 Enregistrer séquence

Après l'entrée des mesures et des actions, enregistrer la séquence dans la base de données via la fenêtre **Enregistrer séquence**. Ainsi, la séquence pourra être réutilisée pour d'autres mesures. Lors de l'enregistrement de la séquence, il est possible d'ajouter d'autres informations afin de catégoriser et de retrouver plus facilement la séquence.

Éléments dans la fenêtre Enregistrer séquence

Option	Description
<b>Nom</b>	Nom de la séquence
<b>Cat.</b>	Catégorie (trois caractères) pour une autre désignation et un autre classement des séquences Cette entrée est en option.
<b>Tableau</b>	Liste des séquences disponibles
<b>Trier par</b>	Les options dans ce groupe permettent de trier la liste des séquences. Lorsque l'option <b>Version actuelle uniquement</b> est activée, seule la version la plus récente des méthodes portant le même nom s'affiche.
<b>Description</b>	En option, entrer des explications plus détaillées concernant la séquence  Cliquer sur  permet d'ouvrir la liste avec des remarques prédéfinies. La gestion de ces remarques se fait dans la fenêtre <b>Données   Remarques prédéfinies</b> .

Enregistrer séquence

- ▶ Dans la fenêtre **Séquence**, cliquez sur **Enregistrer** ou sélectionnez le point de menu **Fichier | Enregistrer | Séquence**.
- ▶ Saisissez le nom de la séquence et sélectionnez d'autres paramètres dans la fenêtre **Enregistrer séquence**.
- ▶ Confirmer vos réglages avec **OK**.
  - ✓ La séquence est enregistrée dans la base de données. En cas d'utilisation d'un nom de séquence existant, la séquence existante n'est pas écrasée, mais une nouvelle version est enregistrée dans la base de données.


#### Voir également

- Créer des remarques prédéfinies [▶ 134]

### 4.1.3 Charger la séquence

Les séquences enregistrées peuvent être chargées et utilisées pour lancer une routine de mesure avec une méthode.

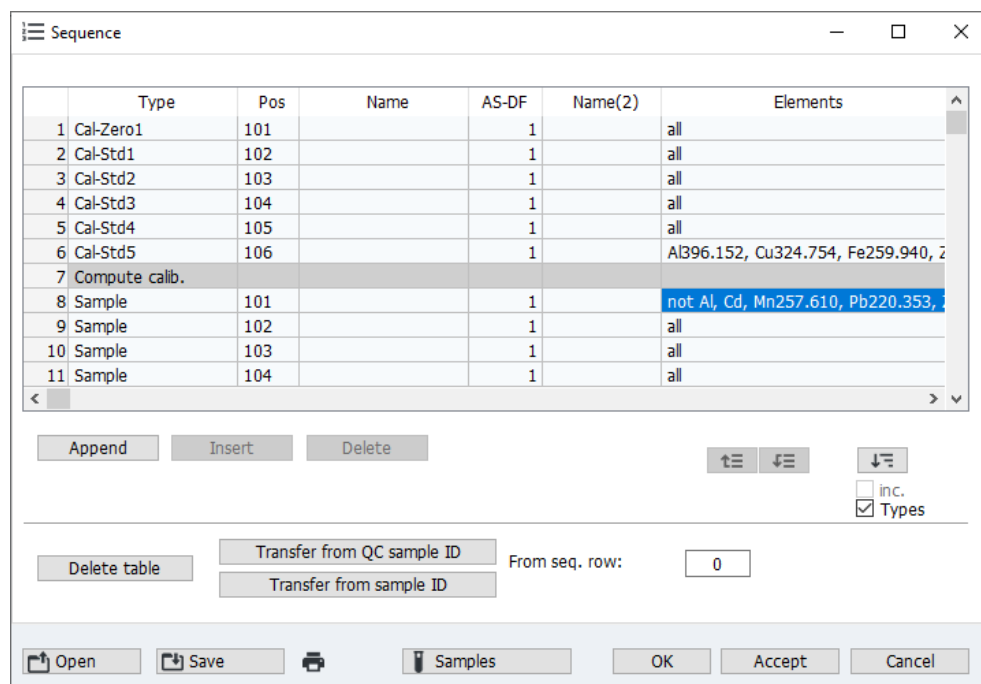
- ▶ Ouvrir la fenêtre de la base de données des séquences de l'une des manières suivantes :

- Dans la barre d'outils, cliquer sur le symbole  à côté du champ **Séqu..**
- Sélectionner le point de menu **Fichier | Ouvrir la séquence.**
- Dans la fenêtre **Séquence**, cliquer sur **Ouvrir.**
- ▶ En option, vous pouvez sélectionner une catégorie dans le champ **Cat.** pour limiter les séquences affichées. Si vous voulez voir toutes les séquences, effacer l'entrée dans le champ **Cat..**
- ▶ Cochez la case de contrôle **Version actuelle uniquement** pour afficher seulement la séquence ayant la version la plus élevée s'il y a plusieurs séquences du même nom.
- ▶ Dans le tableau, sélectionnez la séquence et cliquez sur **OK.**
  - ✓ La fenêtre Séquence apparaît avec les paramètres enregistrés.

## 4.2 Fenêtre Séquence

Dans la fenêtre **Séquence**, spécifier l'ordre des mesures et des autres actions au cours de l'analyse.

Ouvrir la fenêtre **Séquence** en cliquant sur .



	Type	Pos	Name	AS-DF	Name(2)	Elements
1	Cal-Zero1	101		1		all
2	Cal-Std1	102		1		all
3	Cal-Std2	103		1		all
4	Cal-Std3	104		1		all
5	Cal-Std4	105		1		all
6	Cal-Std5	106		1		Al396.152, Cu324.754, Fe259.940, Z
7	Compute calib.					
8	Sample	101		1		not Al, Cd, Mn257.610, Pb220.353,
9	Sample	102		1		all
10	Sample	103		1		all
11	Sample	104		1		all

Buttons: Append, Insert, Delete, ↑, ↓, ↕, inc.,  Types

Buttons: Delete table, Transfer from QC sample ID, From seq. row: 0, Transfer from sample ID

Buttons: Open, Save, Samples, OK, Accept, Cancel

Tableau pour les suites d'échantillons et d'actions

Dans le tableau sont affichées les séries d'échantillons et d'actions sélectionnées dans l'ordre de traitement.

Colonne du tableau	Explication
<b>Type</b>	Type d'échantillon ou étape d'analyse
<b>Pos</b>	Position d'échantillon dans le distributeur d'échantillons (si utilisé)
<b>Nom</b>	Nom d'échantillon  Cette entrée est en option. Pour les échantillons d'étalonnage et QC, ce nom d'échantillon est repris de la méthode si jamais un nom d'échantillon y a été spécifié. Pour les analyses et les échantillons QC, il est possible de transférer les noms du fichier d'informations d'échantillon.
<b>Nom (2)</b>	Autre désignation d'identification de l'échantillon (en option)

Colonne du tableau	Explication
Éléments	<p>Sélectionner les éléments analysés dans un échantillon ou exécutés pour les actions spéciales.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <b>Aucun</b> La sélection actuelle est supprimée.</li> <li>▪ <b>Tous</b> Tous les éléments définis dans la méthode sont déterminés (réglage standard).</li> <li>▪ <b>Symbole d'élément</b> Seuls les éléments mentionnés sont déterminés, par exemple, « Cu, Pb ».</li> <li>▪ <b>Ligne d'éléments (Symbole + longueur d'onde)</b> Seules les lignes d'éléments nommées sont déterminées, par exemple « Mn 257.610, Ca 315.887 ».</li> <li>▪ <b>non Symbole d'élément ou non Ligne d'éléments</b> Les éléments ou lignes d'éléments nommés ne sont pas déterminés, par exemple « non Cu, Pb », « non Mn 257.610, Ca 315.887 »</li> </ul>

## Boutons

Les boutons permettent d'ajouter ou de supprimer des échantillons et actions dans la liste de séquences ou de reprendre des données d'informations échantillons existantes.

Bouton	Explication
Ajouter	Ajouter une nouvelle ligne à la fin de la liste et ouvrir la fenêtre <b>Modifier séquence</b>
Insérer	Insérer une nouvelle ligne au-dessus de l'emplacement de liste marqué
Supprimer	Supprimer les lignes marquées
Effacer tableau	Supprimer toute la liste de séquences
Transférer de ID échant. QC	<p>Reprendre des informations concernant les noms des échantillons QC et leur place dans le distributeur d'échantillons de la fenêtre <b>Echantillons   Informations échant. QC</b></p> <p>Les informations du tableau d'ID échantillons QC sont entrées dans le tableau de séquences. La première ligne avec la nouvelle identification d'échantillon est définie dans le champ <b>à partir de la ligne</b>.</p>
Transférer de ID échant.	<p>Reprendre les informations sur les noms d'échantillons, leur position dans le distributeur d'échantillons et les éléments à analyser depuis la fenêtre <b>Echantillons</b></p> <p>Les informations du tableau d'ID échantillons QC sont entrées dans le tableau de séquences. La première ligne avec la nouvelle identification d'échantillon est définie dans le champ <b>Echantillons</b>.</p>
Échantillons	Ouvrir la fenêtre <b>ID échant.</b>

## Voir également

📖 Éléments de commande fréquemment utilisés [► 15]

📖 Sélectionner des éléments / lignes pour une analyse d'échantillon / une action [► 60]

## 4.3 Spécifier des mesures et actions dans une séquence

Dans la fenêtre **Modifier séquence**, spécifier l'ordre des mesures et des actions pour une analyse. La fenêtre apparaît lorsque l'on clique dans la fenêtre **Séquence** sur **Ajouter** ou sur **Insérer**.

Edit sequence

Selection Row number: 18


Samples  
 QC  
 Reag. blank  
 QC blank DL  
 Calibration  
 Recalibration  
 IEC solutions  
 Special action  
 Load method

Calibration mode: Standard calibration  
 Prepare std.: manually  
 Number of std.: 5


Line	f(x)	f(x=0)	w(x)	Check	Unit
Al396.152	lin	+	C	-	µg/L
As188.979	lin	+	C	-	µg/L
As193.698	lin	+	C	-	µg/L
Cd214.441	lin	+	C	-	µg/L
Cd226.502	lin	+	C	-	µg/L
Cr267.716	lin	+	C	-	µg/L
Cu324.754	lin	+	C	-	µg/L
Fe259.940	lin	+	C	-	µg/L

Mesures et actions possibles


Selon les réglages de la méthode, il est possible de spécifier plusieurs mesures et actions pour une analyse.

Échantillon / action	Description
<b>Échantillons</b>	Mesurer le nombre d'échantillons entré sous <b>Nombre</b>
<b>Échant. QC</b>	Mesurer un échantillon QC et l'exploiter conformément à la spécification dans la méthode  Dans la liste, sélectionner un échantillon spécifié dans la méthode. Les paramètres de l'échantillon QC sont affichés dans le champ situé à côté.
<b>Blanc réactif</b>	Mesurer la valeur à blanc sans analyte
<b>Blanc QC LD</b>	Mesurer la valeur à blanc pour la détermination des limites de détection et de quantification selon le procédé par valeur à blanc
<b>Étalonnage</b>	Mesurer les échantillons d'étalonnage et calculer l'étalonnage conformément à la spécification dans la méthode
<b>Ré-étalonnage</b>	Mesurer l'échantillon d'étalonnage prévu pour le ré-étalonnage et calculer un ré-étalonnage
<b>Ajout éch.</b>	Pour le procédé d'étalonnage Étalonage par addition  Ajouter cet échantillon et déterminer la courbe d'étalonnage ainsi que la concentration d'échantillon
<b>Ajout blanc</b>	Pour le procédé d'étalonnage Étalonage par addition et la correction de la valeur à blanc sur la base de la concentration  Ajouter cet échantillon à blanc et déterminer la valeur à blanc
<b>Solutions IEC</b>	Seulement pour les corrections de crête avec IEC  Mesurer les solutions IEC
<b>Action spéciale</b>	Ces actions ne concernent pas directement la mesure des échantillons (voir ci-dessous).
<b>Charg. méthode</b>	Charger une méthode enregistrée, par exemple pour démarrer une autre analyse au sein de la séquence  Avec  , ouvrir la fenêtre de la base de données avec les méthodes enregistrées. Sélectionner l'une des méthodes enregistrées.

## Actions spéciales

Action	Description
<b>Éteindre le plasma</b>	Supprimer le plasma
<b>Mesure du courant noir</b>	Exécuter des mesures de l'obscurité supplémentaires Lors de cette mesure du courant d'obscurité, le signal est déterminé avec obturateur fermé. La mesure de l'obscurité s'effectue toujours automatiquement, y compris si elle n'a pas été ajoutée dans la séquence.
<b>Temps d'attente</b>	Attendre le temps (en minutes) indiqué dans le champ puis poursuivre l'analyse Lors de l'utilisation d'un distributeur d'échantillons, la canule reste dans la position de rinçage et du liquide de rinçage est aspiré.
<b>Pause</b>	Arrêter l'analyse La séquence peut ensuite être poursuivie en cliquant sur  ou sur le point de menu <b>Routine   Continuer</b> .
<b>Bip</b>	Faire retentir un signal sonore du PC, par exemple pour indiquer la fin de l'étalonnage
<b>Répète / Tant que</b>	Définir une boucle (répétition) dans la séquence. La partie de la séquence comprise entre le point de départ <b>Répète</b> et le point final <b>Tant que</b> est répétée jusqu'à ce que le critère d'annulation soit rempli. Pour la condition d'annulation, il est possible de saisir un nombre de passages en boucle ou une durée en minutes. Lors d'une mesure en ligne (dans le cadre d'une maintenance à distance), l'option <b>autom.</b> doit être activée. En mode manuel, cela empêche la demande de dosage de l'échantillon.
<b>Afficher étalonnage</b>	Pendant que la séquence se déroule, afficher la courbe d'étalonnage jusqu'à ce que le temps d'attente (en minutes) soit écoulé. Le logiciel reprend la mesure une fois le temps écoulé ou après avoir cliqué sur <b>OK</b> . Si l'action <b>Afficher étalonnage</b> est cochée sans entrer un temps d'attente, le logiciel ne reprend la mesure qu'après confirmation de l'étalonnage avec <b>OK</b> . Avec un clic sur le bouton <b>Arrêter</b> dans la fenêtre <b>Étalonnage</b> le logiciel ferme la fenêtre et interrompt le processus d'analyse indépendamment du temps d'attente réglé.
<b>Rinçage système</b>	Rincer les trajets d'échantillon jusqu'à la torche avec de la solution de rinçage en marche normale Entrer le temps de rinçage dans le champ de saisie.

## Spécifier la séquence

- ▶ Ouvrir la fenêtre **Séquence** en cliquant sur .
- ▶ Cliquez sur **Ajouter**.
  - ✓ La fenêtre **Modifier séquence** apparaît.
- ▶ Cochez les actions nécessaires dans l'ordre et transférez-les dans le tableau des séquences avec **Accepter**.
- ▶ Confirmez la dernière action avec **OK**.
  - ✓ Retournez à la fenêtre **Séquence**. Le tableau des séquences contient maintenant toutes les actions dans l'ordre de la sélection.
- ▶ Le pré-réglage des éléments à analyser dans le tableau de séquences avec l'option **Tous**. En cliquant sur la case du tableau **Éléments** de l'échantillon/ action voulue, vous pouvez modifier ce réglage dans la fenêtre.

- ▶ Si le distributeur d'échantillons est utilisé :  
Définissez la position **Pos** des échantillons dans le changeur d'échantillons. Les positions des échantillons d'étalonnage et QC sont automatiquement reprises de la méthode. Cependant, vous pouvez modifier ici les positions qui sont toujours prioritaires parmi les positions réglées dans la séquence.

Entrer de préférence les données des échantillons à examiner dans la fenêtre **ID échant.** et les transférer ensuite dans la liste de séquences.

## 4.4 Sélectionner des éléments / lignes pour une analyse d'échantillon / une action

Dans la séquence, tous les éléments pour l'analyse d'échantillons ou l'exécution d'actions sont activés dans le pré-réglage. Si vous souhaitez exclure des éléments pour l'analyse d'un échantillon ou une action, procéder comme suit :

- ▶ Cliquer dans la fenêtre **Séquence** sur la cellule de tableau de l'échantillon voulu ou de l'action voulue. La fenêtre **Sélectionner éléments et lignes** apparaît.  
Cochez la case **Afficher les éléments/raies de la méthode chargée**.
  - ✓ Tous les éléments/lignes réglés dans la méthode sont marqués en bleu dans la liste **Éléments**.
- ▶ Pour exclure complètement un élément, supprimez le marquage en cliquant sur l'élément correspondant. Pour activer l'élément, cliquer de nouveau dessus.
- ▶ Si, dans la méthode, plusieurs lignes sont définies pour un élément et que vous ne souhaitez utiliser que certaines de ces lignes, marquez dans la liste **Raie** la ligne voulue en cliquant dessus.
- ▶ Les boutons **Tous** et **Aucun** permettent d'activer tous les éléments ou d'exclure complètement tous les éléments pour l'analyse / action.
- ▶ Avec l'option **Ne pas (invertir la sélection)**, tous les éléments / lignes marqués sont exclus de l'analyse / action. Seuls les éléments / lignes non marqués sont analysés. Un « **non** » apparaît avant la liste des éléments / lignes.

Tous les éléments / lignes sélectionnés figurent dans le champ d'édition. Les éléments / lignes peuvent être édités directement dans la case du tableau après le retour dans la fenêtre de séquences.

Fenêtre Sélectionner éléments et lignes

Select elements and lines - no method lines

Elements	Lines
Al	Al396.152
As	As188.979
Cd	As193.698
Cr	Cd214.441
Cu	Cd226.502
Fe	Cr267.716

Not (invert selection)         

Show elements/lines of the currently loaded method

Al, Cr, Fe, As188.979, Cd226.502

Examples: (1) Cu123.56, 55, Cu, Fe123.34 (2) not Fe (3) all


## 5 Données d'informations échantillon (ID échantillon)

Les données d'informations échantillon (ID échantillon) comportent pour les échantillons d'analyse actuels et les échantillons QC les données spécifiées telles que le nom d'échantillon, la position sur le distributeur d'échantillons, la pesée, la dilution ou l'unité de concentration. Il est possible de reprendre les noms d'échantillon et les positions dans le tableau en cliquant. Les données d'informations échantillon sont enregistrées dans un tableau au format CSV et peuvent également être éditées dans un tableur, p. ex. Excel. L'inverse est également possible, les tableaux créés de manière externe peuvent être importés dans ASpect PQ.

La fenêtre **ID échant.** s'ouvre en cliquant sur  dans la barre de symboles.

### 5.1 Créer, enregistrer et ouvrir des données d'informations échantillon


Créer un nouvel ensemble d'identifiants échantillon

- ▶ Dans la barre de symboles, cliquez sur  ou sélectionnez le point de menu **Outils | ID échant.** ou **Fichier | Nouveau fichier données échantillon.**
  - ✓ La fenêtre **ID échant.** apparaît.
- ▶ Spécifiez les données pour les échantillons et les échantillons QC.
- ▶ Reprenez l'enregistrement en cliquant sur **Transférer à la séquence** dans une séquence.
  - ✓ Les échantillons sont activés et utilisés pour la prochaine analyse. Les ID échantillons peuvent aussi être enregistrés pour une analyse ultérieure.

Enregistrer des ID échantillons

- ▶ Dans la fenêtre **ID échant.**, cliquez sur **Enregistrer** ou sélectionnez le point de menu **Fichier | Enregistrer | Infos. échantillon.**
- ▶ Enregistrez les enregistrements dans la fenêtre standard **Enregistrer sous.**
  - ✓ Les ID échantillons sont enregistrés au format CSV. Les données peuvent être chargées pour d'autres analyses ou modifiées dans un logiciel de tableur.


Ouvrir les données d'informations

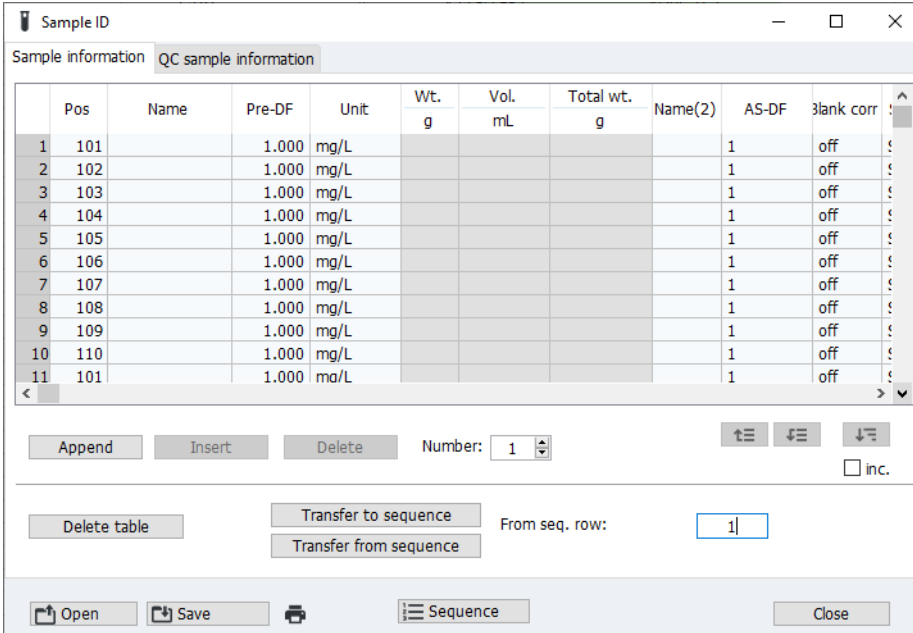
- ▶ Vous pouvez ouvrir une ID échantillon de l'une des manières suivantes :
  - Dans la barre d'outils, cliquer sur le symbole  à côté du champ **Échantillons.**
  - Sélectionner le point de menu **Fichier | Ouvrir le fichier données échantillon.**
  - Dans la fenêtre **ID échant.**, cliquer sur **Ouvrir.**
- ▶ Sélectionnez le fichier dans la fenêtre par défaut **Ouvrir.**
  - ✓ Les ID échantillons sont affichés dans la fenêtre **ID échant.** et peuvent être utilisés pour la prochaine analyse.

#### Voir également

-  Spécifier des informations échantillons [▶ 64]

## 5.2 Fenêtre ID échant. | Infos. échantillon

Dans la fenêtre **ID échant.**, spécifier les échantillons et les échantillons QC. Outre le nom et la position sur le distributeur d'échantillons, il est possible de saisir des paramètres importants pour l'analyse. Cliquer sur  pour ouvrir la fenêtre **ID échant. | Infos. échantillon**.



Sample ID

Sample information QC sample information

	Pos	Name	Pre-DF	Unit	Wt. g	Vol. mL	Total wt. g	Name(2)	AS-DF	Blank corr
1	101		1.000	mg/L					1	off
2	102		1.000	mg/L					1	off
3	103		1.000	mg/L					1	off
4	104		1.000	mg/L					1	off
5	105		1.000	mg/L					1	off
6	106		1.000	mg/L					1	off
7	107		1.000	mg/L					1	off
8	108		1.000	mg/L					1	off
9	109		1.000	mg/L					1	off
10	110		1.000	mg/L					1	off
11	101		1.000	ma/L					1	off

Append Insert Delete Number: 1

Delete table Transfer to sequence From seq. row: 1 Transfer from sequence

Open Save Sequence Close

Onglet Infos. échantillon

L'onglet **Infos. échantillon** comprend une liste des échantillons et de leurs propriétés.

Colonne du tableau	Description
<b>Pos</b>	Position de l'échantillon dans le distributeur d'échantillons
<b>Nom</b>	Nom d'échantillon Cette entrée est en option. Nbre max. de caractères : 20
<b>FD</b>	Pour le type d'unité <b>liquide</b> et <b>solide</b> Le facteur de pré-dilution de l'échantillon désigne le facteur déterminant la dilution de l'échantillon original avant que ce dernier ne soit placé dans le distributeur d'échantillons ou amené dans le plasma lorsqu'un distributeur d'échantillons n'est pas utilisé. Le facteur est nécessaire pour le calcul de la concentration de l'échantillon d'origine ( <b>Conc. 2</b> ).
<b>Unité</b>	Unité pour la concentration de l'échantillon
<b>Poids</b>	Pesée en grammes (uniquement pour le type d'unité <b>solide</b> ) Masse de l'échantillon d'origine, dilué dans la solution lors du traitement initial de l'échantillon. La pesée est nécessaire pour le calcul de la concentration de l'échantillon d'origine ( <b>Conc. 2</b> ).
<b>Vol.</b>	Volume total ou volume de remplissage en mL (seulement pour le type d'unité <b>solide</b> )
<b>Pds.tot.</b>	Pesée totale de l'échantillon et du diluant en gramme (seulement pour le type d'unité <b>liquide grav.</b> par exemple pour les huiles).
<b>Nom (2)</b>	Autre nom d'échantillon Cette entrée est en option. Nbre max. de caractères : 20
<b>AS-FD</b>	Facteur de dilution du distributeur d'échantillon

Colonne du tableau	Description
Corr. blc	Correction de valeur à blanc (seulement pour le type d'échantillon <b>ID éch.</b> ) <b>arrêt</b> Aucune correction de valeur à blanc n'est effectuée. <b>marche</b> Pour le calcul de la concentration de l'échantillon d'origine, la dernière valeur à blanc mesurée dans la séquence est soustraite. Le procédé de correction de valeur à blanc peut être sélectionné dans la fenêtre <b>Options   Étalonnage</b> .
Type éch.	Sélection entre <b>ID éch.</b> et <b>Blanc</b>
Éléments	Éléments ou lignes à analyser dans l'échantillon Après un clic sur la case du tableau apparaît la fenêtre <b>Sélectionner éléments et lignes</b> , dans laquelle ces réglages sont effectués.

## Boutons

Boutons	Description
Ajouter	Entrer le nombre de nouvelles lignes à la fin de la liste.
Insérer	Insérer le nombre de nouvelles lignes avant l'emplacement de liste marqué.
Effacer	Supprimer la liste marquée.
Nombre	Champ d'entrée pour le nombre de lignes à insérer.
Effacer tableau	Effacer toute la liste d'informations échantillons.
Transférer à la sé- quence	Transférer les noms d'échantillons, les positions dans le distributeur d'échantillons et les éléments à analyser dans la liste de séquences. La première ligne de la liste de séquences à partir de laquelle les données d'échantillons doivent être transférées est définie dans le champ d'entrée <b>à partir de la ligne</b> .
Transférer de la sé- quence	Transférer les noms d'échantillons, les positions dans le distributeur d'échantillons et les éléments à analyser depuis la liste de séquences dans le tableau ID échantillons. La première ligne de la liste de séquences à partir de laquelle les données d'échantillons doivent être transférées doit être définie dans le champ d'entrée <b>à partir de la ligne</b> .

Onglet Informations échant. QC Comme sur l'onglet **Infos. échantillon** les échantillons QC figurent sur cet onglet. En outre, la colonne **Type** comporte les informations sur le type QC. La colonne **Unité** disparaît car l'unité est définie dans la méthode. Avec des échantillons QC, la correction de la valeur à blanc est définie dans la méthode et peut être sélectionnée ici.

## Bouton



Bouton	Description
Transférer à la sé- quence	Transférer les noms d'échantillons QC et les positions dans le distributeur d'échantillons dans la liste de séquences

## Voir également

- 📖 Options pour le déroulement de l'analyse [▶ 139]
- 📖 Sélectionner des éléments / lignes pour une analyse d'échantillon / une action [▶ 60]
- 📖 Spécifier les unités [▶ 132]

## 5.3 Spécifier des informations échantillons





Si d'autres données sur les échantillons ou les échantillons QC sont nécessaires pour l'analyse, p. ex. la pesée ou le facteur de pré-dilution, alors ces données doivent être spécifiées dans la fenêtre **ID échant.**. Ici, vous pouvez transférer des noms d'échantillon et des positions spécifiés dans le distributeur d'échantillons dans la séquence.

- ▶ Ouvrez la fenêtre **ID échant. | Infos. échantillon** en cliquant sur .
- ▶ Entrez dans le champ **Nombre** le nombre d'échantillons à analyser. Puis cliquez sur **Ajouter** pour ajouter les lignes au tableau.
- ▶ Entrez pour chaque échantillon dans le tableau les informations nécessaires.
- ▶ Si les entrées sont identiques dans une colonne, vous pouvez copier avec  l'entrée de la case marquée dans les cases suivantes d'une colonne. Si vous cochez les cases **inc.** (pour incrément), la valeur est à chaque fois augmentée de 1 lors du transfert de l'information dans la case suivante. Ainsi, vous pouvez facilement occuper par exemple les places successives dans le distributeur d'échantillons ou numéroter en continu un nom d'échantillon.
- ▶ Vous pouvez copier dans le presse-papier Windows les textes des champs de saisie et de les réinsérer. Pour ce faire, utilisez la combinaison de touches CTRL+C et CTRL+V ou utilisez la commande du menu contextuel après fait un clic droit sur la cellule du tableau.
- ▶ Quand vous avez entré toutes les informations, entrez dans le champ **à partir de la ligne** la ligne dans la séquence à partir de laquelle vous souhaitez reprendre les entrées d'informations échantillons. Transférez les informations en cliquant sur **Transférer à la séquence**.
- ▶ Spécifiez les informations échantillon QC de la même façon dans la fenêtre **ID échant. | Informations échant. QC**. Reprenez les informations échantillon QC en cliquant sur **Transférer à la séquence** dans la séquence.
  - ✓ Les informations échantillons sont utilisées pour la prochaine analyse.

## 6 Effectuer les analyses et calculer les résultats

### 6.1 Aperçu des commandes de menu et des boutons pour démarrer les analyses dans la fenêtre principale

Les routines de mesure (processus d'analyse basés sur une séquence) peuvent être démarrées avec les symboles dans la barre de symboles ou via le menu **Routine**.

Symbole	Point de menu	Fonction
	Routine   Démarrer la séquence	Démarrer une routine de mesure
	Routine   Exécuter ligne(s) de séquence...	Routine Exécuter la / les ligne(s) marquées de la séquence. Plusieurs lignes peuvent être sélectionnées à l'aide de la souris et avec la touche Ctrl ou Maj enfoncée.
	Routine   Arrêter	Interrompre une routine de mesure
	Routine   Continuer	Reprendre une routine de mesure interrompue

### 6.2 Activer le spectromètre et allumer le plasma



#### ATTENTION

##### Risque d'intoxication par l'ozone et les gaz nitreux

- Avant d'allumer le plasma, activer le dispositif d'aspiration.
- Laisser le dispositif d'aspiration activé pendant le fonctionnement.

Afin de garantir une utilisation du plasma en toute sécurité, l'appareil surveille les conditions suivantes via des circuits de sécurité.

- La porte du compartiment d'échantillon est fermée.
- La torche plasma (torche) se trouve en position de travail.
- Le refroidissement est suffisant.
- L'aspiration de l'air sortant est activé.
- L'alimentation en argon est assurée.

Vous ne pouvez allumer le plasma que si toutes les conditions sont respectées. Si un des circuits de sécurité signale une panne en cours de fonctionnement, l'appareil éteint le plasma.

Allumer plasma

- ▶ Allumer le PC au commutateur principal et démarrer le système d'exploitation.
- ▶ Allumer l'appareil ICP-OES via le commutateur principal.
- ▶ Ouvrir l'alimentation en argon. Régler la pression d'admission d'argon sur 500 ... 700 kPa (5 ... 7 bar).
- ▶ Allumer le dispositif d'aspiration.
- ▶ Allumer le refroidisseur en circuit fermé au commutateur principal.



- ▶ Ouvrir les portes vers le compartiment de plasma. Vérifier que la torche est en position de démarrage. Pour cela, la pointe de l'injecteur doit se trouver 1 ... 2 mm sous le bord inférieur de la bobine d'induction.
- ▶ Contrôler que le cône de la fenêtre pour observation axiale n'est pas encrassé ni usé. Contrôler avec le clé à griffe que le cône est bien installé.  
**i** REMARQUE ! Lorsque le cône est desserré, il ne sera pas suffisamment refroidit et corrodés.
- ▶ Fermer la porte du compartiment de plasma.
- ▶ Avec le PlasmaQuant 9200 Elite : Mettre l'éclairage du compartiment d'échantillon optionnel en marche.
- ▶ Vérifier les tuyaux de pompe. Remplacer les tuyaux s'ils ne sont plus élastiques ou présentent une forte usure.
- ▶ Tendre les tuyaux de la pompe entre les butées dans la pompe sur l'appareil ICP-OES.
- ▶ Faire passer l'étrier sur les tuyaux et attacher les guides avec les leviers d'appui. Veiller à ce que les leviers d'appui s'enclenchent !  
**i** REMARQUE ! Observer ce faisant le sens de la pompe. La pompe tourne en sens inverse des aiguilles d'une montre.
- ▶ Vérifier qu'il y a suffisamment de solution de rinçage pour l'analyse dans la bouteille.  
**i** REMARQUE ! La solution de rinçage doit avoir la même acidité que les échantillons et les standards. Sauf disposition différente, utiliser une solution de 2 % d'acide nitrique.
- ▶ Contrôler le niveau de remplissage de la bouteille de déchet et vider la bouteille s'il n'y a pas assez de réservoir disponible pour l'analyse.
- ▶ En mode manuel sans distributeur d'échantillon, plonger le tuyau d'aspiration d'échantillon dans la solution de rinçage. Pendant l'allumage du plasma, il ne doit pas y avoir de flux d'air.
- ▶ Démarrer le programme ASpect PQ.
- ▶ Procéder aux réglages suivants dans la fenêtre **Démarrage rapide** :
  - Sélectionner l'option **Routine** ou **Développement de méthodes**.
  - Lors de l'utilisation du kit HF; sélectionner l'option **Céramique** sous **Torche** pour ajuster la sensibilité du capteur optique de plasma.
  - En option : Dans la zone **Feuille** pour le démarrage rapide, sélectionner les feuilles de calcul préparées, p. ex. pour l'examen des impuretés élémentaires dans les produits pharmaceutiques conformément à USP 232/233. Les feuilles de calcul contiennent les paramètres de la méthode et les séquences préparées.
- ▶ Si le logiciel est démarré avec une fiche de travail, fermer le démarrage rapide dans la fenêtre **Démarrage rapide** avec **OK**.
- ▶ Si le logiciel est démarré sans fiche de travail, cliquer sur **Passer le démarrage rapide** et accéder à l'interface d'ASpect PQ.
- ▶ Si le système a été trop longtemps hors service ou si la chambre de nébulisation est démontée, rincer la chambre de nébulisation et la torche avec du gaz de nébuliseur pour faire sortir l'air du système. Cliquer sur **▲** pour ouvrir la fenêtre **Plasma | Contrôle**, puis cliquer sur **Purger la chambre de nébulisation**.
- ▶ Allumer le plasma. Pour cela, dans la fenêtre **Plasma | Contrôle**, cliquer sur le bouton **Allumer le plasma**.
  - ✓ Il s'ensuit alors une phase de démarrage, au cours de laquelle la torche est rincée avec de l'argon et les circuits de sécurité de l'appareil ICP-OES sont contrôlés. Si tout est en ordre, le plasma est allumé.

- ▶ Observez si le plasma s'est formé correctement. Le plasma doit avoir une forme de cône, sortir de la bobine d'induction et s'effiler en forme de pointe vers le haut.
- ▶ Si un plasma en anneau apparaît, le plasma se forme uniquement dans la bobine d'induction ou un crépitement se fait entendre. Appuyez ensuite sur l'interrupteur rouge de désactivation du plasma de l'appareil.
- ▶ Avant le prochain essai d'allumage, vérifiez que le tuyau d'échantillon est plongé dans la solution de rinçage et que l'alimentation en gaz et le refroidissement en circuit fermé fonctionnent bien.
  - ✓ Le spectromètre n'est refroidi qu'après un allumage réussi et la formation d'un plasma stable. Après 1 ... 2 min, la routine d'allumage est terminée et la pompe à tuyaux est démarrée. Le spectromètre d'émission est prêt pour la mesure.
- ▶ Ne procéder à d'autres réglages sur le système d'analyse que maintenant et démarrer la routine de mesure.

#### Voir également

 Démarrer l'ASpect PQ [▶ 7]

## 6.3 Supprimer le plasma et éteindre le spectromètre

- ▶ À la fin de l'analyse, pomper du liquide de rinçage à travers le système pendant 3 minutes puis de l'eau pendant 1 minute. Faire ensuite se vider l'appareil. Si vous devez remplacer les tuyaux, ils ne doivent plus comporter d'acide !
- ▶ Éteindre le plasma dans le programme ASpect ICP en cliquant sur  dans la barre d'outils.  
Sinon, ouvrir la fenêtre **Plasma** avec  et cliquer sur **Éteindre le plasma**.
- ▶ Arrêter le programme ASpect PQ avec **Fichier | Quitter**.
- ▶ Acquiescer la désactivation du gaz de rinçage pour le détecteur avec **Oui** si vous voulez désactiver le gaz de balayage.  
Si le travail est interrompu pendant une courte période (jusqu'à 30 min) ou si vous travaillez dans la plage d'UV, ne désactivez pas le gaz de rinçage. Ce faisant, vous gagnez du temps d'attente lors de l'allumage jusqu'à ce que le détecteur soit suffisamment balayé. Laisser l'appareil en marche pendant la pause de mesure.
- ▶ Attendre l'affichage du message indiquant que l'appareil et le refroidissement peuvent être désactivés.
- ▶ Éteindre l'appareil ICP-OES et le cas échéant, éteindre le distributeur d'échantillons avec l'interrupteur d'alimentation.
- ▶ Dans le cadre de mesures quotidiennes, vous pouvez également éteindre l'appareil ICP-OES via l'interrupteur de mise en veille situé à l'avant de l'appareil. Une tension d'alimentation est toujours présente sur l'appareil. En mode Veille, l'alimentation en gaz est arrêtée.
- ▶ Détendre les tuyaux de pompe sur l'appareil ICP-OES. Défaire le levier d'appui de manière à ce que l'étrier de serrage n'appuie plus sur les tuyaux et tirer la butée d'arrêt de tuyau sur un côté de la pompe hors du blocage.
- ▶ Si le distributeur d'échantillons est utilisé, détendre le tuyau de pompe de la même manière.
- ▶ Fermer l'alimentation en gaz après avoir désactivé l'appareil.
- ▶ Éteindre le refroidisseur en circuit fermé au commutateur principal.
- ▶ Éteindre l'unité d'aspiration.

- ▶ Quitter Windows et éteindre le PC.
  - ✓ L'analyseur est ainsi désactivé.



## REMARQUE

Avant de désactiver le l'appareil ICP-OES, attendre la fin de la phase de refroidissement ! Avant d'éteindre le plasma, attendre encore au moins 30 secondes avant de désactiver l'appareil avec l'interrupteur secteur.

## 6.4 Démarrage de la routine de mesure

Créer une méthode et une séquence en tant que préparation pour une mesure ou utiliser la fiche de travail préparée.


Le cas échéant, préparer un ID échantillon contenant d'autres informations échantillons, comme les dilutions.

Préparer l'appareil pour la mesure :

- Allumer le PC. Mettre l'appareil et les accessoires en marche, puis allumer le plasma.

Préparer les échantillons pour la mesure, par exemple sur la tablette du distributeur d'échantillons.

Démarrer la mesure

- ▶ Allumer le PC et démarrer le système d'exploitation.
- ▶ Mettre le spectromètre d'émission et les accessoires en marche. Allumer le plasma.
- ▶ Charger une méthode :
  - Dans la barre d'outils, cliquer sur le symbole de dossier à côté du champ **Méth..** Sélectionner la méthode dans la fenêtre **Ouvrir la méthode.**
- ▶ Créer une nouvelle séquence ou charger une séquence existante :
  - Au début, de la séquence, effectuer un étalonnage.
  - Lors du chargement d'une séquence, veiller à ce que l'étalonnage corresponde à la méthode. Les lignes d'analyse de l'étalon doivent correspondre avec les lignes d'analyse que vous avez sélectionnées dans la méthode dans l'onglet **Étalonnage.**
  - Après l'étalonnage, mesurer un échantillon QC pour vérifier l'exactitude de l'étalonnage.
- ▶ Si nécessaire, créer un tableau d'ID échantillon avec d'autres informations concernant les échantillons.
- ▶ Démarrer la routine de mesure en cliquant sur  ou avec le point de menu **Routine | Démarrer la séquence.**
- ▶ Dans la fenêtre **Démarré**, sélectionner un nom de fichier pour le fichier de résultats. Sauvegarder le résultat dans un nouveau fichier ou le joindre à un fichier existant. Il n'est pas possible d'écraser un fichier existant.
  - ✓ Après le choix du nom de fichier, la routine de mesure débute conformément aux paramètres dans la méthode et la séquence. En cas d'utilisation du distributeur d'échantillon, la mesure a lieu automatiquement.
- ▶ En cas de distribution manuelle d'échantillon sans distributeur d'échantillon, suivre les consignes de préparation d'échantillons à l'écran.

### Voir également

 Options pour le déroulement de l'analyse [▶ 139](#)


## 6.5 Affichage et sauvegarde des résultats pendant le déroulement de l'analyse

Affichage pendant le déroulement de l'analyse

Pendant la routine de mesure, les résultats sont affichés en temps réel dans la fenêtre principale. Il est également possible d'afficher d'autres fenêtres avec le résultat actuel.

- **Fenêtre du spectre:** Affichage de la ligne d'analyse
- **Courbe du signal:** Déroulement du signal de mesure
- **Barres graphiques:** Valeurs de mesure dans un diagramme à barres
- **Diagnostic Plasma:** Rapport sur le plasma
- **Conc. échant. dans courbe étalon:** Valeurs d'échantillon dans la courbe d'étalonnage

Procéder à la sélection de cette fenêtre d'affichage dans la fenêtre **Options | Séquence**. Les fenêtres d'affichage peuvent être affichées et masquées pendant l'analyse.




- ▶ Ouvrir la fenêtre avec l'ordre de menu **Visée | Ouvrir la fenêtre de résultats** ou via la touche de fonction F7.
- ▶ Masquer la fenêtre avec l'ordre de menu **Visée | Fermer la fenêtre de résultats** ou via la touche de fonction F8.
- ▶  permet d'ouvrir les fenêtres également pendant l'analyse.

Dans la liste de séquence de la fenêtre principale est indiquée le déroulement de la mesure. Les lignes avec les actions qui se suivent sont indiquées par les symboles suivants dans la colonne du tableau :

Symbole	Signification
-	Pas encore mesuré/traité.
O	Mesure en cours.
+	Déjà mesuré/traité.

Boutons dans la barre de symboles

Les boutons suivants sont affichés dans la barre de symboles pendant la mesure :

Bouton	Description
	Ouvrir et fermer la fenêtre d'affichage
	Afficher la fenêtre des méthodes La méthode peut être lue, mais pas affichée.
	Afficher la fenêtre des séquences La séquence peut être élargie pendant que l'analyse est en cours. La fenêtre des séquences comprend le bouton <b>Échantillons</b> , qui permet d'ouvrir la fenêtre <b>ID échant.</b> pour compléter les données d'échantillons.

Enregistrer les résultats pendant l'analyse

Les résultats d'analyse sont directement enregistrés pendant la mesure dans une banque de données dans le chemin standard préréglé ou dans un sous-dossier préalablement défini. Ils sont enregistrés dans une nouvelle base de données ou joints à une base de données existante. Cependant, il n'est pas possible d'écraser une base de données de résultats en choisissant le même nom.

La destination de ces résultats est automatiquement ouverte au démarrage d'une routine de mesure. La fenêtre **Démarré** s'ouvre alors avec les options suivantes pour le fichier de résultats :



Option	
<b>Nom</b>	<p>Entrer le nom de fichier pour la base de résultats</p> <p><b>Nouveau fichier/liste</b> Si coché, un nouveau nom de fichier doit être entré. Le système contrôle si le nom de fichier existe déjà. Les fichiers présents ne peuvent pas être écrasés.</p> <p><b>Ajouter au fichier</b> Les nouveaux résultats sont joints à un fichier de résultats existant. Cliquer sur <b>...</b> permet d'ouvrir une fenêtre de sélection où il est possible de sélectionner un fichier de résultats existant dans la liste.</p>
<b>Dossier</b>	<p>Sélectionner un lien de sauvegarde pour le fichier de résultats</p> <p>Si, dans la fenêtre <b>Options   Séquence</b>, l'option <b>Ajouter date/heure au nom du fichier de résultats</b> est cochée, le nom du résultat est automatiquement étendu à ces indications. Un message concernant l'activation de l'option apparaît dans cette fenêtre.</p>
<b>Description</b>	<p>Entrer une note supplémentaire qui sera sauvegardée avec les résultats de l'analyse</p> <p>Cliquer sur le bouton <b>...</b> permet de sélectionner les descriptions définies par l'utilisateur.</p>
<b>Eteindre le plasma si un problème apparaît</b>	<p>Supprimer le plasma en cas d'interruption de la mesure par un message d'erreur</p>

Le fichier comprend les résultats de mesure et d'exploitation ainsi que des informations d'ID d'échantillon. En outre, les paramètres de la méthode sont enregistrés dans la base de résultats.

La base de résultats est enregistrée avec les extensions « .tps » (paramètres de méthode, intensités et concentrations) et « .spk » (données brutes de spectre).

## 6.6 Interrompre et reprendre le déroulement de l'analyse


Le déroulement de l'analyse peut être interrompu puis repris.

- ▶ Le déroulement de l'analyse peut être interrompu immédiatement avec le point de menu **Routine | Arrêter** ou en cliquant sur .
- ▶ Une routine peut être poursuivie avec **Routine | Continuer** ou .
  - ✓ La fenêtre **Poursuivre la séquence**, dans laquelle est indiqué le statut d'action avant l'interruption, s'ouvre.
  - ✓ Activer l'option **Poursuivre avec la méthode modifiée** en cas de modification de la méthode. Une nouvelle entrée de méthode dans le fichier de résultats a ainsi lieu et une autre version de la méthode est sauvegardée. La mesure peut être poursuivie ainsi :

Option	Description
<b>Continuer</b>	Continuer pour l'échantillon actuel, la ligne actuelle et la mesure statistique actuelle
<b>Première mesure statist.</b>	Continuer pour l'échantillon actuel, la ligne actuelle et la première mesure statistique
<b>Premier élément</b>	Continuer pour l'échantillon actuel, la première ligne et la première mesure statistique
<b>À partir de pos. tableau -&gt;</b>	Poursuivre la séquence à partir de la position du tableau voisine

## 6.7 Répéter des actions de la séquence

Certaines actions dans une séquence peuvent être répétées.

- ▶ Dans la fenêtre principale dans l'onglet **Séquence** ou **Séquence/Résultats**, sélectionner la ou les lignes avec l'action à répéter.  
Effectuer les marquages multiples en cliquant sur les lignes voulues avec la touche Ctrl ou Maj enfoncée.
- ▶ Démarrer la routine de mesure en cliquant sur  ou avec le point de menu **Routine | Exécuter ligne(s) de séquence....**
- ▶ Sélectionner dans la fenêtre **Démarré** un nom de fichier dans lequel le résultat de la mesure répétée doit être enregistré.  
Au choix, sauvegarder le résultat dans un nouveau fichier ou le joindre à un fichier existant. L'écrasement de résultats déjà présents si l'on choisit le même nom de fichier est impossible.
  - ✓ Ensuite débute la répétition de l'action sélectionnée.



### REMARQUE

Si, entretemps, des modifications ont été apportées dans la méthode, la méthode modifiée est utilisée en cas de répétition de la séquence ou certaines lignes et celle-ci est enregistrée en tant que nouvelle version avec les résultats.

## 6.8 Recalculer les résultats d'analyse


Le nouveau calcul des résultats d'analyse sert à rendre effectives dans l'analyse les modifications dans les conditions d'exploitation, par exemple les modifications de la fonction d'étalonnage ou de la méthode. Les modifications des données d'information, par exemple des noms d'échantillons ou des facteurs de dilution nécessite également un nouveau calcul pour les prendre en compte dans la génération des résultats de mesure.

Les données recalculées peuvent au choix être jointes au fichier de résultats actuel ou être sauvegardées dans un nouveau fichier. Toute manipulation des données d'origine est exclue. Si dans un fichier de résultats le nouveau calcul est répété plusieurs fois avec différents paramètres, chaque nouveau calcul se réfère aux données d'origine du fichier de résultats.


**i** REMARQUE ! Avec chaque nouveau calcul, une nouvelle version de méthode est enregistrée.

Options d'entrée dans la fenêtre Retraiter les résultats

Option / champ	Description
<b>Données d'entrée</b>	Sélection des données d'entrée
<b>Nom</b>	Affichage du nom du fichier de résultats dont les données sont recalculées
<b>Informations sur échantillons modifiées</b>	Cocher si les données dans le fichier d'informations échantillon ont été modifiées, par exemple le facteur de dilution. Si l'option n'est pas cochée, les modifications dans le fichier d'informations échantillon ne sont pas prises en compte en cas de nouveau calcul des résultats.
<b>Actualiser les graphiques</b>	Les fenêtres de résultats, par exemple <b>Afficher les spectres</b> , sont mises à jour comme lors de la mesure.
<b>Remarque :</b>	C'est pourquoi le calcul dure plus longtemps.


Option / champ	Description
<b>Fichier de résultats Cible</b>	Sélectionner le lieu où vous voulez enregistrer les nouveaux résultats. <b>Nouveau fichier/liste</b> Enregistrer les données de résultats dans un nouveau fichier Pour le fichier de résultats, sélectionner l'emplacement d'enregistrement des données calculées sous <b>Dossier</b> et <b>Nom</b> . <b>Ajouter au fichier</b> Les données recalculées sont jointes au fichier de résultats existant.
<b>Description</b>	Cette note supplémentaire est enregistrée avec les résultats d'analyse recalculés. L'entrée est nécessaire lorsque le module de conformité 21 CFR Part 11 optionnel est installé. Des descriptions définies par l'utilisateur peuvent être sélectionnées dans la liste.
<b>Recalculer des entrées</b>	Sélectionner les lignes qui doivent être recalculées. <b>Tous</b> Recalculer toutes les entrées dans la liste de résultats. <b>Sélectionner des entrées</b> Recalculer uniquement les lignes de la séquence sélectionnées. Cliquer sur  et sélectionner toutes les lignes de la séquence qui doivent être recalculées dans la fenêtre <b>Sélectionner des entrées</b> . <b>Raies de la méthode actuellement chargée</b> Dans la liste, sélectionner toutes les lignes qui doivent être recalculées. Avec <b>Tout sélectionner</b> , toutes les lignes sont sélectionnées. Avec <b>Désélectionner</b> , toutes les sélections sont retirées dans la liste de lignes.
<b>Modifications temporaires</b>	Enregistrer les modifications temporaires pour le nouveau calcul (corrections de longueurs d'ondes, marquages d'effacement) (Extension de fichier « .rep »). Les fichiers sont ensuite automatiquement chargés avec le fichier de résultats correspondant (du même nom).
<b>Ajouter à la carte de contrôle</b>	Quand cela est activé, les résultats des types d'échantillons QC sont entrés sur l'onglet QC lors du nouveau calcul.



Recalculer

- ▶ Effectuer les modifications dans les paramètres de méthode ou dans la fenêtre **ID échant..**
- ▶ Cliquer sur  ou sélectionner le point de menu **Routine | Retraiter**. La fenêtre **Retraiter les résultats** s'ouvre.
- ▶ Spécifier les données d'entrée (nom, informations d'échantillons modifiées, affichage de résultats modifié), l'emplacement d'enregistrement et le nom du fichier cible.  
**Remarque** : Si un nouveau calcul est effectué en raison de modifications apportées dans les informations d'échantillons, cocher alors l'option **Informations sur échantillons modifiées**. Sinon, ces modifications ne seront pas prises en compte.
- ▶ Sélectionnez les lignes pour le nouveau calcul.
- ▶ Lancer le nouveau calcul avec **OK**. Si aucun fichier cible n'est spécifié, le message « Voulez-vous retraiter sans enregistrer les résultats ? » apparaît.

Remplacer un standard d'étalonnage


Un étalon disponible peut être remplacé par un autre mesuré ultérieurement. Procéder comme suit pour cela :

- ▶ Sélectionner la ligne de l'étalon à remplacer dans la fenêtre principale dans l'onglet **Séquence** ou **Séquence/Résultats**.
- ▶ Démarrer la mesure de la ligne de séquence en cliquant sur .



- ▶ Dans la fenêtre **Démarré**, définir que le résultat doit être joint au fichier existant. Ensuite, la mesure de l'étalon commence.
- ▶ Ouvrir la fenêtre **Retraiter les résultats** en cliquant sur .
- ▶ Cocher l'option **Sélectionner des entrées** et ouvrir la fenêtre portant le même nom en cliquant sur .
- ▶ Sélectionner le dernier étalon mesuré et le déplacer sur la position de l'étalon à remplacer à l'aide des touches fléchées.
- ▶ Sélectionner toutes les lignes qui doivent être recalculées. Décocher alors l'ancien étalon, qui ne doit pas être intégré dans le calcul.
- ▶ Avec **OK**, retourner dans la fenêtre **Retraiter les résultats** et spécifier les données d'entrée, l'emplacement d'enregistrement et le nom du fichier cible.
- ▶ Lancer le nouveau calcul avec **OK**.
  - ✓ Les données sont recalculées pour les lignes sélectionnées.

Remplacer certaines lignes d'un étalon

L'étalon peut également être remplacé comme suit :


- ▶ Sélectionner la ligne de l'étalon à remplacer dans la fenêtre principale dans l'onglet **Séquence** ou **Séquence/Résultats**.
- ▶ Démarrer la mesure de la ligne de séquence en cliquant sur .
- ▶ Dans la fenêtre **Démarré**, définir que le résultat doit être joint au fichier existant. Ensuite, la mesure de l'étalon commence.
- ▶ Dans la liste de résultats, effectuer un clic droit sur l'étalon (la ligne) à remplacer. Dans le menu contextuel, sélectionner le point **Répliques des échantillons'** .
- ▶ Dans la fenêtre **Répliques des échantillons'** , cocher la case **Remplacer par entrée n°** et entrer dans le champ d'entrée le numéro de ligne du standard à remplacer.
- ▶ Démarrez le nouveau calcul comme décrit plus haut.
  - ✓ Les données sont recalculées pour les lignes sélectionnées.

#### Voir également

-  Créer des remarques prédéfinies [▶ 134]
-  Spécifier le contrôle qualité (fenêtre Méthode | QCS) [▶ 47]

## 6.9 Exploiter des mesures en parallèle à une analyse en cours (mode Offline)

En mode mesure, il n'est pas possible d'effectuer d'autres exploitations des résultats. Cependant, si une application est déjà en cours, une autre instance de programme de l'application peut être ouverte en mode Offline. Dans ce mode, il n'y a pas de liaison avec l'appareil. Toutes les autres fonctions comme la création de méthodes ou le chargement et l'exploitation des résultats peuvent cependant être utilisées en parallèle avec le mode de mesure en cours de la première instance de programme.

- ▶ Démarrer le programme dans la deuxième instance de programme avec le point de menu **Fichier | Démarrer la version du programme hors ligne**.
- ▶ Ouvrir le fichier de résultats de la mesure en cours avec le point de menu **Fichier | Ouvrir le fichier de résultats**.  
Les résultats mesurés jusqu'alors sont chargés dans la fenêtre de résultats.
- ▶ D'autres résultats de la mesure en cours peuvent être chargés en cliquant sur  dans la liste d'outils ou sur le point de menu **Visée | Actualiser le liste de résultats**.

- ✓ L'affichage de résultats est mis à jour. Les résultats peuvent continuer à être traités.

**i** REMARQUE ! En cas de nouveau calcul, les résultats recalculés sont enregistrés dans une nouvelle base de données. Il n'est pas possible d'accéder au fichier d'origine.

## 6.10 Affichage des résultats et du déroulement de l'analyse dans la fenêtre principale

Les résultats de mesure et la séquence sont affichés en grand à l'arrière-plan de l'interface de travail dans la fenêtre principale. L'affichage sur différents onglets dans la fenêtre principale donne une bonne vue d'ensemble des résultats de mesure et des exploitations statistiques.

Il est possible de sélectionner les onglets suivants :

- **Séquence/Résultats** (Contenu des onglets **Séquence** et **Résultats** dans un onglet)
- **Séquence** (Affichage de la séquence actuelle)
- **Résultats** (Représentation des résultats de mesure)
- **Aperçu** (Résumé des résultats de mesure)

Dans la barre de statut de la fenêtre de résultats figure le nom de fichier avec le fichier de résultats actuel.

Fenêtre principale d'ASpect PQ avec affichage des résultats

No.	Sample type	Name	Pos.	No.	Name	Line	Type	Ints.	SD(Ints.)	RSD%	Date	Time	Single value(Ints.)
1	Cal-Zero1		101	1	Kal-Null	Alt67.022		14	2	10.84	11.02.2025	12:51	15 14 12
2	Cal-Std1		102	2	AD96.152			129	72	55.87	11.02.2025	12:51	50 189 147
3	Cal-Std2		103	3	CD214.441			16	3	21.03	11.02.2025	12:51	12 18 17
4	Compute calib.			4	CD226.502			9	3	28.79	11.02.2025	12:51	12 9 7
5	Sample		101	5	CD267.716			40	33	82.69	11.02.2025	12:51	35 18 76
6	Sample		102	6	CU327.396			46	13	27.13	11.02.2025	12:51	35 44 60
7	Sample		103	7	Fe259.940			47	9	19.19	11.02.2025	12:51	58 43 41
8	Sample		104	8	NZ31.694			-198	34	16.98	11.02.2025	12:51	-184 -174 -237
9	Sample		105	9	Pb220.353			24	4	16.54	11.02.2025	12:51	19 26 26
10	Sample		106	10	Zn213.856			105	23	21.89	11.02.2025	12:51	87 98 131
11	Sample		107	11	Zn206.200			30	9	30.63	11.02.2025	12:51	23 41 27
12	Sample		108	12	Alt67.022			485	2	0.35	11.02.2025	12:51	486 483 486
13	Sample		109	13	AD96.152			3988	93	2.34	11.02.2025	12:51	4087 3976 3901
14	Sample		110	14	CD214.441			4614	8	0.17	11.02.2025	12:51	4606 4613 4622
15				15	CD226.502			5385	32	0.59	11.02.2025	12:51	5350 5356 5410
16				16	CD267.716			8831	44	0.49	11.02.2025	12:51	8868 8804 8882
17				17	CU327.396			3982	45	1.13	11.02.2025	12:51	3932 4020 3993
18				18	Fe259.940			3948	38	0.95	11.02.2025	12:51	3912 3946 3987
19				19	NZ31.694			3405	17	0.49	11.02.2025	12:51	3398 3424 3393
20				20	Pb220.353			345	3	1.00	11.02.2025	12:51	341 346 347
21				21	Zn213.856			5600	60	1.06	11.02.2025	12:51	5643 5626 5532
22				22	Zn206.200			3735	12	0.31	11.02.2025	12:51	3723 3736 3746
23	Kal-Std.2			23	Alt67.022			2411	30	1.25	11.02.2025	12:51	2385 2405 2444
24				24	AD96.152			19736	283	1.43	11.02.2025	12:51	20039 19691 19478
25				25	CD214.441			22989	213	0.93	11.02.2025	12:51	22767 23009 23192
26				26	CD226.502			27072	106	0.39	11.02.2025	12:51	27083 2696 27172
27				27	CD267.716			43323	225	0.50	11.02.2025	12:51	43469 4343 43064
28				28	CU327.396			19450	104	0.53	11.02.2025	12:51	19481 19534 19334
29				29	Fe259.940			19575	159	0.81	11.02.2025	12:51	19577 19460 19508
30				30	NZ31.694			17495	192	1.10	11.02.2025	12:51	17445 17760 17333
31				31	Pb220.353			1632	14	0.83	11.02.2025	12:51	1640 1640 1617
32				32	Zn213.856			28289	153	0.54	11.02.2025	12:51	28197 28466 28205
33				33	Zn206.200			18746	250	1.33	11.02.2025	12:51	18522 18699 19016
34	Kal-Std.3			34	Alt67.022			4820	32	0.66	11.02.2025	12:51	4786 4849 4824
35				35	AD96.152			38550	324	0.84	11.02.2025	12:51	38924 38349 38376
36				36	CD214.441			46168	53	0.11	11.02.2025	12:51	46216 46175 46111
37				37	CD226.502			54897	473	0.86	11.02.2025	12:51	55633 54716 54540
38				38	CD267.716			89138	460	0.52	11.02.2025	12:51	88623 88647 88604

### 6.10.1 Onglet Séquence/Résultats

L'onglet **Séquence/Résultats** contient les données des deux tableaux **Séquence** et **Résultats**.

Voir également

- 📄 Onglet Séquence [▶ 76]
- 📄 Onglet Résultats [▶ 76]

## 6.10.2 Onglet Séquence

Sur l'onglet **Séquence**, la séquence active est listée.

Il est possible de suivre ici le déroulement de l'analyse pendant l'analyse. Les différents échantillons et fonctions spéciales sont désignés dans la première colonne comme suit :

Symbole	Signification
-	Pas encore mesuré / traité.
O	Mesure en cours.
+	Déjà mesuré / traité.

**i** REMARQUE ! Après la mesure, on peut effectuer une nouvelle mesure d'un échantillon sélectionné.

Pour cela, sélectionner la nouvelle ligne d'échantillon dans la séquence puis appuyer sur  dans la barre d'outils.

## 6.10.3 Onglet Résultats

L'onglet **Résultats** contient tous les résultats de mesure et toutes les exploitations statistiques. Pour un aperçu plus clair, les valeurs sont réparties dans d'autres tableaux. Les onglets pour ce tableau se trouvent au bas de la fenêtre.

Les valeurs sont classées dans l'ordre de la mesure d'échantillons. Pour chaque échantillon, les éléments analysés sont mentionnés.

Tableau Intens./Temps

Le tableau comprend les intensités et les exploitations statistiques conformément à la méthode choisie (fenêtre **Méthode | QCC**).

Colonne	Description
N°	Numéro dans la série d'analyse
Nom	Nom de l'échantillon, du standard ou de l'échantillon/standard QC
Raie	Ligne d'éléments
Type	Standard ou analyte interne
Ints.	Valeur moyenne des intensités mesurées de l'échantillon
SD(Ints.)	Écart-type standard (moyenne statistique)
RSD%	Écart-type moyen (moyenne statistique)
Date/Heure	Heure de la mesure
Répliques (Ints.)	Valeurs individuelles des mesures d'intensité

Tableau Conc.1

Le tableau **Conc.1** indique la concentration analysée de l'échantillon tel qu'il a été amené à l'appareil ICP-OES. L'unité d'étalonnage réglée dans la méthode est utilisée en tant qu'unité.

Colonne	Description
N°	Numéro dans la série d'analyse
Nom	Nom de l'échantillon, du standard ou de l'échantillon/standard QC
Raie	Ligne d'éléments
Type	Standard ou analyte interne
Unité	Unité de concentration

Colonne	Description
Conc.1	Concentration de l'analyte dans l'échantillon / concentration de l'analyte dans le standard
SD1	Écart-type de Conc.1 (moyenne statistique)
RSD%	Écart-type relatif de Conc.1 (moyenne statistique)
R.	Étendue de Conc.1 (valeur médiane statistique)
R.%	Étendue relative de Conc.1 (valeur médiane statistique)
NivConf	Plage de confiance
FD	Facteur de pré-dilution de l'échantillon Facteur duquel l'échantillon original a été dilué avant d'être placé dans le distributeur d'échantillons ou d'être amené dans le plasma en cas de travail sans distributeur d'échantillons
Remarq.	Particularités lors de la détermination de valeur
Ints.	Valeur moyenne des intensités mesurées répétées
SD(Ints.)	Écart-type de l'intensité (moyenne statistique)
Date/Heure	Date de la mesure
Répliques (Ints.)	Valeurs individuelles des intensités des mesures répétées

Tableau Conc.2

Le tableau **Conc.2** indique la concentration de l'échantillon initial. Lors du calcul de Conc.2, les données d'information échantillon sont prises en compte :

- Pré-dilution
- Pesée de solides et de solutions
- Facteur de conversion pour les autres unités

Colonne	Description
N°	Numéro dans la série d'analyse
Nom	Nom de l'échantillon, du standard ou de l'échantillon/standard QC
Raie	Ligne d'éléments
Type	Standard ou analyte interne
Unité	Unité de concentration
Conc.	Concentration de l'échantillon d'origine en prenant en compte les données d'information échantillon
SD2	Écart-type de Conc.2 (moyenne statistique)
RSD%	Écart-type relatif de Conc.2 (moyenne statistique)
NivConf	Plage de confiance de Conc.2
Norm. 100 %	Conc.2 normée en pourcentage
Ints.	Moyennes des intensités ponctuelles déterminées
SD(Ints.)	Écart-type de l'intensité (moyenne statistique)
R(Ints.)	Plage d'intensité (statistique médiane)
Date / Heure	Date de la mesure
Répliques (Ints.)	Valeurs individuelles des mesures d'intensité

Tableau Résultats QC

Les résultats des échantillons QC sont indiqués dans le tableau **Résultats QC** :

- Valeurs de concentration effective et de consigne
- Taux de récupération (tous types sauf valeur à blanc)
- Réactions aux écarts éventuels (tous type sauf valeur à blanc).

Colonne	Description
N°	Numéro dans la série d'analyse
Nom	Nom de l'échantillon, du standard ou de l'échantillon/standard QC
Raie	Ligne d'éléments
Type	Standard ou analyte interne
CQ (pour fonctions d'étalonnage)	<b>R<sup>2</sup>(aj.)</b> ou <b>R.</b> <b>Pente</b> <b>BEC</b> Background Equivalent Concentration
CQ(pour échantillons QC, pas pour valeur à blanc QC)	<b>Conc.1</b> Valeur de consigne <b>Recouvrement</b> Taux de récupération Le taux de récupération de la concentration est déterminé pour les échantillons QC et les étalons QC. Avec la solution initiale QC, la tendance QC et la matrice QC, le taux de récupération de l'augmentation de la concentration due à l'addition est déterminé.
CQ (pour limite de détection à blanc)	<b>SD</b> Écart-type des mesures à blanc <b>LD</b> Limite de détection <b>LQ</b> Limite de quantification
Remarq.	Remarques concernant les résultats QC (par ex. >étal.)
Ints.	Moyenne des intensités ponctuelles mesurées
SD	Écart-type de l'intensité (moyenne statistique)
Date / Heure	Date de la mesure
Répliques (Ints.)	Valeurs individuelles des mesures d'intensité

Tableau Erreur

Si des erreurs ont lieu pendant la mesure, les mesures correspondantes sont indiquées en rouge dans tous les tableaux. Dans le tableau **Erreur**, l'erreur de mesure est documentée par écrit avec le numéro d'erreur.

Tableau Répliques

Le tableau **Répliques** comporte les valeurs individuelles d'intensité et l'intensité de fond correspondante.

Tableau ID échant.

Le tableau **ID échant.** contient les données d'informations échantillons.

Colonne	Description
N°	Numéro dans la série d'analyse
Nom	Nom de l'échantillon, du standard ou de l'échantillon/standard QC
Raie	Ligne d'éléments
Pos	Position de l'échantillon dans le changeur d'échantillons
FD	Facteur de pré-dilution  Facteur duquel l'échantillon original a été dilué avant d'être placé dans le distributeur d'échantillons ou d'être amené dans le spectromètre en cas de travail sans distributeur d'échantillons. Le facteur est nécessaire pour le calcul de la concentration de l'échantillon d'origine.

Colonne	Description
<b>Poids</b>	Pesée en grammes Masse de l'échantillon d'origine, dilué dans la solution lors du traitement initial de l'échantillon (en g). La masse est nécessaire pour le calcul de la concentration de l'échantillon d'origine ( <b>Conc. 2</b> ).
<b>Vol.</b>	Volume du solvant dans lequel la pesée correspondante a été diluée (en mL). Cette valeur est nécessaire pour le calcul de la concentration de l'échantillon d'origine ( <b>Conc.2</b> ).
<b>Pds.tot.</b>	Pesée totale, comprend l'échantillon et le diluant (seulement pour le type d'unité <b>liquide, liquide grav.</b> )
<b>Nom(2)</b>	Autre nom d'échantillon dans le tableau d'informations échantillons
<b>AS-FD</b>	Facteur de dilution du distributeur d'échantillon
<b>Corr. blc</b>	Correction de valeur à blanc <b>arrêt</b> Aucune correction de valeur à blanc n'a été effectuée. <b>marche</b> Pour le calcul de la concentration de l'échantillon d'origine, la dernière valeur à blanc mesurée dans la séquence a été soustraite.

## Tableau Personnalisé

Il est possible de sélectionner les paramètres pour la sortie de résultats et leur ordre dans le tableau **Personnalisé**.

- ▶ Cliquer sur le bouton **Sélectionner des colonnes** en bas à droite du tableau.
- ▶ Dans la fenêtre **Sélectionner des colonnes**, sélectionner les paramètres voulus en cliquant avec la souris.
- ▶ Pour modifier l'ordre de l'affichage, marquer le paramètre dont vous voulez modifier la valeur et le déplacer avec les touches **↓** et **↑** dans la liste.
- ▶ Après le retour dans la fenêtre principale, les résultats sont affichés. Vous pouvez modifier la largeur des colonnes du tableau en amenant le curseur sur la ligne du haut du tableau (le curseur devient alors une double flèche) et en élargissant la colonne à la largeur voulue en maintenant le bouton de la souris pressé.

**Remarque :**

La largeur de colonne est enregistrée dans cet affichage. Dans les autres tableaux dans la fenêtre principale, les modifications de la largeur de colonne sont restaurées après avoir quitté.

**Voir également**

- 📖 Options pour le déroulement de l'analyse [▶ 139]
- 📖 Aperçu des marquages dans l'affichage des valeurs [▶ 161]
- 📖 Données d'informations échantillon (ID échantillon) [▶ 61]

### 6.10.4 Onglet Aperçu


Un résumé des résultats de l'analyse se trouve dans l'onglet **Aperçu**. Vous pouvez choisir entre les différentes distributions :

Valeur	Description
<b>Conc.1</b>	Concentration 1
<b>Conc.(RSD%)</b>	Concentration 1 (écart-type relatif)
<b>Conc.2</b>	Concentration 2

Valeur	Description
Conc.2 (RSD%)	Concentration 2 (écart-type relatif)
Ints.	Intensité
Ints. (RSD%)	Intensité (écart-type relatif)
Ints. (SD)	Intensité (écart-type)
LD	Limite de détection
LQ	Limite de quantification
Recouvrement (Val. nominale)	Taux de récupération (valeur de consigne)
R. <sup>2</sup> / Facteur ré-étal.	Degré d'exactitude/facteur de réétalonnage
Norm. 100 %	Concentration normée en pourcentage 2

Activer les champs de contrôle permet d'afficher les types d'échantillons suivants :

- Échantillon
- Échantillon QC
- Sol-étal
- Autres

Ouvrir la fenêtre **Imprimer Aperçu**, à partir de laquelle l'impression des données affichées dans l'aperçu actuel peut être démarrée, avec .

#### Voir également

 Fonctions d'impression dans ASpect PQ [► 119]

## 6.11 Afficher et traiter des valeurs individuelles d'échantillons

Les valeurs individuelles d'un échantillon peuvent être affichées et des valeurs individuelles provenant du calcul de la concentration d'échantillon peuvent être exclues.

- Faire un clic droit sur la ligne dans le tableau de résultats et sélectionner le point **Répliques des échantillons'** dans le menu contextuel.  
Il est également possible de sélectionner la ligne d'échantillon et de sélectionner l'ordre de menu **Visée | Répliques des échantillons'** .

Fenêtre Répliques des échantillons')

Sample single values - [Kal.-Std.4]

### Cd214.441

No.	Ints.	Rem.
1	49212	
2	49319	
3	48608	

No.:

Type:

Name:

Date/Time:

Ints.(Mean):

SD:

RSD:

Replace with entry number:

◀◀ ◀ ▶ ▶▶

[Edit spectra](#)

Affichage des valeurs individuelles (tableau)


Les valeurs individuelles d'échantillons sont affichées dans le tableau.

Colonne du tableau	Description
N°	Numéro de la valeur individuelle dans la mesure d'échantillon
Ints.	Intensité de la valeur individuelle
Conc.1	Concentration de l'analyte dans l'échantillon analysé
Remarq.	<p><b>Aucun</b> La valeur entre dans le calcul de la moyenne d'échantillon.</p> <p><b>#MAN</b> La valeur a été retirée manuellement du calcul de la valeur d'échantillon.</p> <p><b>#KOR</b> La valeur a été automatiquement exclue du calcul de la valeur d'échantillon en raison du test de Grubb pour les valeurs extrêmes.</p>

Indication sur l'échantillon

Champ	Description
N°	Numéro de la valeur dans le tableau de résultats
Type	Type d'élément (échantillon, standard ou type d'échantillon QC)
Nom	Nom d'échantillon
Date / Heure	La date et l'heure de la mesure marquée dans le tableau
Ints.(Moy.)	L'intensité est déterminée au moyen de toutes les valeurs individuelles
SD	Écart-type standard (moyenne statistique). L'affichage est indépendant de la méthode statistique définie pour la mesure.
RSD	Écart-type standard (moyenne statistique) L'affichage est indépendant de la méthode statistique définie pour la mesure. (Moyenne/médiane).

Vous trouverez d'autres boutons et options dans la fenêtre Répliques des échantillons)

Option / boutons	Description
<b>Supprimer / Réactiv.</b>	Retirer la valeur individuelle des échantillons du calcul de la valeur moyenne ou la réactiver pour le calcul
<b>Modifier les spectres</b>	Afficher les spectres de ligne dépendant de la longueur d'onde
<b>Remplacer par entrée n°</b>	Seulement les standards d'étalonnage L'échantillon actuel doit être remplacé par l'échantillon en position <b>Enr.</b> du tableau de résultats lors d'un calcul ultérieur
	Passer d'une ligne d'échantillon individuel à l'autre et d'un échantillon au suivant dans le tableau de résultats

Exclure des valeurs isolées d'échantillon

Il est possible d'exclure manuellement une valeur individuelle du calcul de la moyenne de l'échantillon.

- ▶ Marquer la valeur individuelle à exclure du tableau.
- ▶ **Supprimer** permet de désactiver la valeur pour le calcul de la moyenne d'échantillon lors d'un calcul ultérieur des résultats.
- ▶ **Réactiv.** permet d'inclure la valeur individuelle marquée dans le calcul.

**i** REMARQUE ! Le test de Grubb de valeurs extrêmes permet de rechercher et d'éliminer automatiquement les valeurs extrêmes parmi les valeurs individuelles pendant l'analyse.

### Voir également

📄 Afficher et traiter des spectres d'intensité [► 82]

## 6.12 Afficher et traiter des spectres d'intensité

La représentation des spectres d'intensité dans la fenêtre **Modifier les spectres** sert aux tâches suivantes :

- Déterminer le centre de crête d'une ligne d'analyse et l'enregistrer dans le fichier d'échantillon
- Déterminer la correction de fond selon la matrice d'échantillon et la reprendre dans la méthode
- créer des corrections de spectre
- Identifier des lignes à côté de la ligne d'analyse

Pour chaque mesure dans la fenêtre de résultats, il est possible d'afficher et de traiter les spectres d'intensité.

- ▶ Ouvrir la fenêtre **Modifier les spectres** en double-cliquant sur la ligne d'échantillon voulue dans le tableau de résultats.  
Sinon, faire un clic droit sur la ligne dans le tableau de résultats et cliquer sur **Modifier les spectres** dans le menu contextuel. Il est également possible de sélectionner une ligne d'échantillon et de sélectionner l'ordre de menu **Visée | Modifier les spectres**.

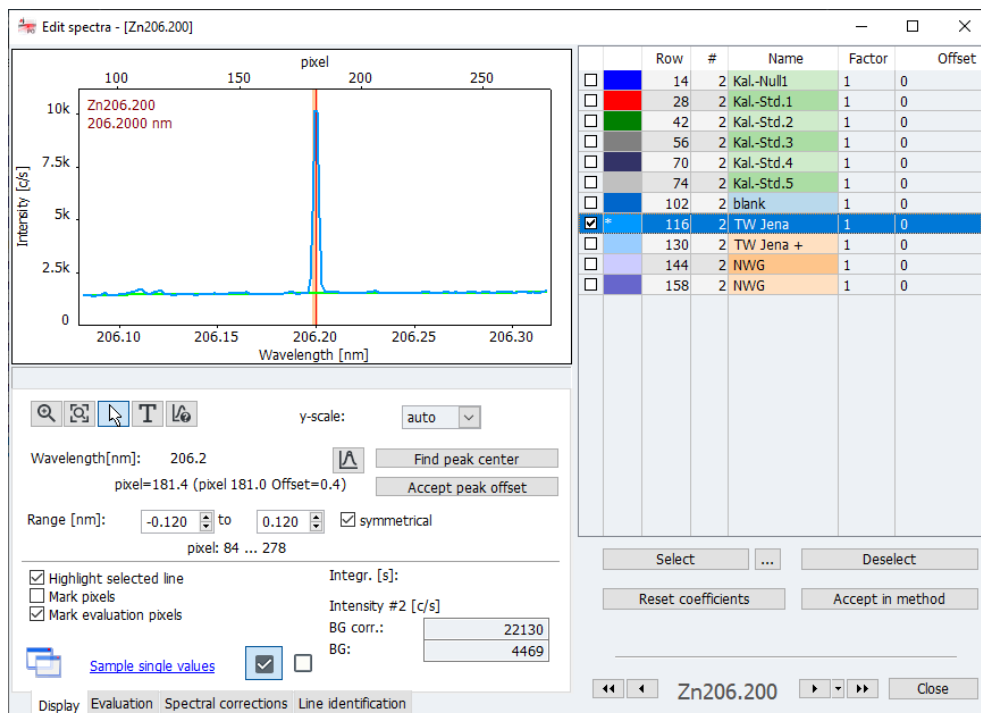
Dans la fenêtre **Modifier les spectres**, tous les échantillons mesurés pour une ligne d'analyse sont listés avec toutes les valeurs individuelles. Il est possible de passer d'une ligne d'analyse à l'autre.

Sur le côté gauche de la fenêtre **Modifier les spectres** se trouvent la représentation graphique du spectre d'intensité des échantillons sélectionnés ou de l'échantillon et quatre onglets pour l'exploitation et le traitement du spectre. Du côté droit, les valeurs individuelles d'échantillon à afficher sont sélectionnées dans un aperçu.

### 6.12.1 Afficher les spectres - fenêtre **Modifier les spectres / Afficher'**)

La fenêtre **Modifier les spectres | Afficher'**) affiche un aperçu des spectres d'échantillons. Il est possible de déterminer la position d'une crête et de reprendre les paramètres trouvés dans les lignes/le fichier de longueur d'onde et la méthode.

Fenêtre Modifier les spectres |  
Afficher')



Sélectionner les spectres / liste  
d'échantillons

Dans la liste d'échantillons sont listées sur le côté droit toutes les valeurs individuelles de la ligne d'analyse.

- ▶ Cocher la case de contrôle des valeurs individuelles que vous voulez afficher dans le graphique.  
Les spectres des valeurs individuelles d'échantillon sont représentés superposés. à chaque spectre est attribuée la couleur du spectre champ à l'avant du tableau.
- ▶ L'échantillon individuel marqué avec la souris (barre bleue dans le tableau) apparaît en gras dans le graphique si l'option **Surligner la raie sélectionnée** dans le coin inférieur gauche de la fenêtre est cochée.
- ▶ Vous pouvez filtrer l'affichage des échantillons / mesures répétées dans la liste d'échantillons et la sélection de l'affichage graphique des spectres (activation de la case de contrôle dans la liste d'échantillons) avec les boutons situés sous le tableau :
  - Cliquer à côté de **Sélectionner** sur **...**
  - Dans la fenêtre **Sélection**, procéder aux réglages suivants :

Option	Description
<b>Tous</b>	Sélectionner toutes les lignes de la liste de résultats dans la fenêtre principale pour l'affichage graphique (activer la case de contrôle pour l'affichage graphique).
<b>de/à</b>	Sélectionner seulement les spectres situés entre les lignes de / à définies de la liste de résultats.
<b>Réplique</b>	Sélectionner les valeurs individuelles d'un échantillon : <b>Tous</b> Sélectionner toutes les valeurs individuelles d'un échantillon. Numéro d'ordre, par exemple « 2 » Sélectionner seulement la valeur individuelle d'un échantillon
<b>Afficher uniquement réplique(s) sélectionnée(s)</b>	Quand cela est actif, seules les entrées pour la mesure répétée sélectionnée sont affichés dans la liste d'échantillons. Quand cela n'est pas actif, tous les spectres individuels sont affichés et les entrées sélectionnées en haut (tous ou de / à) de la fenêtre principale sont chargées.






- Un clic sur **Sélectionner** permet de procéder à l'affichage et à la sélection du spectre avec les paramètres définis plus haut.
- Avec **Désélectionner**, il est possible de désactiver toutes cases pour l'affichage de valeurs individuelles.

- Entrer le facteur et la correction
- ▶ Pour chaque spectre, vous pouvez entrer un facteur et/ou une correction dans le tableau d'échantillons. Un spectre ainsi manipulé est déployé / comprimé et décalé le long de l'axe y.
  - ▶ Un clic sur **Réinitialiser les coefficients** permet de réinitialiser le facteur et la correction. De plus, le spectre est affiché dans son état initial.

Affichage des spectres de ligne

Les spectres sélectionnés sont affichés sur le côté. L'intensité en Counts/seconde est rapportée à la longueur d'onde en [nanomètre]. L'attribution des pixels est représentée sur le bord supérieur du graphique. Le spectromètre est ajusté de telle sorte que le centre de crête est représenté sur le pixel de mesure, par exemple 180. Les décalages du centre de crête doivent être corrigés pour chaque ligne d'analyse, voir plus bas.



Les boutons ont les fonctions suivantes pour la vue du spectre :

Option / bouton	Description
	Activer le zoom graphique. Cliquer et maintenir le bouton gauche de la souris pour marquer la partie du spectre à agrandir.
	Après le zoom, restaurer les coordonnées d'origine.
	Activer le mode marquage sur les affichages de la courbe du signal ou les spectres. Les points de mesure sont sélectionnés avec le bouton gauche de la souris. Les valeurs du point de mesure sélectionné sont affichées dans le champ d'édition sous les boutons.
	Activer le mode texte. Avec le bouton gauche de la souris appuyé, il est possible de sélectionner une zone pour une fenêtre pour ajouter un texte au graphique. En double-cliquant sur un texte existant, on ouvre la fenêtre pour modifier ou effacer le texte. La combinaison Ctrl+clic droit permet de déplacer un texte existant.
	Activer le mode pour l'identification des lignes. En cliquant ou en tirant avec la souris, on cherche dans une base de données de ligne des lignes d'éléments pour la position de longueur d'onde sélectionnée. La ligne trouvée est affichée sous le graphique.
<b>Echelle y</b>	Sélectionner l'échelle du graphique : <b>auto.')</b> Mise à l'échelle automatique : Le spectre est représenté avec une dilatation des ordonnées optimale. <b>Valeur</b> Mise à l'échelle manuelle. Sélectionner dans la liste la limite supérieure des ordonnées.
<b>Raie</b>	Afficher la longueur d'onde de la ligne d'analyse.
	Définir manuellement le centre de crête.
<b>Trouver centre du pic</b>	Chercher la crête automatiquement et corriger le décalage.
<b>Accepter décalage pic')</b>	Enregistrer le décalage de crête dans la bibliothèque de lignes. Le décalage est utilisé à partir de ce moment pour chaque mesure de cette ligne d'éléments.




Option / bouton	Description
<b>Plage [nm]</b>	<p>Sélectionner la plage de longueur d'onde en-dessous ou au-dessus de la ligne d'analyse. Cette plage de longueur d'onde est disponible pour l'exploitation de spectre, par exemple pour la correction de fond.</p> <p>Si la case <b>symétrique</b> est cochée, la plage de longueurs d'onde est aussi grande en-dessous de la longueur d'onde qu'au-dessus.</p> <p>La plage de pixels correspondante est affichée sous les champs d'entrée.</p> <p>Transmettre les réglages concernant la plage de longueur d'onde de la ligne sélectionnée en cliquant sur <b>Accepter dans la méthode</b> dans la méthode de mesure actuelle. Cette plage est utilisée pour l'ajustement dynamique du fond (ou correction automatique du fond) pour le calcul. Les données sont également modifiées dans la fenêtre de méthode dans l'onglet <b>Evaluation</b>.</p>
<b>Surligner la raie sélectionnée</b>	Le spectre individuel marqué dans l'aperçu droit est surligné par une ligne épaisse sur le graphique.
<b>Marquer les pixels</b>	Les pixels sont marqués d'un cercle dans le graphique.
<b>Marquer les pixels d'évaluation</b>	Le pixel d'exploitation central sur le centre de crête est surligné avec une ligne rouge. Si plusieurs pixels sont pris en compte pour l'exploitation, cette zone est marquée en rouge clair.
<b>Intensité</b>	<p><b>Corr. fond</b> Intensité avec correction de fond</p> <p><b>Fond</b> Intensité du fond</p>
<b>Répliques des échantillons')</b>	Lien vers la fenêtre <b>Répliques des échantillons')</b>
<input checked="" type="checkbox"/>	<p>Si le symbole est marqué de cette façon, la ligne est utilisée dans la méthode.</p> <p>De cette façon, vous pouvez sélectionner dans la fenêtre <b>Modifier les spectres</b> les lignes adéquates pendant le développement de la méthode.</p>
<input type="checkbox"/>	Utiliser cette ligne d'analyse pour cette méthode.

Définir automatiquement le centre de crête

Pendant le développement de la méthode, vous devez corriger les décalages de crête dus à l'appareil et les décalages causés par des interférences de lignes, par exemple les doublons.

- ▶ Cliquer sur **Trouver centre du pic**. La détermination automatique du centre de crête permet de très bien déterminer la plupart des crêtes.  
Alternativement, cliquer sur  et marquer la crête manuellement dans le spectre.
- ▶ En option, il est possible de recalculer les résultats pour évaluer le décalage de crête. Passer à la fenêtre de résultats et démarrer un nouveau calcul en cliquant sur .
- ▶ Enregistrer le décalage de crête trouvé avec **Accepter décalage pic')** dans le fichier Lignes / Longueurs d'onde de l'appareil.
  - ✓ Les données sont maintenant disponibles pour toute autre exploitation de la ligne d'analyse.

#### Voir également

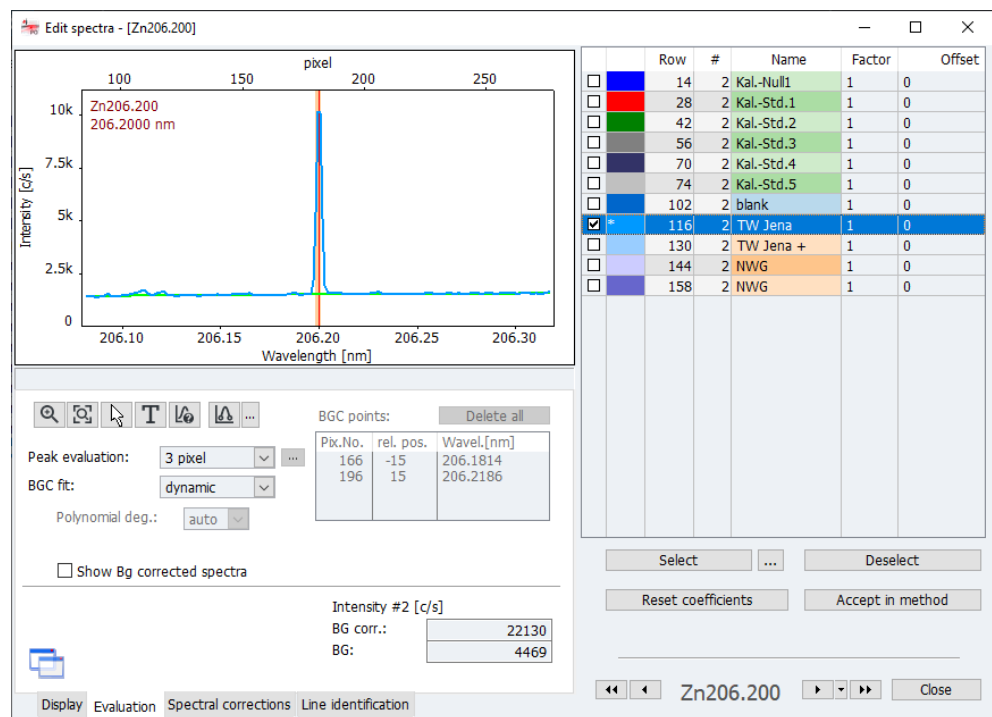
-  Spécifier des lignes d'analyse (fenêtre Méthode | Raies) [▶ 25]
-  Recalculer les résultats d'analyse [▶ 72]
-  Trouver des lignes - fenêtre Modifier les spectres | Identification des raies [▶ 90]

### 6.12.2 Évaluer la crête et déterminer la correction de fond - fenêtre Modifier les spectres | Evaluation

Les émissions continues de fond qui provoquent des variations d'intensité sur une grande plage de spectre autour d'une ligne d'analyse peuvent être compensées avec la correction de fond. Les pixels (points de correction d'arrière-plan) sont sélectionnés sur les deux côtés de la ligne d'analyse, une régression est calculée par les points et la courbe de régression est utilisée pour la correction de fond.

Dans le procédé statique de sélection des points de correction de fond, les points sont fixés manuellement et le degré de polynôme de la courbe de régression lui-même est déterminé. Dans le procédé dynamique, la courbe de régression est calculée automatiquement avec l'algorithme ABC (ABC = automatic baseline correction).




Il est possible de minimiser une perturbation discontinue du fond, par exemple par la superposition de lignes avec un élément de matrice à l'aide de spectres de correction.



Aperçu des éléments pour l'exploitation de crête et la correction de fond

Les boutons pour la vue de spectre, certaines sorties de données ainsi que la sélection des valeurs individuelles d'échantillon sont décrits au paragraphe via la fenêtre **Modifier les spectres | Afficher**).



Option/bouton	Description
Evaluation Pic	Régler le nombre de pixels pour l'exploitation de crête. <b>1</b> Le signal de mesure est déterminé seulement sur le pixel sur lequel se trouve le centre de crête. Valeur > 1 Nombre de pixels sur lesquels le signal de mesure est déterminé Les signaux individuels des pixels sont additionnés. C'est pourquoi le résultat est supérieur au maximum de crête. Le pixel avec le centre de crête se trouve au milieu de la plage. <b>Hauteur</b> La hauteur de crête est prise en compte pour l'exploitation.

Option/ bouton	Description
	<p><b>Personnalisé</b> La plage d'exploitation est définie par l'utilisateur. Cette option est privilégiée pour l'exploitation des doublets.</p> <p>Après un clic sur , activez dans la liste tous les pixels pris en compte pour l'exploitation.</p>
<b>Correction fond</b>	<p>Sélectionner le type de correction de fond :</p> <p><b>dynamique</b> La correction de fond est automatiquement calculée avec un algorithme mathématique. Aucun autre réglage n'est nécessaire avec cette option.</p> <p><b>statique</b> Les points de correction de fond sont définis dans le spectre manuellement, par un clic. Pour la correction de fond, sélectionner en outre le degré de polynôme.</p>
	<p>Lors d'une adaptation statique, définir ou supprimer les points de correction de fond</p> <p>Lorsque l'on passe la souris sur le graphique de spectre, elle affiche une croix. Un clic sur  permet d'ouvrir la liste de fonctions :</p> <p><b>Déterminer des points de correction du fond</b> Définir les points de correction sur la longueur d'onde souhaitée sur le spectre via un clic de la souris. Si vous passer sur une section en maintenant le bouton de la souris enfoncé, l'ensemble de la section est sélectionné.</p> <p><b>Supprimer des points de correction du fond</b> Un clic sur un point déjà sélectionné supprime le point de correction d'arrière-plan concerné. En tirant avec la souris, on peut supprimer des plages.</p> <p><b>Supprimer tous les points de correction du fond</b> Supprimer tous les points de correction du fond</p>
<b>Pts de corr. fond Tout supprimer')</b>	Supprimer tous les points de correction de fond définis manuellement
<b>Tableau</b>	Affichage des points de correction de fond définis manuellement
<b>Degré de polynôme</b>	<p>Sélectionner le degré de polynôme pour la régression de la courbe de correction de fond</p> <p>L'option <b>auto</b> permet de sélectionner automatiquement la régression.</p>
<b>Afficher les spectres fond corr.</b>	<p>Représenter les spectres avec correction de fond</p> <p>Le fond adapté (ligne verte) est soustrait du spectre de l'échantillon. Le fond correspond ainsi à la ligne zéro.</p>

Reprendre les données dans la méthode

Reprendre les réglages pour l'exploitation de crête et la correction de fond de la ligne sélectionnée dans la méthode de mesure actuelle en cliquant sur **Accepter dans la méthode**. Les données sont également modifiées dans la fenêtre de méthode dans l'onglet **Evaluation**.

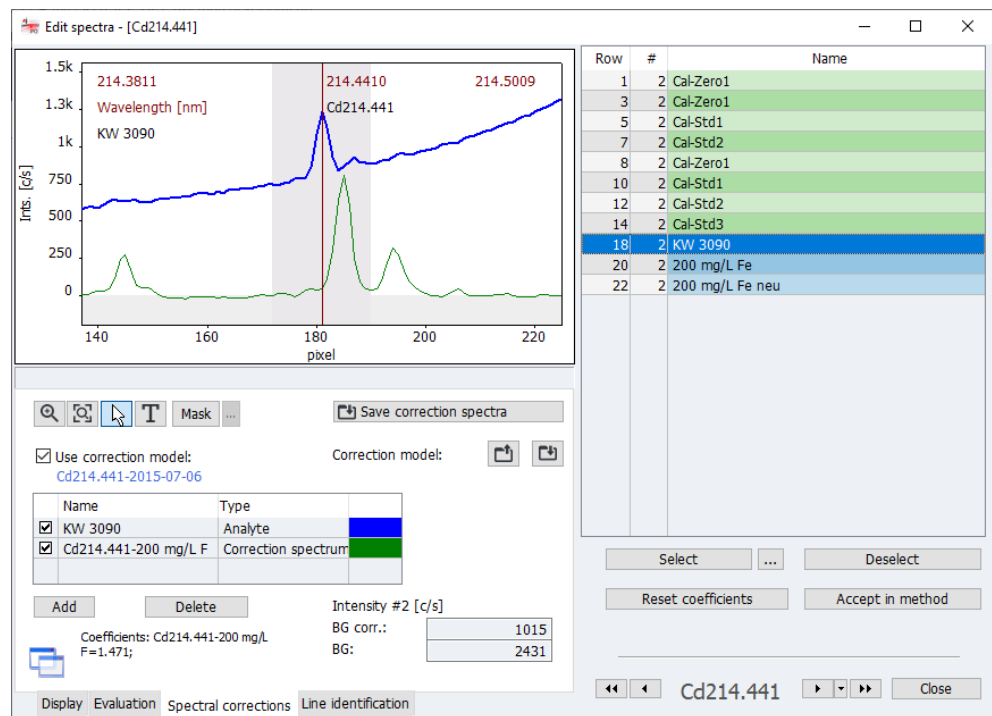
#### Voir également



-  Supprimer les perturbations de spectre - fenêtre Modifier les spectres | Corrections spectrales) [▶ 88]
-  Afficher les spectres - fenêtre Modifier les spectres / Afficher') [▶ 82]

### 6.12.3 Supprimer les perturbations de spectre - fenêtre Modifier les spectres | Corrections spectrales')

Dans la routine, on essaye de sélectionner pour l'analyse autant de lignes que possible qui ne soient pas perturbées et / ou possèdent un fond facile à corriger. Si cela n'est pas possible, vous pouvez supprimer à l'aide de spectres de correction les perturbations discontinues provoquées par exemple par des superpositions de lignes avec un ou plusieurs élément(s) de matrice. Les spectres de correction d'une matrice sont résumés dans un modèle et ils peuvent être reliés à la ligne dans la méthode.

Les fonctions pour enregistrer les différents spectres de correction et pour résumer le modèle de correction se trouvent dans la fenêtre **Modifier les spectres | Corrections spectrales'** .



Option / bouton	Description
<b>Enreg. spectre correction</b>	Enregistrer les spectres des composants purs d'une matrice comme spectres de correction
<b>Appliquer le modèle de correction</b>	Quand cela est activé, le modèle de correction est appliqué aux analytes
<b>Modèle de correction</b>	 Enregistrer le modèle de correction actuel  charger un modèle de correction existant

L'analyte et les spectres de correction utilisés dans le modèle sont listés dans le tableau de lignes. quand on active la case de contrôle, les différents spectres sont affichés sur le graphique. **Ajouter** permet d'ajouter des spectres au modèle de correction. **Effacer** permet de supprimer le spectre marqué avec la souris du modèle.

**i** REMARQUE ! Tous les spectres dans le tableau de spectres sont pris en compte dans le modèle pour le calcul, que la case de contrôle de l'affichage soit cochée ou non. Si un spectre de correction n'est pas pris en compte, il doit être supprimé.

### 6.12.3.1 Créer un modèle pour les corrections de spectre

Exécuter les étapes suivantes pour créer et utiliser un modèle de correction pour une ligne d'analyse :

1. Identifier les interférences possibles.
2. Créer et enregistrer les spectres de correction.
3. Créer un modèle de correction.
4. Accepter dans la méthode les paramètres de la ligne d'analyse avec le modèle de correction.

Étape 1 : Identifier les interférences

- ▶ Créer une méthode avec la ligne d'analyse.
- ▶ Mesurer l'analyte dans la matrice et charger le spectre dans la fenêtre **Modifier les spectres** (double-clic sur la ligne d'échantillon dans la fenêtre principale).
- ▶ Dans la fenêtre **Modifier les spectres | Identification des raies**, identifier les lignes de perturbation possibles.

Étape 2 : Mesurer et enregistrer les spectres de correction

- ▶ Ajouter à la séquence la mesure des composants perturbateurs de la matrice qui provoquent une superposition spectrale. et mesurer ces composants dans des solutions d'éléments individuels.


**Remarque :**

Les concentrations des composants de la matrice ne doivent pas coïncider avec celles des échantillons, mais doivent seulement être suffisantes pour que les spectres présentent des valeurs d'intensité nettes. Pour une correction de spectre exacte, ne mesurer dans chaque cas qu'un composant comme substance pure.

- ▶ Charger le spectre d'un composant de la matrice dans la fenêtre **Modifier les spectres | Corrections spectrales'** .
- ▶ Cliquer sur **Enreg. spectre correction**.
  - ✓ La fenêtre de la base de données pour l'enregistrement des spectres de correction s'affiche.
- ▶ Lui attribuer un nom et terminer la procédure en cliquant sur **Enregistrer**.
- ▶ Enregistrer de cette manière les spectres des autres composants de la matrice.

Étape 3 : Créer un modèle de correction

- ▶ Charger de nouveau le spectre de l'analyte dans la matrice.
- ▶ Cocher la case **Appliquer le modèle de correction**.
- ▶ Cliquer sur **Ajouter** pour ouvrir la sélection des spectres de correction déjà enregistrés.
- ▶ Sélectionner un spectre de correction dans la liste et cliquer sur **Charger**.
- ▶ Ajouter de cette manière tous les spectres de correction.
- ▶ Vérifier dans la vue de spectre que le spectre d'échantillon résultant ne comporte pas de superpositions.
- ▶ Un clic sur le bouton **Masq.** permet, en maintenant pressé le bouton de la souris, de masquer les zones qui ne doivent pas être prises en compte dans le calcul du modèle de correction.
 

La plage de la ligne d'analyse ( $\pm 9$  pixels) est déjà masquée par défaut. Il peut être nécessaire de masquer d'autres plages si aucune substance pure n'était disponible pour enregistrement et si ces impuretés risquent de se rencontrer en quantités changeantes.
- ▶ Pour enregistrer le modèle de correction, cliquer sur  et donner un nom au modèle. Terminer la procédure avec **Enregistrer**.

Étape 4 : Intégrer la ligne d'analyse avec le modèle de correction dans la méthode

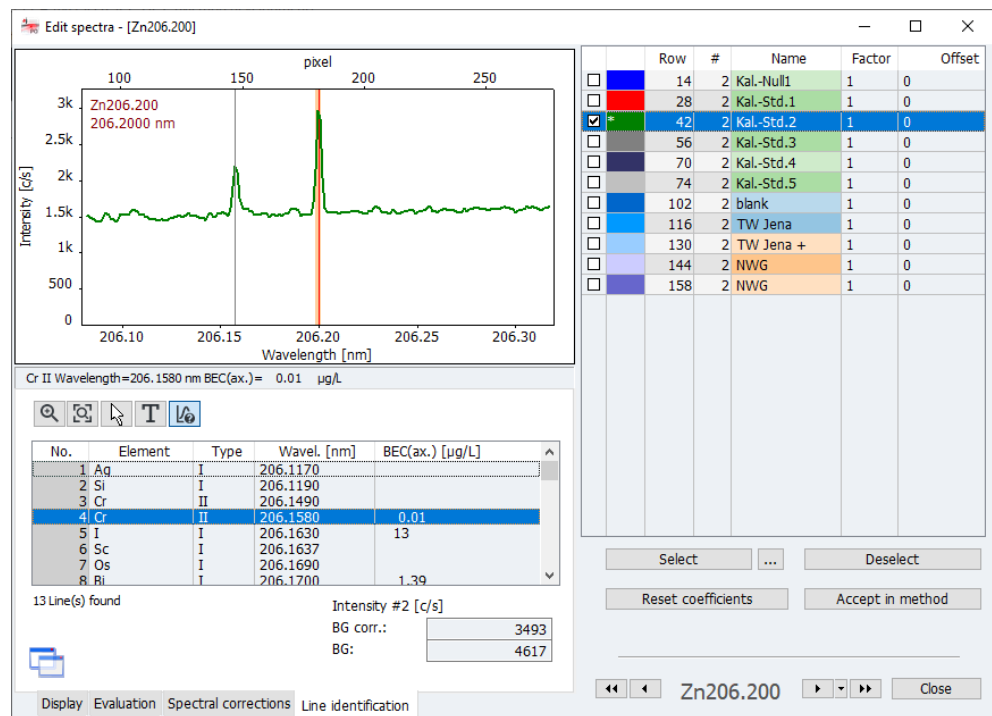
- ▶ Transférer les paramètres de la ligne d'analyse avec le modèle de correction dans la méthode actuelle avec **Accepter dans la méthode**.
  - ✓ Dans la fenêtre **Méthode | Evaluation**, la ligne d'analyse est caractérisée dans la colonne **Correction** par **LSM** (Least Square Model).

Une fois cette méthode enregistrée, les mesures futures effectuées avec cette méthode utiliseront automatiquement le modèle de correction créé. Les mesures déjà effectuées peuvent être recalculées avec la nouvelle version de méthode, de telle sorte qu'une nouvelle mesure n'est pas nécessaire.

Les modèles de correction spectrale et les spectres de correction sont enregistrés avec les résultats. Si les résultats sont transférés sur un autre ordinateur, sur lequel les modèles de correction ne sont pas enregistrés, les modèles sont importés après une demande.

### 6.12.3.2 Trouver des lignes - fenêtre Modifier les spectres | Identification des raies

Dans la fenêtre **Modifier les spectres | Identification des raies**, il est possible d'identifier des lignes dans les spectres mesurés en se basant sur la base de données de lignes.

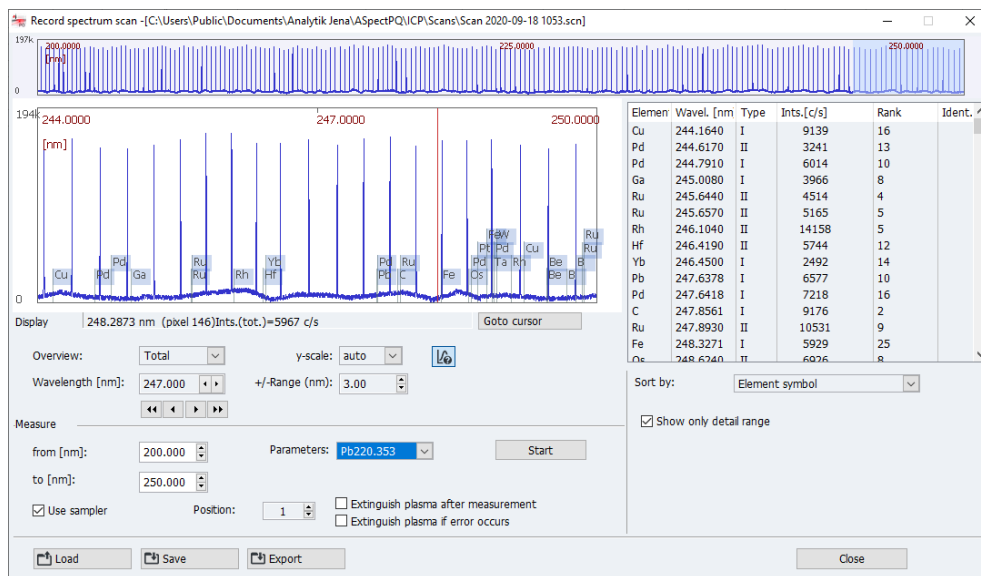


Dans le tableau sous les spectre sont affichés toutes les lignes identifiées dans le secteur de spectre.

- ▶ Activer le bouton
- ▶ Cliquer sur les crêtes intéressantes dans le spectre. La ligne suivante est affichée dans le spectre et marquée dans le tableau.
- ▶ Inversement, vous pouvez sélectionner une ligne dans le tableau qui sera ensuite affichée dans le spectre.

## 6.13 Enregistrer le spectre d'ensemble


Le point de menu **Outils | Spectre d'ensemble** permet d'enregistrer un spectre d'ensemble dans une plage de longueur d'onde prédéfinie.



- ▶ Sélectionner le point de menu **Outils | Spectre d'ensemble**.
- ▶ Dans le champ **Mesurer**, entrer la plage de longueur d'onde souhaitée (**de/à**).
- ▶ Si une méthode a été activée, il est possible de sélectionner les paramètres d'une ligne de la méthode pour le scan de spectre. Si aucune méthode n'est chargée, des paramètres pré-réglés sont utilisés.
- ▶ Préparer l'échantillon. Si l'utilisation d'un distributeur d'échantillons est souhaitée, cocher l'option **Utiliser le passeur** et sélectionner la position de l'échantillon sur le distributeur d'échantillons.
- ▶ Démarrer le scan en cliquant sur **Démarrer**.  
Une fois le scan terminé, le spectre d'ensemble s'affiche dans la zone supérieure de la fenêtre.
- ▶ Un clic sur une section du spectre d'ensemble permet d'afficher sur le graphique la zone de détails avec la ligne sélectionnée. La largeur de la zone de détails peut être réglée dans la liste **+/-Plage**.
- ▶ Les lignes trouvées sont rassemblées dans le tableau à droite. L'affichage peut être limité à la plage de spectre affichées avec l'option **Afficher les détails**.

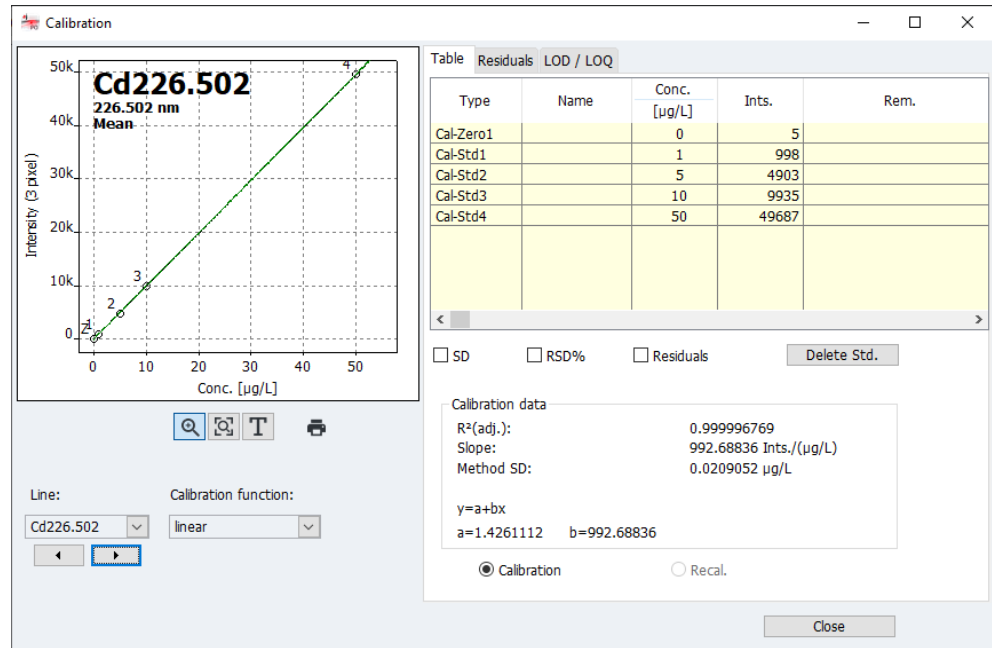
# 7 Étalonnage

L'étalonnage a lieu pendant la mesure conformément à ce qui a été décidé dans la séquence. Les courbes et les fonctions d'étalonnage peuvent être affichées et traitées après la mesure.

- ▶ Ouvrir la fenêtre **Étalonnage** en cliquant sur  dans la barre de symboles. Il est également possible de faire un double-clic sur une des lignes de la séquence **Calculer étal.** ou de sélectionner le point de menu **Outils | Étalonnage**.

Fenêtre Étalonnage

La fenêtre **Étalonnage** représente la courbe d'étalonnage calculée en prenant en compte le paramètre de courbe.



Cette fenêtre comprend pour chaque ligne d'analyse définie dans la séquence :

- la représentation graphique de la courbe d'étalonnage
- Tableau d'étalonnage
- Paramètres
- Résidus
- Limite de détection et de quantification

Sélectionner une ligne

Dans le champ de liste **Raie**, sélectionner la ligne d'analyse pour l'affichage de l'étalonnage. Les touches fléchées situées sous la liste vous permettent de permuter entre les affichages des différentes lignes.

Sélectionner la fonction Étalonnage

Dans la liste **Fonction étalonnage**, il est possible de choisir entre les calculs de régression possibles de la courbe d'étalonnage :

Option étalonnage	Description
linéaire	Déroulement linéaire de la fonction Étalonnage $y = a + bx$
non lin. ratio.	Déroulement non-linéaire de la fonction d'étalonnage décrit par une fonction rationnelle fractionnelle $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$

Option étalonnage	Description
<b>non lin. quadr.</b>	Déroulement non-linéaire de la fonction d'étalonnage décrit par une fonction quadratique $y = a + bx + cx^2$
<b>automatique</b>	Pour l'étalonnage, une fonction linéaire et une fonction non-linéaire sont calculées. Ensuite a lieu un test de Mandel au cours duquel les sommes des résidus quadratiques sont comparés. Si la somme pour la fonction non linéaire est significativement inférieure à celle pour la fonction linéaire, le déroulement non linéaire de la courbe d'étalonnage est sélectionné ; sinon, le déroulement linéaire de la courbe d'étalonnage est utilisé. La fonction non linéaire est sélectionnée dans la fenêtre <b>Options   Étalonnage</b> . La fonction rationnelle fractionnelle est prévue ici comme paramètre par défaut.

### Voir également

📖 Réglages généraux pour l'étalonnage et la correction de valeur à blanc [► 141]

## 7.1 Représentation de la courbe d'étalonnage

Sans la représentation graphique, les points de mesure, la courbe d'étalonnage calculée ainsi que les résidus sont affichés. Les numéros des points de mesure correspondent à ceux de l'onglet **Tableau**. Le point zéro d'étalonnage est marqué d'un Z (zéro).

Marquage en couleurs

Les points de mesure sont marqués comme suit :

Couleur	Signification
<b>Noir</b>	Point de mesure normal
<b>Gris clair</b>	Supprimé / valeur extrême (non pris en compte dans le calcul)
<b>Bleu</b>	Valeur extrême suspectée (pris en compte dans le calcul)



Les courbes ont également un marquage de couleur :

Couleur de courbe	Signification
<b>Noir</b>	Courbe d'étalonnage dans la plage d'étalonnage
<b>Bleu</b>	Courbe d'étalonnage en dehors de la courbe d'étalonnage valide
<b>Vert</b>	Limite inférieure et supérieure de la plage de pronostic dans la plage d'étalonnage valide
<b>Gris clair</b>	Limite inférieure et supérieure de la plage de pronostic en dehors de la plage d'étalonnage valide

Remarque relative à la plage de pronostic ou de confiance

La bande de pronostic dépend de la sécurité statistique sélectionnée et constitue un indice de la valeur de l'étalonnage, dont dépend finalement aussi la sécurité statistique des mesures des échantillons d'analyse. En outre, la bande de pronostic sert à mettre en évidence les points d'étalonnage suspects de valeurs extrêmes. Sélectionner la sécurité statistique dans la fenêtre **Méthode | Statistiques**. Dans la fenêtre **Options | Étalonnage**, il est possible de choisir entre l'affichage de la bande de pronostic ou de la bande de confiance.

Agrandir la courbe d'étalonnage

Après un clic sur , il est possible d'agrandir une zone du graphique en maintenant appuyé le bouton gauche de la souris.  permet d'annuler l'agrandissement.

## Ajouter une note




Il est possible d'ajouter dans le graphique un champ de texte pour une note.

- ▶ Cliquer sur **T**.
- ▶ Avec le bouton gauche de la souris maintenu appuyé, tracer le contour du champ de texte.
- ▶ Sélectionner la police dans la fenêtre d'entrée ou verte en cliquant sur **Police**.
- ▶ Entrer le texte et cliquer sur **OK**.
  - ✓ Le texte est affiché sur le graphique.

## Imprimer la courbe d'étalonnage

La courbe d'étalonnage et les fichiers d'échantillon sont imprimés en cliquant sur .

**Voir également**

-  Réglages généraux pour l'étalonnage et la correction de valeur à blanc [▶ 141]
-  Spécifier les évaluations statistiques (fenêtre Méthode | Statistiques) [▶ 45]
-  Imprimer des résultats d'analyse [▶ 119]

## 7.2 Afficher les résultats d'étalonnage

Les résultats d'étalonnage sont affichés à droite de la fenêtre **Étalonnage** dans 3 onglets.

**Voir également**

-  Réglages généraux pour l'étalonnage et la correction de valeur à blanc [▶ 141]

### 7.2.1 Étalonnage - onglet Tableau

Dans la fenêtre **Étalonnage**, les paires de valeurs des étalons (concentration / valeur mesurée donnée) sont indiquées dans l'onglet **Tableau**.

Si les étalons ont été mesurés plusieurs fois et qu'une exploitation statistique a été décidée dans la méthode, il est possible en activant les champs de contrôle standard de publier l'écart-type (SD) et l'écart-type relatif (RSD%) ou l'étendue (R) et l'étendue relative (R%).

Pour exclure des standards d'étalonnage du calcul, les marquer en cliquant dans le tableau, puis cliquer sur **Supprimer étal..**

La valeur mesurée n'est pas supprimée définitivement et peut être réétalonnée à tout moment.

Les données d'étalonnage sont affichées sous le tableau de mesure si elles sont calculables :

Paramètres	Signification
<b>R<sup>2</sup>(aj.)</b>	Coefficient de détermination
<b>Pente</b>	Augmentation de la fonction d'étalonnage
<b>SD méthode.</b>	Écart par défaut du procédé
<b>BEC</b>	La valeur BEC (concentration équivalente de fond) est la concentration de l'analyte qui génère une intensité équivalente au fond. Une valeur plus faible correspond ainsi à une sensibilité plus élevée.

## 7.2.2 Étalonnage - onglet Résidus

Dans la fenêtre **Étalonnage**, les écarts des points d'étalonnage de la courbe d'étalonnage calculée ainsi que les limites de la bande de pronostic sont affichés sur le graphique dans l'onglet **Résidus**.

## 7.2.3 Étalonnage - onglet LD/ LQ

Dans la fenêtre **Étalonnage**, les limites de détection et de quantification de l'appareil ICP-OES sont indiquées dans l'onglet **LD/ LQ**. Celles-ci sont calculées en se basant sur les résultats actuels de l'étalonnage. Les valeurs pour le procédé par valeur à blanc et la procédure de courbe d'étalonnage ne sont affichées dans cette zone que si l'appareil a déjà été étalonné.

Paramètres	Signification
<b>Limite de détection</b>	La masse (concentration) de l'élément à analyser, pouvant être encore déterminée avec un niveau de sécurité statique prescrite.
<b>Limite de quantification</b>	La plus petite masse (concentration) de l'élément à analyser, pouvant être déterminée avec la sécurité statistique prédéfinie.
<b>SD blanc (LD)</b>	Seulement avec le procédé par valeur à blanc Écart-type mesuré de la valeur à blanc (échantillon IDL)

Débuter le calcul des limites de détection et de quantification avec **Calculer**.

Procédé de courbes d'étal.

Pour le calcul de la limite de détection et de quantification selon la procédure de courbe d'étalonnage, une courbe d'étalonnage linéaire est nécessaire. L'étalonnage doit avoir lieu dans la plage de concentration inférieure. Pour le résultat du calcul, les paramètres essentiels de l'étalonnage sont :

- le nombre et la position des points d'étalonnage
- le nombre de mesures répétées par standard
- la qualité de l'égalisation
- la montée de la courbe d'étalonnage
- la sécurité statistique relative (niveau de vraisemblance)

Les valeurs de la procédure de courbe d'étalonnage ne peuvent être considérées comme fiables que si l'étalonnage a eu lieu dans la plage de concentration inférieure.

Procédé à blanc

L'écart-type de la valeur à blanc est déterminé à l'intérieur de la mesure. Pour cela, la mesure de la valeur à blanc (**Blanc QC LD**) est classée dans la séquence.

Pour la valeur à blanc, on utilise la consigne de calcul suivante :

- La valeur à blanc est mesurée 11 fois.
- L'écart-type absolu **SD** de la valeur à blanc est déterminé à partir de ces valeurs.
- Les formules suivantes s'appliquent à la limite de détection et de quantification :

Limite de détection (**LD**)

$LD = 3 * SD /$  (augmentation de la courbe d'étalonnage)

Limite de quantification (**LQ**)

$LQ = 9 * SD /$  (augmentation de la courbe d'étalonnage)

**Voir également**

- 📄 Spécifier des mesures et actions dans une séquence [► 57]

## 7.2.4 Étalonnage - onglet LD/ LQ

Dans la fenêtre **Étalonnage**, les limites de détection et de quantification de l'appareil ICP-OES sont indiquées dans l'onglet **LD/ LQ**. Celles-ci sont calculées en se basant sur les résultats actuels de l'étalonnage. Les valeurs pour le procédé par valeur à blanc et la procédure de courbe d'étalonnage ne sont affichées dans cette zone que si l'appareil a déjà été étalonné.

Paramètres	Signification
<b>Limite de détection</b>	La masse (concentration) de l'élément à analyser, pouvant être encore déterminée avec un niveau de sécurité statique prescrite.
<b>Limite de quantification</b>	La plus petite masse (concentration) de l'élément à analyser, pouvant être déterminée avec la sécurité statistique prédéfinie.
<b>SD blanc (LD)</b>	Seulement avec le procédé par valeur à blanc Écart-type mesuré de la valeur à blanc (échantillon IDL)

Débuter le calcul des limites de détection et de quantification avec **Calculer**.

Procédé de courbes d'étal.

Pour le calcul de la limite de détection et de quantification selon la procédure de courbe d'étalonnage, une courbe d'étalonnage linéaire est nécessaire. L'étalonnage doit avoir lieu dans la plage de concentration inférieure. Pour le résultat du calcul, les paramètres essentiels de l'étalonnage sont :

- le nombre et la position des points d'étalonnage
- le nombre de mesures répétées par standard
- la qualité de l'égalisation
- la montée de la courbe d'étalonnage
- la sécurité statistique relative (niveau de vraisemblance)

Les valeurs de la procédure de courbe d'étalonnage ne peuvent être considérées comme fiables que si l'étalonnage a eu lieu dans la plage de concentration inférieure.

Procédé à blanc

L'écart-type de la valeur à blanc est déterminé à l'intérieur de la mesure. Pour cela, la mesure de la valeur à blanc (**Blanc QC LD**) est classée dans la séquence.

Pour la valeur à blanc, on utilise la consigne de calcul suivante :

- La valeur à blanc est mesurée 11 fois.
- L'écart-type absolu **SD** de la valeur à blanc est déterminé à partir de ces valeurs.
- Les formules suivantes s'appliquent à la limite de détection et de quantification :

Limite de détection (**LD**)

$$LD = 3 * SD / (\text{augmentation de la courbe d'étalonnage})$$

Limite de quantification (**LQ**)

$$LQ = 9 * SD / (\text{augmentation de la courbe d'étalonnage})$$

**Voir également**

- 📄 Spécifier des mesures et actions dans une séquence [► 57]

## 7.3 Traiter la courbe d'étalonnage

Une courbe d'étalonnage existante peut être modifiée dans la fenêtre **Étalonnage** comme suit :

- Changer la fonction d'étalonnage utilisée
- Activer/désactiver des étalons
- Remplacer un étalon mesuré


Vous pouvez modifier la fonction Étalonnage en sélectionnant un nouveau modèle dans le champ de liste **Fonction étalonnage**.

Il est possible d'exclure un étalon du calcul en marquant l'étalon sur l'onglet **Tableau** et en cliquant ensuite sur **Supprimer étal.**. La valeur mesurée n'est pas supprimée définitivement et peut être réétalonnée à tout moment.

Les paramètres d'étalonnage modifiés sont utilisés pour les résultats si ceux-ci sont recalculés. Pour ce faire, sélectionner le point de menu **Routine | Retraiter les résultats** ou cliquer sur  dans la barre d'outils.

Il est également possible de mesurer de nouveau un étalon et de recalculer les résultats.

### Voir également

-  Recalculer les résultats d'analyse [▶ 72]

## 8 Contrôle qualité

Le contrôle qualité sert à surveiller les résultats de mesure d'une méthode sur une période prolongée. Pour cela, définir dans une méthode des échantillons QC spéciaux de plusieurs types qui sont amenés dans une méthode.

L'exploitation est publiée sur les onglets de contrôle qualité (onglets QC) et enregistrée avec la méthode. Avec chaque appel de la méthode, les onglets QC sont disponibles et sont actualisés au prochain démarrage de la méthode.

Le type des échantillons QC et leurs paramètres sont définis dans la fenêtre **Méthode | QCS** ainsi que, dans la séquence, l'introduction de l'échantillon QC.

Les onglets QC de la méthode chargée (active) peuvent être visualisés dans la fenêtre **QC**. Les paramètres de contenu et d'apparence des onglets QC y sont également déterminés.

- ▶ Ouvrir la fenêtre **QC** en cliquant sur  dans la barre de symboles ou sélectionner le point de menu **Outils | QC**.

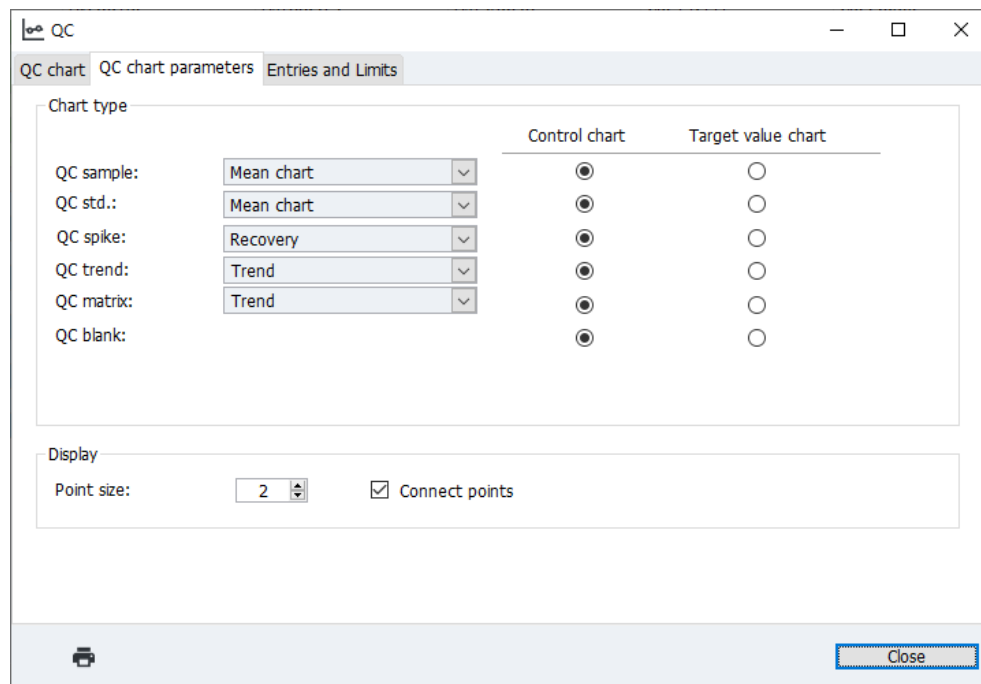
### Voir également

- 📖 Spécifier le contrôle qualité (fenêtre Méthode | QCS) [▶ 47]
- 📖 Spécifier des mesures et actions dans une séquence [▶ 57]

### 8.1 Paramètres des onglets QC

Le type et la représentation des onglets QC sont définis dans la fenêtre **QC | Paramètres de cartes de contrôle QC**.

Fenêtre QC | Paramètres de cartes de contrôle QC



Types d'échantillon QC et exploitations

Les exploitations suivantes peuvent être sélectionnées pour les différents types d'échantillons QC :

Type d'échantillon QC	Type d'exploitation QC
Échantillon QC	Carte des moyennes
Étal. QC	Carte moyenne (norm.) – pas pour l'onglet Valeur cible Recouvrement
Ajout QC	Recouvrement
Tendance QC	Tendance
Matrice QC	Gammes – pas pour l'onglet Valeur cible Précisions – pas pour l'onglet Valeur cible
Blanc QC	Aucune sélection prévue. L'intensité des valeurs à blanc est affichée.

Pour le type d'onglet **Carte contrôle** (onglet de régulation de processus), les paramètres-cibles et les limites de contrôle (C) et d'avertissement (A) sont déterminés à partir de la moyenne et de la dispersion des valeurs de la période précédente. Pour le type **Valeur cible de la carte**, les cibles et les limites d'exclusion sont déterminées à partir des valeurs attendues spécifiques et des limites des échantillons de contrôle Qualité.

Représentation

Pour la représentation graphique, la taille des points ainsi qu'une liaison des points au moyen d'un tracé polygonal peuvent être définies.

Option	Description
Dimension des points	Les différents points sont représentés sous forme de cercles. Le cercle s'agrandit quand la valeur augmente.
Relier les points	Relier les points du graphique avec un tracé polygonal.

## 8.2 Entrées et limites des onglets QC

Le contenu des onglets QC est défini dans la fenêtre **QC | Entrées et Limites** peut être adapté aux besoins de chaque laboratoire en termes de fréquence des entrées.

The screenshot shows the 'QC | Entrées et Limites' window with the following settings:

- Entry scheme:** all values
- Control and warning limits for process control charts:**
  - Number prep. period: 30
- Exclusion limits for target value charts:**
  - Factor: 1.00
  - Exclusion limits are calculated from QC limits entered under Method/QCS and the factor.
- Update chart display:**
  - Accept prep. period, delete remain
  - Process

Buttons: Close

Option	Description
Schéma d'entrée	<p><b>Toutes les valeurs</b> Entrer chaque contrôle QC effectué.</p> <p><b>1 valeur par jour</b> Entrer seulement le dernier contrôle QC de la journée.</p> <p><b>2 valeurs par jour</b> Entrer seulement le premier et le dernier contrôle QC de la journée.</p> <p><b>Remarque</b> Un « jour » correspond à un jour selon l'horloge du PC, c'est à dire que pendant une journée, une entrée précédente est écrasée dans l'onglet QC par une nouvelle valeur QC, tandis qu'au début d'une nouvelle journée, une nouvelle entrée est générée.</p>
Nbre éch. calcul limites	<p>Pour <b>Carte contrôle</b> :</p> <p>La période précédente est un nombre d'entrées dans l'onglet QC qui peut être pris en compte pour le calcul des limites de contrôle (C) et d'avertissement (A). La période précédente comprend toujours les anciennes entrées dans l'onglet. À la valeur 0 (pas de période précédente), toutes les données QC entrées sont prises en compte pour le calcul des limites de contrôle et d'erreur.</p>
Limites des cartes de contrôle	<p>Uniquement <b>Valeur cible de la carte</b> :</p> <p>Les limites d'exclusion sont calculées à partir des limites spécifiées pour les échantillons de contrôle de la qualité multipliées par le <b>Facteur</b> (le pré réglage est 1).</p>

Remplacer les onglets

Vous devez décider comment procéder avec les onglets (presque) pleins. Pour cela, choisir une option dans la liste ci-dessous :

Option	Description
Accepter période prép., supp. le reste	<p>Pour <b>Carte contrôle</b> :</p> <p>La période précédente est reprise et constitue la période précédente du nouvel onglet.</p>
Dernières valeurs -> Nouvelle période prép.	<p>Pour <b>Carte contrôle</b> :</p> <p>Les dernières valeurs mesurées de l'ancien onglet constituent la période précédente du nouvel onglet et toutes les autres valeurs sont effacées de l'onglet. Les nouvelles valeurs mesurées sont exploitées avec la nouvelle période précédente.</p>
Tout supprimer, nouvelle période prép.	<p>Les valeurs anciennes sont supprimées.</p> <p>Pour <b>Carte contrôle</b> : Les nouvelles valeurs mesurées remplissent d'abord la période préalable.</p>


Un clic sur **Exécuter** permet de remplacer les onglets QC selon l'option sélectionnée plus haut.

### 8.3 Afficher les onglets QC

Les onglets QC sont affichés dans la fenêtre **QC | Carte de contrôle**. Pour chaque type d'échantillon QC défini dans la méthode et chaque ligne d'éléments pris en compte, il existe un onglet distinct.

Options / afficher

Options / afficher	Description
Echantillon contrôle	Sélectionner le type d'échantillon QC pour l'affichage.
Raie	Sélectionner la ligne d'éléments pour l'affichage.

Options / afficher	Description
Valeurs affichées	Nombre de valeurs affichées et date de la première et de la dernière valeur affichée
Valeurs enregistrées	Nombre total d'entrées sur l'onglet QC actuel et date de la première et de la dernière valeur
x(min) / x(max)	Régler l'entrée de début et le nombre d'entrées à afficher dans le graphique.
Echelle y	<p><b>Entrées</b> Le maximum de l'axe y est mis à l'échelle selon l'entrée la plus élevée.</p> <p><b>Limites de contrôle</b> Le maximum de l'axe y est mis à l'échelle selon la limite de contrôle ou la limite de détection.</p>
	Imprimer le graphique QC, y compris les données alphanumériques et les valeurs mesurées.

## Zone de graphique

Couleur / marquage	Signification
Zone jaune	Seulement l'onglet de contrôle : Période précéd.
Ligne horizontale gris clair	Seulement l'onglet de contrôle : Moyenne calculée à partir de la période précédente Seulement onglet Valeur cible : Valeur cible
Lignes horizontales rouges	Seulement l'onglet de contrôle : Limite de contrôle (C) supérieure et inférieure calculée à partir de la période précédente (3 Sigma) Seulement l'onglet Valeur Cible : Limite supérieure et inférieure (AO, AU) selon les limites de l'échantillon de contrôle de qualité
Lignes horizontales vertes	Seulement l'onglet de contrôle : Limites d'avertissement calculées (A ; 2 Sigma)
petits cercles	Points de mesure (noir : point de mesure actif ; gris : point de mesure inactif)

Si vous cliquez sur une valeur mesurée une fenêtre s'ouvre avec les indications suivantes sur cette valeur mesurée.

Option	Description
Numéro	Numéro de la valeur mesurée dans la série QC
Valeur	Valeur mesurée (convertie selon le type de représentation de l'onglet QC)
Date / Temps	Date de la mesure
Utilisateur	utilisateur connecté au moment de la mesure
Version	Version de la méthode utilisée
Supprimer entrée / Activer entrée	Marquer la valeur mesurée comme supprimée ou la réactiver
Entrer commentaire	Entrer une remarque, p. ex. la raison de la suppression


# 9 Commander et contrôler l'appareil et les accessoires

## 9.1 Spectromètre

La fenêtre **Spectromètre** sert à contrôler les fonctions du spectromètre et à régler les paramètres du spectromètre.

Il est possible de régler ou de consulter les données suivantes :

- Données d'appareil
- Affichage des paramètres d'exploitation du détecteur
- Démarrer les mesures pour l'optimisation de l'appareil

Ouvrir la fenêtre **Spectromètre** en cliquant sur  ou via le point de menu **Outils | Spectromètre**.

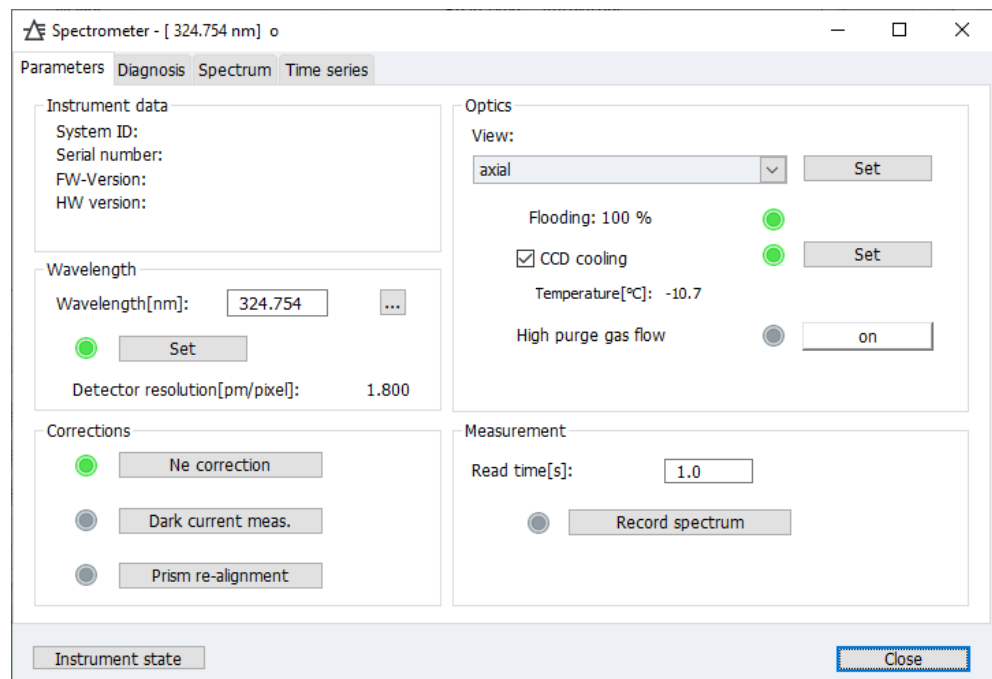
Un clic sur **Statut de l'appareil** permet d'afficher un graphique de l'appareil présentant les messages des capteurs de sécurité. Si des problèmes se posent avec le plasma, vous pouvez voir ici les messages d'erreur des capteurs.

### 9.1.1 Régler les paramètres du spectromètre et tester les fonctions

La fenêtre **Spectromètre | Paramètres** comprend les fonctions suivantes :

- Contrôler les fonctions de base de l'appareil
- Démarrer les corrections automatiques sur le système optique
- Démarrer une mesure de test sur une longueur d'onde sélectionnée

Éléments dans la fenêtre Spectromètre | Paramètres




Paramètres	Description
<b>Données d'appareil</b>	Dans le groupe <b>Données d'appareil</b> , différents numéros de service et de version nécessaires pour l'entretien de l'appareil sont affichés.
<b>Raie</b>	Dans le champ <b>Raie</b> , la longueur d'onde sélectionnée est affichée. Une longueur d'onde peut être réglée en cliquant sur <b>...</b> dans la fenêtre <b>Sélectionner élément/raie</b> .



Paramètres	Description
	Un clic sur <b>Régler</b> permet d'amener le spectromètre sur la longueur d'onde choisie.
<b>Correction Ne</b>	Effectuer l'étalonnage de longueur d'onde du détecteur
<b>Mesure du courant noir</b>	Corriger le signal sombre
<b>Alignement prisme</b>	Optimiser la représentation de l'ordre de dispersion au détecteur par l'ajustage du prisme (ajustage au maximum énergétique).
<b>Visée</b>	Sélectionner le sens d'orientation du plasma dans le champ de la liste ( <b>axial</b> - du haut, <b>radial</b> - du côté)
<b>Refroidissement CCD</b>	Si la case est cochée, <b>Régler</b> permet de démarrer le refroidissement du détecteur CCD. Le refroidissement s'arrête quand la case de contrôle est désactivée.  Le refroidissement CCD démarre automatiquement avec l'allumage du plasma. La commande manuelle n'est nécessaire que dans des cas exceptionnels, par exemple après un message d'erreur lors du démarrage automatique.  Dans le champ <b>Température de fonctionnement</b> , la température actuelle du détecteur CCD est affichée.
<b>Purge rapide</b>	Rincer le spectromètre avec un débit d'argon élevé
<b>Mesure</b>	Pour le démarrage d'une mesure sur la longueur d'onde sélectionnée, entrer la durée de mesure totale sous <b>Mesure</b> .  Un clic sur <b>Mesurer spectre</b> permet de démarrer la mesure. Les pré-réglages pour le plasma sont appliqués pour la mesure.  L'échantillon doit être ajouté manuellement. Le distributeur d'échantillons n'est pas utilisé.

Mesurer la crête d'échantillon sur une ligne d'analyse sélectionnée

Une mesure de test sur une ligne d'analyse sélectionnée peut être démarrée dans la fenêtre **Spectromètre | Paramètres**.

- ▶ Allumer le plasma.
- ▶ Dans la section **Raie**, ouvrir la fenêtre **Sélectionner élément/raie** avec  et régler la ligne souhaitée.  
Il est également possible d'entrer directement la valeur dans le champ d'entrée **Raie**.
- ▶ Avec **Régler**, mettre le spectromètre sur la longueur d'onde voulue.  
Quand le réglage est terminé avec succès, la marque à côté du réglage apparaît en vert.
- ▶ Lancer la mesure du courant d'obscurité avec **Mesure du courant noir**.
- ▶ Sélectionner le sens d'orientation **axial** ou **radial** pour la mesure suivante.
- ▶ Régler le **Temps inté..**
- ▶ Préparer l'échantillon et plonger le tuyau d'aspiration dans l'échantillon.
- ▶ Attendre le temps que l'échantillon soit nébulisé de manière stable. Lancer la mesure avec **Mesurer spectre**.
  - ✓ La mesure est effectuée et les résultats de mesure sont affichés dans la fenêtre **Modifier les spectres**.

#### Voir également

-  Insérer des lignes d'analyse dans le tableau de lignes [▶ 28]
-  Afficher et traiter des spectres d'intensité [▶ 82]

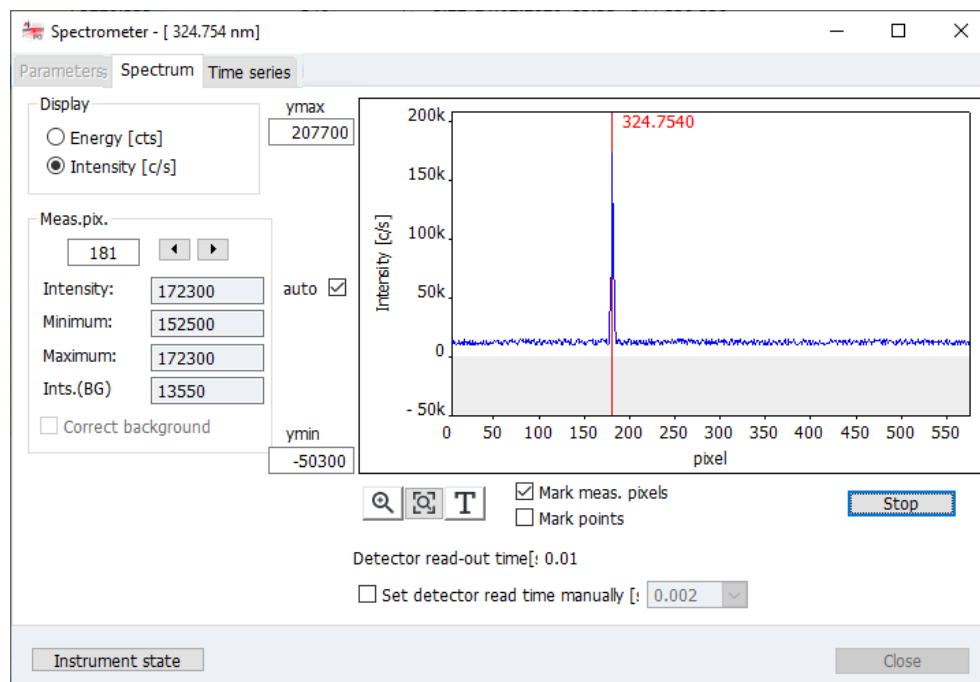
### 9.1.2 Diagnostic des paramètres de l'appareil

Les paramètres pertinents pour le service sont affichés dans la fenêtre **Spectromètre | Diagnostic**.



### 9.1.3 Procéder à une mesure continue de crête

Dans la fenêtre **Spectromètre | Spectre**, démarrer une mesure continue sur une longueur d'onde prédéfinie. Les mesures continues sont utilisées en cas de maintenance pour l'optimisation de l'appareil.

Représentation graphique et exploitation numérique



Option	Description
<b>Affichage</b>	Options pour la représentation du spectre : <b>Énergie</b> Affichage du spectre d'énergie, unité de mesure : cts (Counts) Pour obtenir des résultats de mesure aussi silencieux que possible, les durées d'intégration pour le détecteur sont sélectionnés de telle sorte que le maximum énergétique soit d'environ 30 000 cts. <b>Intensité</b> Représentation de l'énergie par unité de temps, unité de mesure : cts/s (Counts par seconde) L'intensité permet de comparer différentes crêtes indépendamment du temps d'intégration.
<b>Pix. de mes.')</b>	Sélection du pixel dont les valeurs sont affichées en continu dans le champ <b>Énergie</b> ou <b>Intensité</b> Les résultats correspondants de la mesure en continu sont affichés dans les champs <b>Maximum</b> et <b>Minimum</b> .
<b>Marquer pixels de mes.</b>	Marquer le pixel de mesure sur le graphique avec une ligne rouge verticale
<b>Marquer points</b>	Marquer les valeurs mesurées pour chaque pixel dans le graphique avec un point

Option	Description
Définir manuellement le temps de lecture	Sélectionner le temps de mesure pour le détecteur CCD dans le champ de liste Un temps de mesure plus long entraîne des valeurs énergétiques plus élevées. Le préréglage pour le temps de lecture du détecteur CCD est de 0,01 s.
Mettre le graphique à l'échelle	Entrer directement les valeurs pour le point de début et de fin des ordonnées dans les champs d'entrée sur les axes. Vous pouvez également après l'activation du mode Zoom  sélectionner la zone à afficher en maintenant pressé le bouton gauche de la souris. Annuler la mise à l'échelle en cochant l'option <b>auto</b> ou en cliquant sur  .

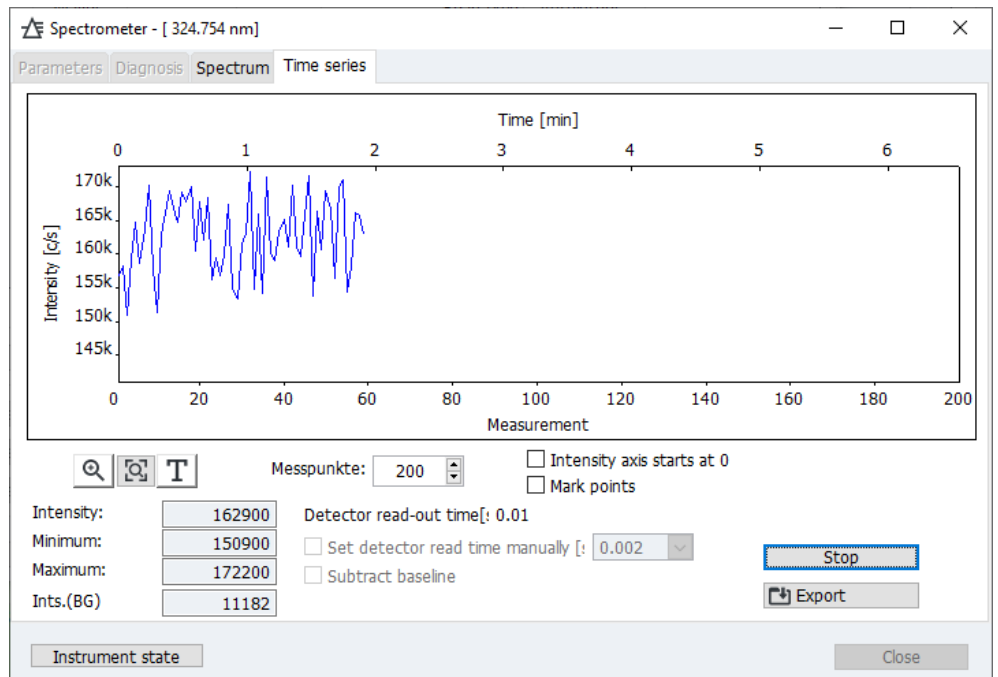
Démarrer une mesure de crête

- ▶ Dans la fenêtre **Spectromètre | Paramètres**, régler la longueur d'onde et le sens d'orientation.
- ▶ Passer à l'onglet **Spectre**.
- ▶ Démarrer la mesure en continu en cliquant sur **Démarrer**.

Les valeurs mesurées sont enregistrées avec les paramètres réglés et répétées en continu jusqu'à l'actionnement de **Arrêter**.



### 9.1.4 Enregistrer la courbe du signal

Dans la fenêtre **Spectromètre | Scan continu**, la courbe du signal d'intensité pour la longueur d'onde actuellement définie dans le spectromètre à travers un certain nombre de points de mesure sélectionnés peut être tracée.




À côté de la représentation graphique, les valeurs numériques de l'intensité actuelle, le maximum et le minimum d'intensité ainsi que l'intensité du fond sont affichées.

Vous pouvez régler les paramètres suivants pour l'enregistrement de la courbe du signal :

Option	Description
<b>Changement d'échelle</b>	Après l'activation du mode Zoom  , il est également possible de sélectionner la zone à afficher en maintenant pressé le bouton gauche de la souris  Annuler la mise à l'échelle en cliquant sur 
<b>Commencer l'axe d'intensité à zéro</b>	Ne pas régler automatiquement la mise à l'échelle de l'axe y, mais faire commencer par « 0 »
<b>Points de mesure</b>	Sélectionner le nombre de points de mesure dans la liste
<b>Marquer points</b>	Les pixels sont marqués d'un cercle dans le graphique
<b>Définir manuellement le temps de lecture</b>	Sélectionner le temps de mesure pour le détecteur CCD dans le champ de liste
<b>Soustraire la ligne de base</b>	Afficher les valeurs d'intensité avec correction de fond

## 9.2 Plasma

La fenêtre **Plasma** comprend les fonctions suivantes :

- Allumer / éteindre le plasma
  - Contrôle du générateur HF
  - Réglages des débits de gaz
  - Contrôle de la pompe de l'analyseur
  - Ajustement de l'optique de transfert
  - Optimisation automatique du débit de gaz nébuliseur et de la puissance du plasma
- Ouvrir la fenêtre **Plasma** en cliquant sur  dans la barre de symboles ou sélectionner le point de menu **Outils | Plasma**.

Avec **Statut de l'appareil**, un graphique de l'appareil apparaît qui affiche les messages des capteurs de sécurité de l'appareil ICP-OES. Si des problèmes se posent avec le plasma, vous pouvez voir ici les messages d'erreur des capteurs.

### 9.2.1 Allumer le plasma et régler les conditions du plasma

Dans la fenêtre **Plasma | Contrôle**, il est possible d'allumer / d'éteindre le plasma et de régler les débits de gaz dans l'appareil.

Fonctions dans la fenêtre Plasma | Contrôle

Option	Description
<b>Conditions de plasma</b>	Sélectionner les conditions du plasma (puissance du plasma et débits de gaz).
<b>Allumer le plasma/ Éteindre le plasma</b>	Allumer et éteindre le plasma lorsque l'appareil ICP-OES est prêt.
<b>Générateur RF</b>	Régler le fonctionnement efficace du plasma.  La puissance du plasma définit sa température. Le micrologiciel de l'appareil régule l'intensité du générateur de manière à atteindre la puissance efficace du plasma.
<b>Débits de gaz</b>	Activer et régler les débits de gaz.  <b>Plasma</b> Le gaz plasma s'écoule le long du tuyau extérieur et sert à générer le plasma.  <b>Nébuliseur</b> Le gaz nébuliseur nébulise l'échantillon et transporte l'aérosol d'échantillon dans le plasma. Il est raccordé au nébuliseur. Le pourcentage sur la ligne du gaz nébuliseur indique le degré de perméabilité et de propreté du nébuliseur (voir ci-dessous)  <b>Auxiliaire</b> Le gaz auxiliaire compresse le plasma à distance de l'injecteur et s'écoule entre le tuyau intérieur et l'injecteur.  <b>Cône</b> Le gaz conique éloigne la queue de plasma « froide » afin d'éliminer les interférences provoquées par la recombinaison dans le plasma dans le sens d'observation axial. Le gaz conique permet simultanément le refroidissement du cône.  <b>Oxygène</b> L'oxygène peut être ajouté en tant que gaz complémentaire au gaz nébuliseur pour des applications sélectionnées. Le débit d'oxygène doit être activé via la case devant le réglage du gaz avant de pouvoir être modifié.
<b>Couper tous les gaz</b>	Fermer toutes les soupapes de gaz.

Option	Description
<b>Purger la chambre de nébulisation</b>	Le gaz nébuliseur est activé pendant 1 minute pour évacuer l'air de la chambre de pulvérisation. Cela facilite l'allumage du plasma après une interruption. Pendant ce temps, un compte à rebours est affiché.
<b>Puissance d'extraction</b>	Un relais de sécurité vérifie que la puissance de la hotte raccordée est suffisante pour le fonctionnement de l'appareil ICP-OES. Si c'est le cas, le voyant s'allume en vert.

Les boutons **Régler** permettent de régler les paramètres modifiés (puissance du plasma et débits de gaz) sur l'appareil ICP-OES.

Évaluer le fonctionnement du nébuliseur

Le nébuliseur doit être nettoyé s'il a été obstrué par des particules d'échantillon ou par une teneur élevée en sel dans l'échantillon. L'augmentation de la pression du gaz porteur est un indice d'obstruction du gaz nébuliseur.

Comparer le pourcentage actuel (pression) du paramètre **Nébuliseur** avec la valeur atteinte après l'installation du nébuliseur neuf ou nettoyé.

Nettoyer le nébuliseur comme décrit dans la notice d'utilisation de l'appareil ICP-OES si le pourcentage a fortement augmenté (de plus de la moitié de la valeur de départ), au plus tard à 75 %.

Sélectionner les conditions du plasma

La liste **Conditions de plasma** comprend les paramètres de plasma enregistrés pour différentes matrices d'échantillon et, si une méthode est chargée, les paramètres spécifiques à une ligne de la méthode.

En cliquant sur **...**, vous ouvrez un menu contextuel avec des fonctions de gestion des paramètres sélectionnés dans la liste :

Fonction	Description
<b>Enregistrer les paramètres du plasma actuels</b>	Enregistrer les conditions du plasma définies (puissance du plasma et débits de gaz)
<b>Supprimer entrée</b>	Supprimer l'entrée sélectionnée Les préréglages <b>Étalon</b> , <b>Organique</b> et <b>Hydrures</b> ne peuvent pas être supprimés.
<b>Appliquer les conditions plasma</b>	Régler les paramètres du plasma de l'entrée sélectionnée sur l'appareil ICP-OES
<b>Copier vers la raie de la méthode</b>	Disponible si une ligne de méthode est sélectionnée dans la liste Transfère les conditions du plasma dans les paramètres de la méthode de la ligne sélectionnée.
<b>Copier vers toutes les raies de la méthode</b>	Disponible si une ligne de méthode est sélectionnée dans la liste Transfère les conditions du plasma dans les paramètres de la méthode de toutes les lignes.
<b>Définir par défaut</b>	Enregistrer les conditions actuelles du plasma comme valeurs prescrites pour les lignes nouvellement ajoutées dans la méthode (ne vaut pas pour les favoris de ligne)

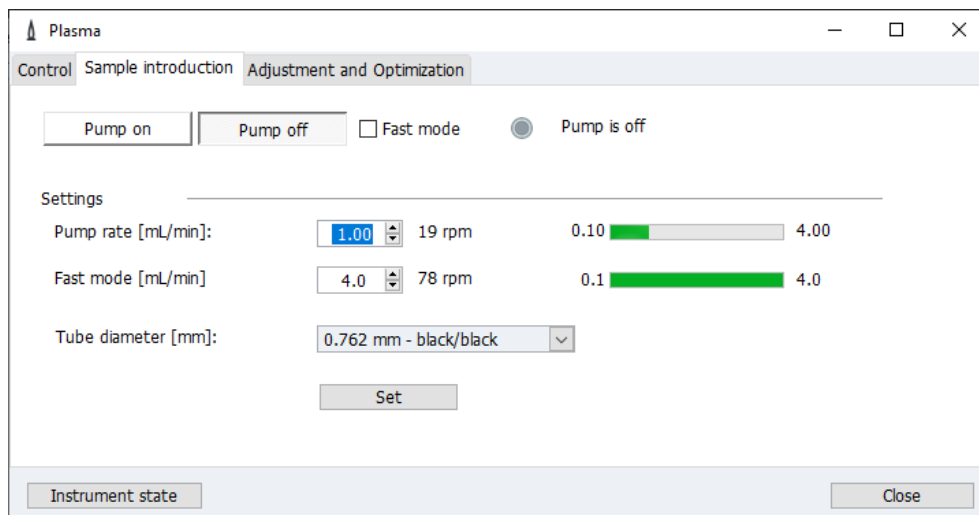
### Voir également

 Activer le spectromètre et allumer le plasma [▶ 65](#)

## 9.2.2 Contrôler l'alimentation d'échantillon de la pompe

Dans la fenêtre **Plasma | Introduction des échantillons**, contrôler le fonctionnement de la pompe tubulaire sur l'appareil ICP-OES.

Fonctions dans la fenêtre Plasma | Introduction des échantillons

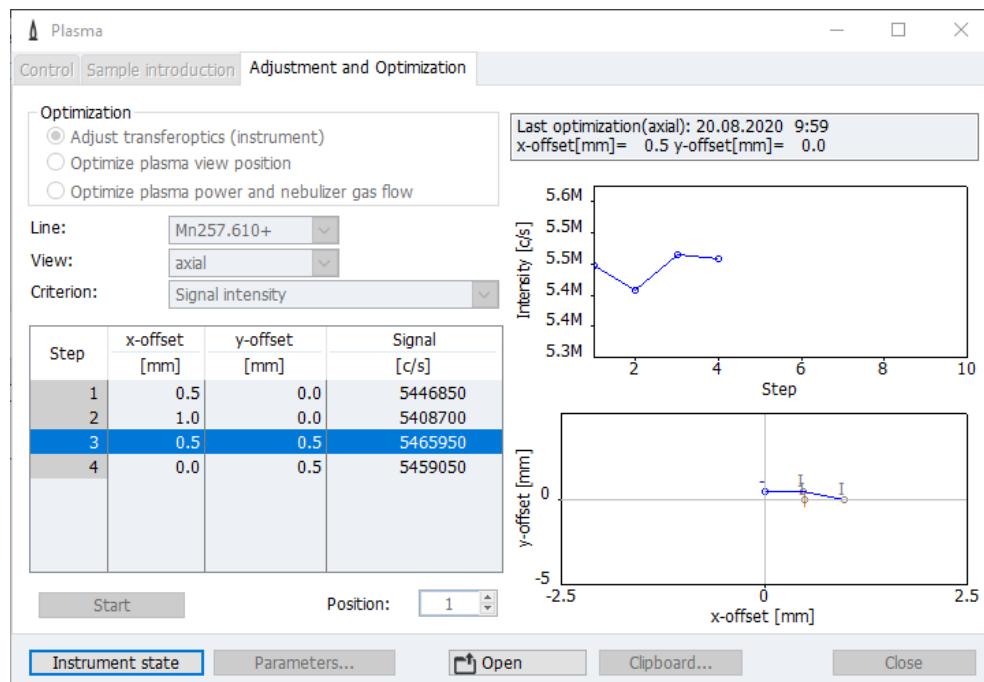


Fonction / paramètres	Description
<b>Pompe en marche/ Pompe arrêtée</b>	Mettre en marche et arrêter la pompe. À l'état initial, après la mise en marche de l'appareil ICP-OES., la pompe est activée.
<b>Mode rapide</b>	Mettre manuellement la pompe en marche rapide La fonction peut être utilisée pour rincer manuellement le système d'alimentation en échantillons. Une fois le rinçage terminé, la case doit être décochée afin de passer à nouveau la pompe sur le transport d'échantillon.
<b>Pompe en marche/ La pompe est arrêtée</b>	Statut de la pompe La vitesse actuelle de la pompe est affichée avec l'unité UPM (tours par minute).
<b>Débit pompe')</b>	Régler le débit de la pompe pour le transport d'échantillon pendant la mesure
<b>Mode rapide</b>	Régler le débit de la pompe pour la marche rapide Avec la marche rapide, le temps de transport lors du changement d'échantillon ou le temps de transport de la solution de rinçage au nébuliseur est optimisé.
<b>Diamètre de tuyau</b>	Sélectionner le type de tuyau utilisé La quantité d'échantillon transportée (débit de la pompe) est calculée à partir des informations de vitesse de la pompe et de diamètre du tuyau. Les tuyaux sont codés par les butées de couleur. Sélectionner dans la liste la combinaison de butées du tuyau utilisé.
<b>Régler</b>	Reprendre les réglages

## 9.2.3 Ajustement et optimisation du plasma

Dans la fenêtre **Plasma | Ajustement et optimisation**, effectuer les réglages suivants :

- Orientation de l'optique de transfert sur les axes optiques du spectromètre
- Détermination des valeurs de correction de l'optique de transfert pour une ligne d'analyse de la méthode
- Optimiser la puissance de plasma et le débit de gaz du nébuliseur



Deux procédés différents sont disponibles pour l'ajustement et l'optimisation. Ils peuvent être sélectionnés en cliquant sur **Paramètres** :

Procédé	Description
<b>Grille</b>	La plage est scannée suivant une grille. Parmi les points de mesure, celui ayant l'intensité la plus grande est déterminé. L'ajustement est exact, mais dure longtemps car un grand nombre de points de mesure doivent être déterminés.
<b>Optimisation simplexe</b>	<p>Le maximum énergétique est déterminé de manière itérative. Avant un point de mesure initial, le point de mesure est déterminé avec la plus haute valeur à proximité. À partir de ce point de mesure, le point de mesure avec l'énergie la plus haute est de nouveau déterminé. Ce procédé est poursuivi jusqu'à ce que le maximum énergétique soit trouvé.</p> <p>Ce procédé est plus rapide que la recherche par grille, mais un peu moins sûr. Dans les différentes zones chaudes du plasma, il peut y avoir plusieurs maximums énergétiques, et par conséquent si le point de départ est défavorable, on peut trouver un maximum énergétique incorrect.</p> <p>Pour le procédé simplexe, un <b>Critère d'annulation</b> doit être défini comme pourcentage. Si 3 valeurs de suite ne divergent pas de plus que ce pourcentage, l'ajustement est terminé.</p> <p>Si <b>Démarrer avec les paramètres optimisés</b> est cochée, les paramètres optimisés du dernier ajustement / de la dernière optimisation sont utilisés comme valeurs initiales pour l'optimisation actuelle.</p>

Pour l'ajustement de l'optique de transfert (appareil), le critère de l'intensité du signal est utilisé.

Le critère pour l'optimisation est défini automatiquement en fonction de la longueur d'onde de la ligne d'analyse, mais il peut être modifié manuellement :

Critère	Plage de longueur d'onde des lignes d'analyse
<b>Intensité du signal</b>	< 200 nm
<b>Signal/Fond</b>	200 à 350 nm

Critère	Plage de longueur d'onde des lignes d'analyse
Signal/Racine carré du fond	> 350 nm

Ajuster l'optique de transfert sur les axes optiques (points médians du plasma)

L'ajustement de l'optique de transfert sur l'axe optique se fait avec une solution Mn. Préparer pour l'ajustement les solutions Mn avec les concentrations suivantes :

Sens d'observation	Solution Mn
axial	1 mg/L
radial	10 mg/L

- ▶ Cocher l'option **Ajuster l'optique de transfert (appareil)**.
  - ✓ La ligne d'analyse Mn est automatiquement définie dans la liste **Raie**.
- ▶ Sélectionner le procédé d'ajustement sous **Paramètres** (voir plus haut).
- ▶ Sélectionner le sens d'observation :

Option	Description
axial	Observation d'en haut
radial	Observation depuis le côté
atténué axial	Observation de l'énergie affaiblie du haut
atténué radial	Observation de l'énergie affaiblie depuis le côté
fermé	Observation avec l'obturateur fermé (pour la maintenance)

- ▶ Veuillez plonger le tuyau d'aspiration dans l'échantillon. En cas d'utilisation d'un distributeur d'échantillons, définir la position sur le rack d'échantillons.
- ▶ Cliquer sur **Démarrer**.
  - ✓ L'ajustement de l'optique de transfert se fait automatiquement. À la fin de l'ajustement, les nouvelles données sont affichées.
- ▶ Reprendre les nouvelles valeurs d'ajustement en cliquant sur **OK**.

Optimiser les positions d'observation pour une ligne d'analyse de la méthode cochée

Le plasma a différentes zones chaudes. Cette optimisation permet de déterminer le point d'observation dans le plasma où l'analyte présente la plus haute intensité de signal. Les valeurs sont enregistrées comme **Décalage** dans la méthode.

- ▶ Dans la liste **Raie**, sélectionner la ligne d'analyse de la méthode.
- ▶ Cocher l'option **Optimiser la position d'observation**.  
Le sens d'observation est automatiquement repris de la méthode et le critère pour l'optimisation est automatiquement défini (voir plus haut).
- ▶ Sélectionner le procédé d'ajustement après avoir cliqué sur **Paramètres** (voir plus haut).
- ▶ Veuillez plonger le tuyau d'aspiration dans l'échantillon. En cas d'utilisation d'un distributeur d'échantillons, définir la position sur le rack d'échantillons.
- ▶ Cliquer sur **Démarrer**.
  - ✓ L'optimisation de la position d'observation se fait automatiquement. À la fin sont affichées les valeurs de correction optimisées.
- ▶ Reprendre les nouvelles valeurs de correction en cliquant sur **OK** dans la méthode.

Optimiser les conditions du plasma pour un échantillon

Une fois que vous avez déterminé la position d'observation des analytes dans un échantillon, vous pouvez optimiser les conditions du plasma (puissance du plasma et débit de gaz nébuliseur).

- ▶ Activer l'option **Optimiser la puissance de plasma et le débit nébulisation**.

- ▶ Dans la liste **Raie**, sélectionner la ligne d'analyse de la méthode.
  - ✓ Les conditions précédentes du plasma est automatiquement repris de la méthode et le critère pour l'optimisation est automatiquement défini (voir plus haut).
- ▶ Sélectionner le procédé d'ajustement sous **Régler** (voir plus haut).
- ▶ Veuillez plonger le tuyau d'aspiration dans l'échantillon. En cas d'utilisation d'un distributeur d'échantillons, définir la position sur le rack d'échantillons.
- ▶ Cliquer sur **Démarrer**.
  - ✓ L'optimisation de la puissance du plasma et du débit de gaz nébuliseur a lieu automatiquement. À la fin sont affichées les valeurs optimisées.
- ▶ Reprendre les nouvelles valeurs en cliquant sur **OK** dans la méthode.


### 9.3 Distributeur d'échantillons

Le distributeur d'échantillons est un accessoire en option. Le distributeur d'échantillons est détecté à l'initialisation dans la fenêtre **Démarrage rapide** après le démarrage du programme.

La fenêtre **Passeur** comprend les fonctions suivantes :

- Affichage du type de distributeur d'échantillons connecté
- Configuration du distributeur d'échantillons
- Ajustement du distributeur d'échantillons
- Rinçage supplémentaire des conduites d'échantillons
- Réinitialisation du distributeur d'échantillons
- Exécution d'un autotest

Spécifier les paramètres immédiats pour l'analyse (positions sur les racks d'échantillons et étapes de rinçage) dans la méthode, la séquence et les données d'identification d'échantillon (ID échantillon).

La fenêtre **Passeur** s'ouvre en cliquant sur  dans la barre de symboles ou via le point de menu **Outils | Passeur**.

Initialiser le distributeur d'échantillons

Le distributeur d'échantillons est fondamentalement initialiser lors de la mise sous tension. Une nouvelle initialisation peut être nécessaire si le distributeur d'échantillons a perdu son orientation, p. ex. suite à un choc mécanique. La liaison entre le distributeur d'échantillons, l'appareil ICP-OES et le PC est alors rétablie.

- ▶ Il est possible, si nécessaire, d'initialiser de nouveau l'ASpect PQ sans redémarrer le programme en cliquant sur **Initialisation**.

Détecter le distributeur d'échantillons

Si le distributeur d'échantillons est activé seulement après le démarrage d'ASpect PQ, l'utilisation du distributeur d'échantillons dans le programme doit être signalée.

- ▶ Pour ce faire, cliquer sur **Détecter** puis sur **Initialisation**.

**Remarque** : lorsque le Cetac ASX-560 est utilisé avec un système de dilution, le bouton **Détecter** est masqué.

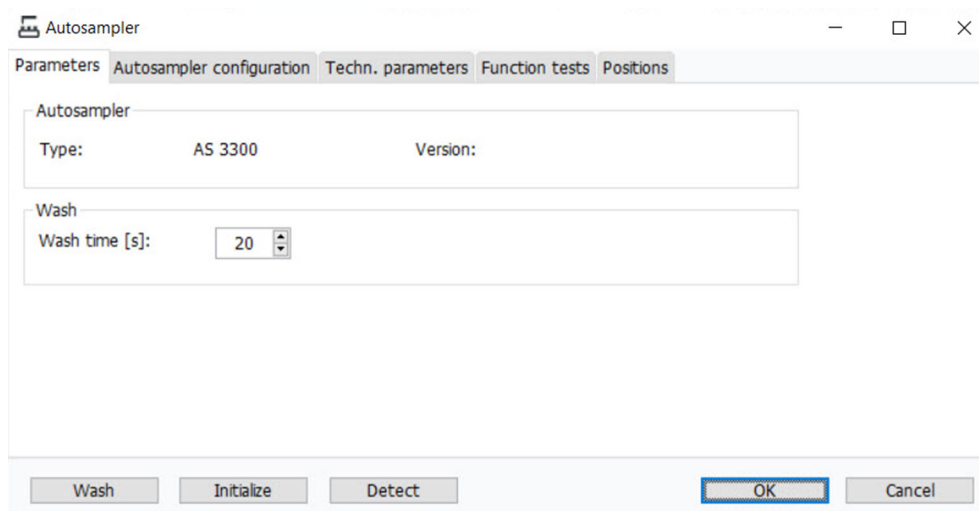
Rinçage des conduites d'échantillons

- ▶ Dans la fenêtre **Passeur | Paramètres**, régler le **Temps de rinçage**. Le pré-réglage pour le temps de rinçage est repris dans la méthode actuelle.
- ▶ Cliquer sur **Rinçage**. Il est également possible de sélectionner le point de menu **Routine | Rinçage**.
  - ✓ Les trajets d'échantillon (tuyaux - nébuliseur - chambre du pulvérisation) sont rincés pendant le temps de rinçage indiqué avec la pompe en marche rapide.

### 9.3.1 Afficher le distributeur d'échantillons connecté

Dans la fenêtre **Passeur | Paramètres**, les paramètres suivants sont affichés ou configurés :

- Type de distributeur d'échantillons
- Paramètres de rinçage



Type de distributeur d'échantillons

Le type d'échantillon détecté lors de l'initialisation et la version du micrologiciel du distributeur d'échantillons sont affichés dans la fenêtre **Passeur | Paramètres**.

Paramètres de rinçage

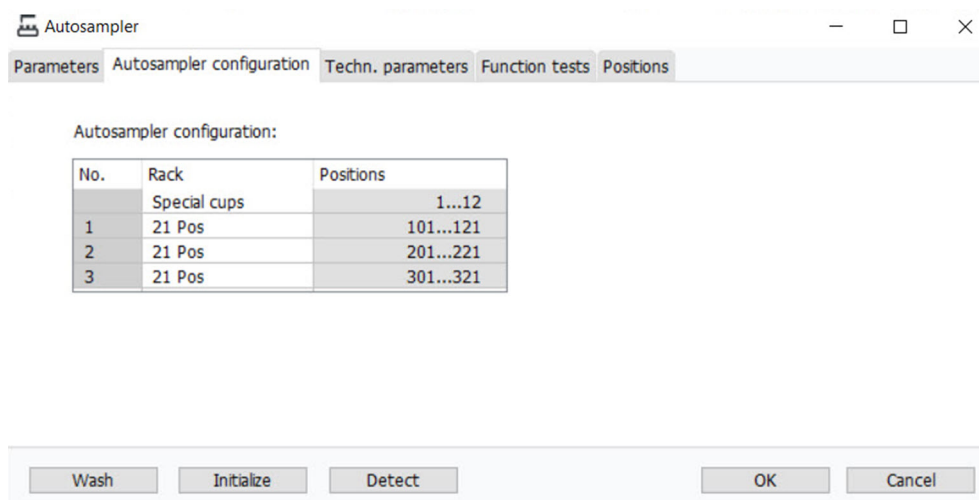
Le temps de rinçage du système du trajet d'échantillon allant du récipient d'échantillon à la torche est repris de la méthode actuelle. Les modifications dans la fenêtre **Passeur | Paramètres** n'ont pas d'incidence sur les entrées dans la méthode. Pendant le rinçage du système avec le distributeur d'échantillons, la solution de rinçage est prélevée dans la coupelle de rinçage du distributeur d'échantillons.

#### Voir également

- Spécifier l'alimentation des échantillons (fenêtre Méthode | Débit d'échantillon) [▶ 34]

### 9.3.2 Configurer le rack du distributeur d'échantillons

Dans la fenêtre **Passeur | Configuration passeur**, régler les plateaux d'échantillon utilisés sur le distributeur d'échantillon.

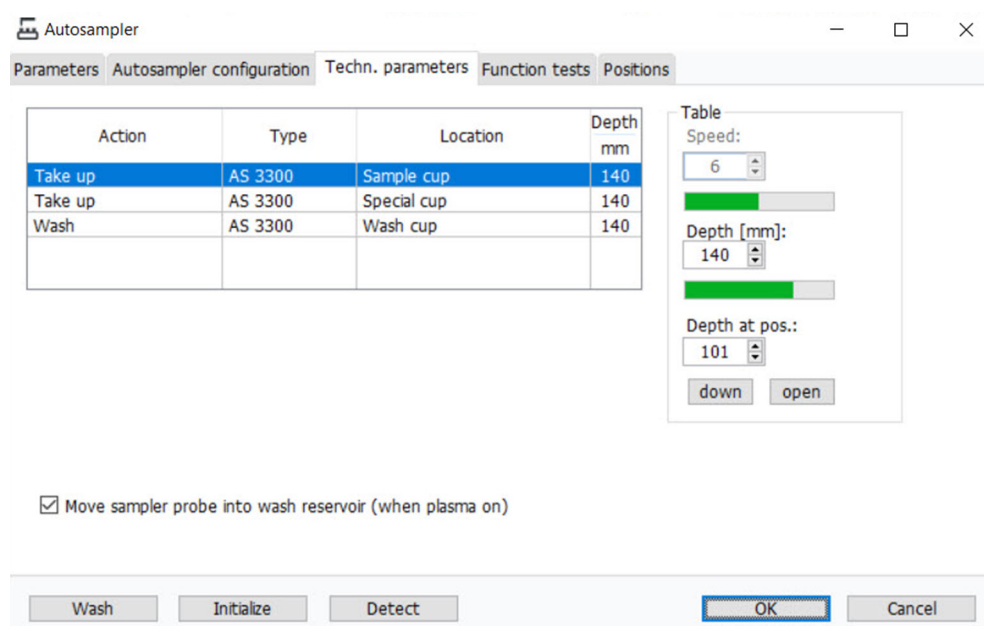


Différents plateaux d'échantillon et plateaux avec échantillons spéciaux peuvent être placés en fonction du distributeur d'échantillons utilisé.

Sélectionner les plateaux d'échantillons dans le tableau. Pour plateaux à nombre d'échantillons variable, des numéros à trois chiffres sont prévus comme numéros de position. Le premier chiffre désigne la position du plateau d'échantillons sur le distributeur d'échantillons et les deux autres la position sur le plateau d'échantillons. Ainsi, par exemple, le numéro 113 désigne la position 13 sur le plateau d'échantillon 1. Le plateau à nombre d'échantillons variable 1 se trouve sur le distributeur d'échantillons devant la coupelle de rinçage, puis viennent les plateaux 2 et 3.

### 9.3.3 Paramètres techniques du distributeur d'échantillons

Dans la fenêtre **Passeur | Paramètres tech.**, spécifier la profondeur d'immersion de la canule dans les différents flacons.



Les actions suivantes sont effectuées pour les différents types de coupelles :

Coupelle	Action
Tubes échant.	Aspires échantillons avec la pompe tubulaire.
Tubes spéc.	Aspires échantillons spéciaux avec la pompe tubulaire.
Station de rinçage	Rincer la canule et le trajet d'aspiration.

Éléments du tableau d'actions

Option	Description
Action	Actions possibles : <b>Prélever</b> Prélever de l'échantillon dans la coupelle pour l'amener à la torche. <b>Rinçage</b> Prélever de la solution de rinçage.
Type	Type de distributeur d'échantillons installé
Lieu	Coupelle à laquelle se réfère l'action
Prof.	Profondeur d'immersion de la canule en mm

## Zone Tableau

Les éléments de commande dans la zone **Tableau** permettent de modifier les paramètres de la ligne du tableau marquée.

Option	Description
<b>Prof.</b>	Régler la profondeur d'immersion du tube. La profondeur d'immersion est mesurée par la position la plus haute du bras du distributeur d'échantillons.
<b>Profondeur à pos.</b>	Position de la coupelle spéciale ou d'échantillon à laquelle la profondeur d'immersion est mesurée.
<b>Régler</b>	Si cela est activé, le bras du distributeur d'échantillons se déplace au-dessus de la coupelle sur laquelle le positionnement doit être modifié. Pour les coupelles d'échantillons et spéciales, il s'agit de la position d'échantillon réglée dans <b>Profondeur à pos.</b>  Si cela n'est pas activé, la profondeur d'immersion et la vitesse sont modifiées sans que le bras du distributeur d'échantillons ne déplace de coupelle.

## Autres options

Si l'option **Introduire la canule du passeur dans la station de rinçage (plasma allumé)** est cochée, la canule est plongée automatiquement dans la coupelle de rinçage après la fermeture de la fenêtre.

Seulement ASX-560 : Réglage de la vitesse de la pompe de rinçage (incrément : 0...99). Avec **Régler**, cette valeur est enregistrée de manière permanente dans le distributeur d'échantillons.

### 9.3.4 Tester les fonctions du distributeur d'échantillons

Dans la fenêtre **Passeur | Test fonctionnel**, il est possible de contrôler si le distributeur d'échantillons est opérationnel.

## Fenêtre Passeur | Test fonctionnel

The screenshot shows the 'Autosampler' software interface. At the top, there are tabs for 'Parameters', 'Autosampler configuration', 'Techn. parameters', 'Function tests', 'Positions', and 'Dilute'. The 'Function tests' tab is active. Below the tabs, there is a 'System status' section with a green indicator and the text 'Autosampler is ready', and a 'Refresh' button. The 'Positions' section has radio buttons for 'Cup no' (set to 1), 'Wash position' (selected), and 'Mix cup', with a 'Set' button. The 'Sampler arm' section has a 'Depth [mm]' input field set to 0, a progress bar, and 'Set' and 'open' buttons. At the bottom, there are checkboxes for 'Wash pump' (unchecked) and 'Move sampler probe into wash reservoir (when plasma on)' (checked). At the very bottom, there are buttons for 'Wash', 'Initialize', 'OK', and 'Cancel'.

Les fonctions suivantes du distributeur d'échantillons sont contrôlées :

Fonction	Description
État de fonctionnement')	Contrôler la disponibilité opérationnelle. Avec <b>Actualiser</b> , la disponibilité opérationnelle est de nouveau contrôlée.
Positions	Après un clic sur <b>Régler</b> , le distributeur d'échantillons se dirige vers une position sélectionnée. <b>Tube N°</b> Le distributeur d'échantillons se dirige vers les positions sélectionnées dans la liste. <b>Position de rinçage</b> Le distributeur d'échantillons se dirige vers la coupelle de rinçage.
Bras de prélèvement	Abaisser le bras du distributeur d'échantillons à la hauteur réglée dans le champ <b>Prof.</b> .
Pompe de rinçage	Mise en marche et arrêt de la fenêtre d'affichage.

Introduire la canule du passeur d'échantillons dans la coupelle de rinçage

Si la case **Introduire la canule du passeur dans la station de rinçage (plasma allumé)** est cochée, la canule plonge dans la coupelle de rinçage après la fermeture de la fenêtre **Passeur**.

### 9.3.5 Afficher les positions des échantillons sur le distributeur d'échantillons

Dans la fenêtre **Passeur | Positions**, les positions du plateau d'échantillons utilisées dans la séquence actuelle sont affichées.

Pour l'affichage, il est possible de choisir entre les options **Toutes les positions**, **Tubes d'échantillon uniquement** et **Tubes spéciaux uniquement**.

À côté du tableau se trouve une représentation schématique du plateau d'échantillons avec la position actuellement marquée. La position de l'échantillon peut aussi bien être marquée sur le schéma que dans le tableau.

Autosampler

Parameters Autosampler configuration Techn. parameters Function tests Positions

Rack: 1

Pos	Samples
101	Cal-Zero1; Sample
102	Cal-Std1; Sample
103	Cal-Std2; Sample
104	Sample
105	Sample
106	Sample
107	Sample
108	Sample
109	Sample
110	Sample
111	
112	
113	
114	
115	
116	

Display: all positions

Wash Initialize Detect OK Cancel

### 9.3.6 Fonction de dilution

Les paramètres pour la dilution d'échantillon en cas d'utilisation du distributeur d'échantillons Cetac ASX 560 avec le Cetac SDX<sub>HPLD</sub> sont affichés dans la fenêtre **Passeur / Diluer**.

Autosampler

Parameters Autosampler configuration Techn. parameters Function tests Positions Dilute

Dilution system: CETAC Technologies ASX-560 Standard V 1.11.0 16-Mar-2018, Cetac Thermo AA Compatible  
Cetac SDX Controller ver 1.0.0  
Cetac Technologies ASXpress+ V 2.71 ASX-5x0 Standard, 2-Feb-2019

Settings: ASX-560/SDX ASXpress+

Parameters	Range	Value
Max. dilution factor	2...5000	5000
Min. dilution factor	2...5000	2
Vessel wash cycles	1...4	2
Vortexing speed	500...3000 rpm	2500
Air gap volume	50...200 µL	50
Aspiration speed diluent	50...3500 µL/s	1800
Aspiration speed sample	50...3500 µL/s	170
Dispense speed	50...3500 µL/s	1800
Syringe delay	500...5000 ms	1000

Consider dilution when calculating the internal standard

Service: Prime syringe and vortexer Start

Wash Initialize OK Cancel

#### Paramètres

Les paramètres dans la section **Paramètres** comprennent des préréglages qui donnent de bons résultats pour la dilution d'échantillon. Il est possible de faire varier les paramètres dans les plages de réglage pendant l'optimisation de la méthode.

#### Tenir compte de la dilution lors du calcul de l'étalon interne

si la case est cochée, le logiciel prend en compte la dilution lors du calcul de l'étalon interne.

- Si l'étalon interne est ajouté à l'échantillon d'origine, l'étalon interne est également dilué dans l'échantillon. Cocher la case pour prendre en compte la dilution lors du calcul.
- Si l'étalon interne est également ajouté au diluant ou si la solution d'échantillon est alimentée via le kit pour étalon interne, l'étalon interne n'est pas dilué. Dans ce cas, ne pas cocher la case.
- Ne pas cocher la case, même si l'argon est utilisé en tant qu'étalon interne.

#### Service

Dans la liste **Service**, il est possible de sélectionner des fonctions de service sur SDX<sub>HPLD</sub> et les exécuter avec **Démarrer** :

Option	Fonction
<b>Amorçage seringue et vortex</b>	Le diluant est pompé via le système à l'aide de la pompe d'injection et envoyé dans le dispositif de vortex. Ainsi, les bulles d'air sont éliminées du système et le dispositif de vortex est conditionné.
<b>Déplacer seringue position retrait</b>	Si la pompe d'injection doit être démontée dans le cadre d'une maintenance, le piston doit être amené dans la bonne position au préalable avec cette fonction.

Option	Fonction
Position initiale de l'ASXpress+ après démontage pour le nettoyage	Seulement si l'ASXpress+ est installé : Une fois l'installation ou la maintenance terminée, initialiser l'ASXpress+.

## 9.4 Refroidisseur en circuit fermé

Le circuit de refroidissement de l'appareil ICP-OES comporte une valve qui ouvre et ferme le circuit. C'est pourquoi un assistant est nécessaire pour changer l'eau de refroidissement.



### REMARQUE

Observez les instructions pour la maintenance du refroidisseur en circuit fermé et pour la préparation de l'eau de refroidissement dans la notice d'utilisation de l'appareil ICP-OES.

- ▶ Sélectionner le point de menu **Extras | Maintenance**.
- ▶ Dans la fenêtre **Maintenance**, démarrer le changement de fluide de refroidissement en cliquant sur **Changer**.
- ▶ Suivez les instructions de l'assistant.

## 10 Gestion des données

Vous trouverez dans ce paragraphe des instructions sur

- Options d'impression
- Gestion des méthodes et des séquences
- Gestions des résultats
- Définition d'unités pour les concentrations et les taux
- Gestion des données sur les solutions de stock fréquemment utilisées et les échantillons QC

### 10.1 Fonctions d'impression dans ASpect PQ

ASpect PQ dispose d'un grand nombre de formats de génération. Outre la sortie sur l'imprimante, les données peuvent être exportées au format Excel, PDF, HTML, XML ou texte ou être enregistrées sous forme de Bitmap ou de graphiques à échelle modulable.

Pour la génération des résultats d'analyse et des contenus de la fenêtre (par exemple la fenêtre **Méthode** ou **Séquence**), des modèles de protocole sont utilisés. De manière standard, un jeu de modèles de protocole est installé. Si nécessaire, ces modèles peuvent être personnalisés avec le designer de rapports « Module de rapports et d'impression Liste et Étiquette ».


#### 10.1.1 Imprimer des résultats d'analyse

ASpect PQ propose différentes possibilités pour imprimer des données de résultats :

- Imprimer tout le protocole de mesure. Le protocole complet d'une analyse comprend les paramètres de la méthode, le calibrage et les résultats d'analyse avec les valeurs individuelles des échantillons (cycle statistique). Un protocole peut être imprimé à partir des résultats actuels de la fenêtre principale et des données enregistrées.
- Imprimer les résultats actuels. Avec cette impression, seules les données de la fenêtre principale sont imprimées. Il est possible ici de choisir entre une impression complète et une impression compacte.
- Imprimer les données sélectionnées de l'onglet **Aperçu**. Pour cette impression, vous pouvez sélectionner les lignes d'analyse et les résultats dans une fenêtre de dialogue.

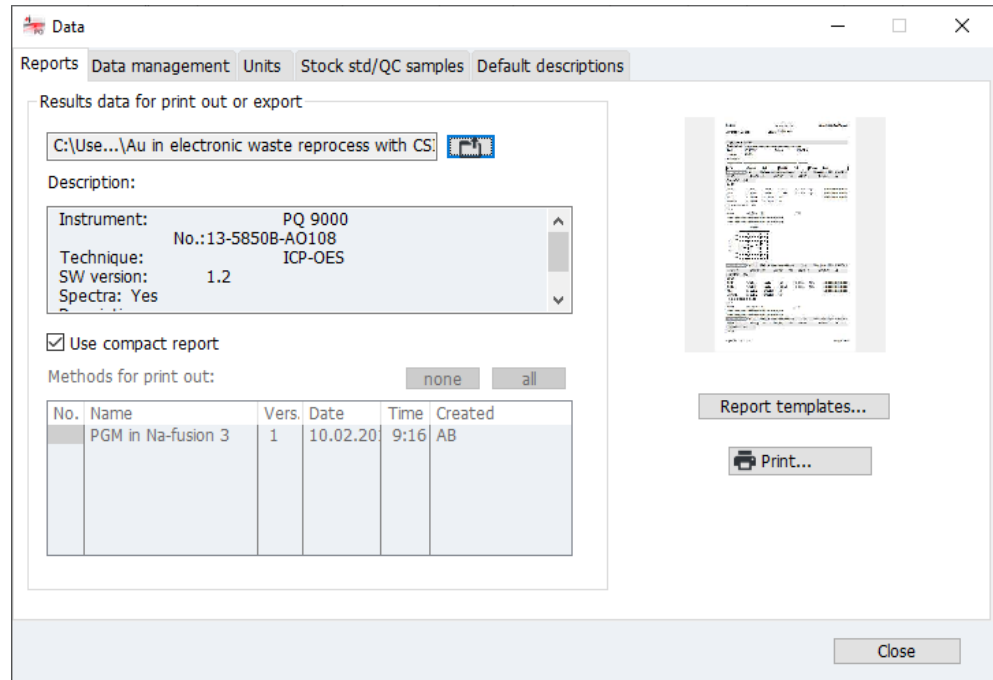
Imprimer le protocole complet


Le protocole complet d'une analyse comprend les paramètres de la méthode, le calibrage et les résultats d'analyse avec les valeurs individuelles des échantillons (cycle statistique). Le protocole complet peut être imprimé aussi bien à partir des résultats dans la fenêtre principale qu'à partir de fichiers enregistrés.

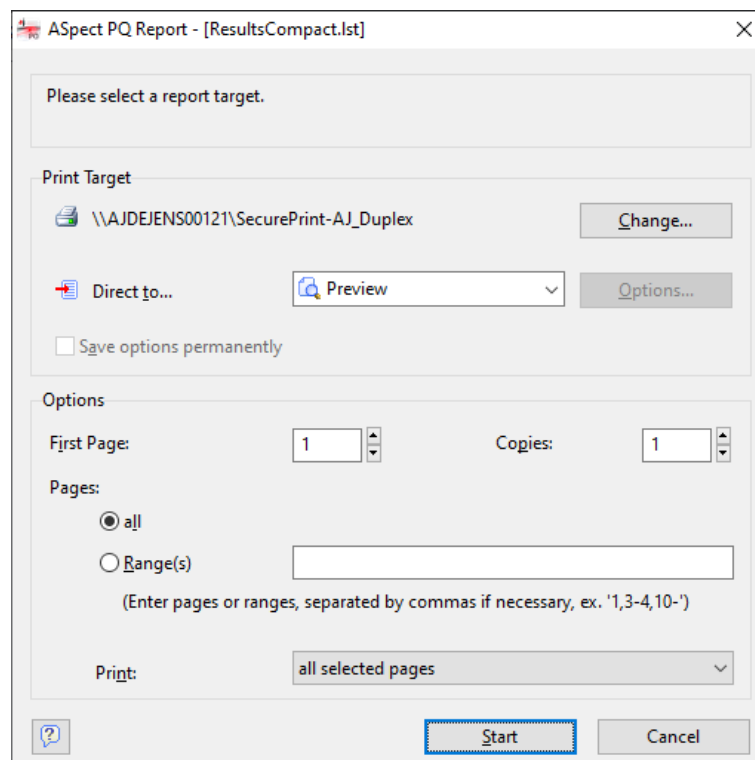
- ▶ Ouvrir la fenêtre **Données | Rapports** à l'aide du symbole .
- ▶ Sinon, ouvrir la fenêtre avec les points de menu **Extras | Données** ou **Fichier | Imprimer | Rapport**.

Le nom du fichier actuel, les informations sur les fichiers (liste **Description**), ainsi que toutes les versions de méthode utilisées pour générer le fichier de résultats actuel sont affichés.

Fenêtre Données | Rapports  
avec sélection des données de  
résultats pour l'impression



- ▶ Si vous voulez imprimer un fichier enregistré, appeler avec  la fenêtre standard **Ouvrir** et sélectionner le fichier voulu.
- ▶ Si le rapport compact succinct doit être imprimé, cocher l'option **Appliquer le rapport compact**.
- ▶ Marquer dans le tableau toutes les versions de méthode qui doivent être imprimées. Cliquer avec la touche Shift ou Ctrl enfoncée sur la version de la méthode que vous souhaitez marquer. Utiliser le bouton **Tous** pour marquer toutes les versions et le bouton (**aucun**) pour supprimer toutes les sélections.
- ▶ Utiliser **Imprimer** pour ouvrir la fenêtre **ASpect PQ Rapport** avec la sélection des formats d'édition.



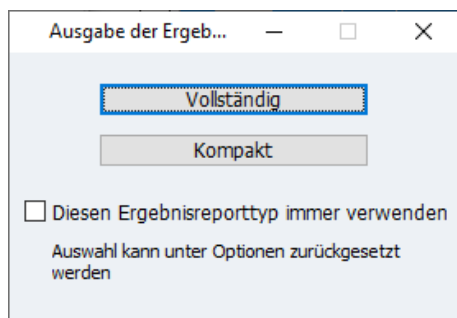
- ▶ Modifier le cas échéant le format d'édition dans la liste **Direct to** et régler les paramètres spéciaux du format d'édition avec **Options**.
- ▶ Démarrer l'impression avec **Start**.

**i** REMARQUE ! Utiliser le réglage **Édition sur | Aperçu** pour l'impression. Un clic sur **Start** permet d'afficher les pages à imprimer dans l'aperçu avant impression. Ainsi, il est possible avant la sortie de l'imprimante de vérifier que toutes les données voulues ou aussi des données inutiles sont imprimées.

Imprimer les résultats actuels

Les résultats affichés dans la fenêtre principale peuvent être imprimés :


- ▶ Activer dans la fenêtre principale l'onglet Résultats pour imprimer son contenu.
- ▶ Démarrer l'impression avec le point de menu **Fichier | Imprimer | Fenêtre active**.
- ✓ La fenêtre **Format rapport résultats** apparaît.

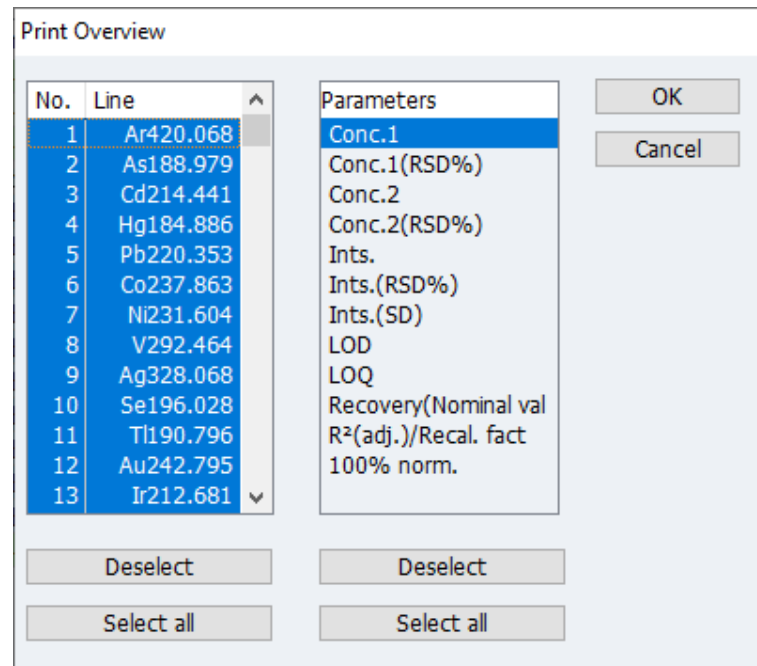


- ▶ Cliquer sur **Complet** pour imprimer les résultats avec les graphiques de signaux. Sélectionner **Compact** pour imprimer les résultats dans un aperçu compact.
- ▶ Continuer comme décrit dans « Imprimer le protocole complet » plus haut.

**i** REMARQUE ! Si, dans la fenêtre **Format rapport résultats**, la case **Toujours utiliser ce type de rapport de résultats** est cochée et qu'un clic est ensuite effectué sur **Complet** ou **Compact**, alors cette fenêtre ne s'affiche plus lors de l'impression de résultats suivante et le dernier type de rapport de résultats est automatiquement utilisé. Ce paramètre peut être restauré dans la fenêtre **Options | Visée**.

Imprimer des données sélectionnées

- ▶ Passer à l'onglet **Aperçu** dans la fenêtre principale.
- ▶ Cliquer sur  dans la section inférieure de cet onglet ou sélectionner le point de menu **Fichier | Imprimer | Fenêtre active**. La fenêtre **Imprimer Aperçu** apparaît.




- ▶ Sélectionner toutes les lignes et les paramètres souhaités pour l'impression et confirmer la sélection avec **OK**.  
La fenêtre **ASpect PQ Rapport** apparaît.
- ▶ Continuer comme décrit dans « Imprimer le protocole complet » plus haut.

#### Voir également

- 📖 Options de visualisation [▶ 136]

### 10.1.2 Imprimer les autres paramètres d'analyse et réglages


Il est possible d'imprimer les paramètres et réglages d'analyse suivants depuis la fenêtre correspondante :

- Méthode
- Séquence
- Données de résultats dans l'onglet **Aperçu** dans la fenêtre principale
- ID échantillon
- QC (onglets de contrôle qualité)
- Étalonnage
- Positions du distributeur d'échantillons
- ▶ Activer la fenêtre dont vous voulez imprimer le résultat sur la surface de travail d'ASpect PQ.
- ▶ Démarrer la mesure de la ligne de séquence en cliquant sur  dans la fenêtre.
- ▶ Il est également possible d'appeler l'ordre de menu **Fichier | Imprimer | Fenêtre active**.
  - ✓ La fenêtre **ASpect PQ Rapport** apparaît.
- ▶ Modifier le cas échéant le format d'édition dans la liste **Direct to** et régler les paramètres spéciaux du format d'édition avec **Options**.
- ▶ Démarrer l'impression avec **Start**.

### 10.1.3 Modèles de protocole

Utiliser le mode Ébauche de protocoles

Il est possible de personnaliser les modèles de protocole installés par défaut. Pour une meilleure vue d'ensemble, il est possible d'éditer les vues de protocoles avec des valeurs réelles.

- ▶ Cocher le point de menu **Fichier | Mode design rapport**.
- ▶ Ouvrir la fenêtre dont vous voulez modifier le modèle de protocole.
- ▶ Cliquer dans cette fenêtre sur  si présent. Sinon, sélectionner le point de menu **Fichier | Imprimer | Fenêtre active**.
- ▶ Confirmer le traitement du modèle de protocole avec **Oui**. Le designer de rapports s'affiche.
- ▶ Effectuer les modifications voulues et enregistrer le modèle de protocole modifié.
- ▶ Relier le modèle de protocole aux contenus d'impression correspondants (voir ci-dessous « Modifier l'attribution »).

Courte introduction au designer de rapports

On appelle les composants du modèle de rapport les objets. Un tableau peut ainsi être constitué d'un objet pour l'en-tête, de valeurs de liste et d'un graphique.

Ces objets comportent à leur tour les informations à imprimer et les propriétés de mise en page correspondantes comme les polices de caractères, les orientations, les sauts de page, les couleurs, etc.

Le designer de rapports met à votre disposition différents types d'objets, p. ex. des objets texte, des graphiques ou des codes-barres. Ces objets peuvent être placés librement dans la zone de travail et leur taille peut être modifiée. Selon le type, un objet peut représenter différentes informations ou avoir différentes propriétés.


En général, on fait glisser les objets voulus avec la souris dans la zone de travail puis on leur donne les contenus et les propriétés de mise en page voulues. Vous pouvez également amener une variable de la liste de variables par « glisser - déposer » dans la zone de travail. S'il n'y a pas encore d'objet à l'emplacement-cible, un objet est automatiquement créé et la variable est attribuée à l'objet.

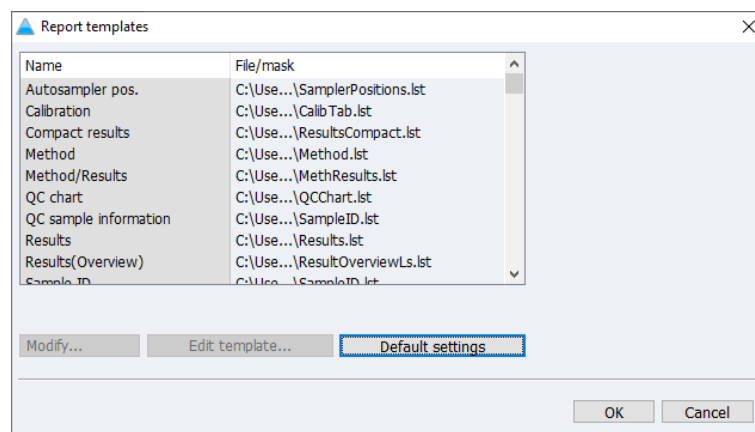
Pour traiter l'objet existant, il faut d'abord le sélectionner. Pour cela, faire un clic gauche sur l'objet. Un objet sélectionné se reconnaît à son cadre surligné. Si vous générez un nouvel objet, il est sélectionné automatiquement et vous pouvez modifier directement sa taille et sa position. Un clic double permet d'ouvrir une fenêtre de dialogue où il est possible de modifier différents réglages.

D'informations sur la commande et les fonctions du designer de rapports se trouvent dans le manuel « designer\_deu.pdf » / « designer\_eng.pdf » sur le CD d'installation du logiciel.

La fenêtre Modèles de rapport

Dans la fenêtre **Modèles de rapport**, les protocoles sont édités et attribués aux fenêtres d'ASpect PQ. Vous pouvez attribuer à une fenêtre plusieurs modèles en utilisant un masque de fichier dans lequel vous pouvez sélectionner le modèle voulu au démarrage de l'impression.


- ▶ Avec le symbole , ouvrir la fenêtre **Données | Rapports**.
- ▶ Cliquer sur **Modèles de rapport**.



Pour les fenêtres suivantes, un modèle de protocole doit être prêt :

Nom	Description
<b>Résultats</b>	Contenu de l'onglet <b>Résultats</b> dans la fenêtre principale
<b>Résultats compacts</b>	Aperçu compact des résultats
<b>Résultats (Aperçu)</b>	Contenu de l'onglet <b>Aperçu</b> dans la fenêtre principale
<b>Étalonnage</b>	Étalonnage de l'analyse : Fenêtre <b>Étalonnage</b>
<b>Méthode</b>	Paramètres de méthode : Fenêtre <b>Méthode</b>
<b>Méthode/Résultats</b>	Protocole complet
<b>Pos. passeur</b>	Chargement du distributeur d'échantillons : Fenêtre <b>Passeur   Positions</b>
<b>ID échant.</b>	Données d'informations échantillons : Fenêtre <b>ID échant.   Données échantillon</b>
<b>Carte de contrôle</b>	Données des onglets QC : Fenêtre <b>QC</b>
<b>Informations échant. QC</b>	Données d'informations des échantillons QC : Fenêtre <b>ID échant.   Informations échant. QC</b>
<b>Séquence</b>	Suite de séquence : Fenêtre <b>Séquence</b>

Modifier l'attribution

- ▶ Dans la fenêtre **Modèles de rapport**, sélectionner la fenêtre dont le modèle de protocole est modifié.
- ▶ Ouvrir la fenêtre de dialogue pour l'attribution des fichiers avec **Modifier**.
- ▶ Si un seul modèle de protocole doit être attribué, cocher l'option **Utiliser fichier modèle (\*.lst)** puis sélectionner le fichier voulu en cliquant sur .
- ▶ Si plusieurs fichiers sont proposés simultanément au démarrage de l'impression, cocher l'option **Autoriser la sélection de fichier (masque, par ex. c:\Reports\Results\*)**. Entrer le nom de masque en utilisant des caractères de remplacement dans le champ d'entrée.
- ▶ Confirmer vos réglages avec **OK**.

Éditer un modèle de protocole

- ▶ Dans la fenêtre **Modèles de rapport**, sélectionner la fenêtre dont le modèle de protocole est édité.
- ▶ Avec **Modifier le modèle**, ouvrir la fenêtre **Editeur rapport**.


Restaurer les paramètres par défaut

- Les paramètres peuvent être restaurés comme à l'installation du programme.
- ▶ Cliquer sur **Paramètres par défaut**.

## 10.2 Gestion des données pour tous les types de données dans Aspect PQ

Les données suivantes sont générées dans Aspect PQ :

- Méthodes
- Séquences
- Résultats
- Fichier lignes/long.onde
- Modèles de correction
- Spectres de correction
- Modèles de protocole
- Favoris de ligne
- Fiches de travail

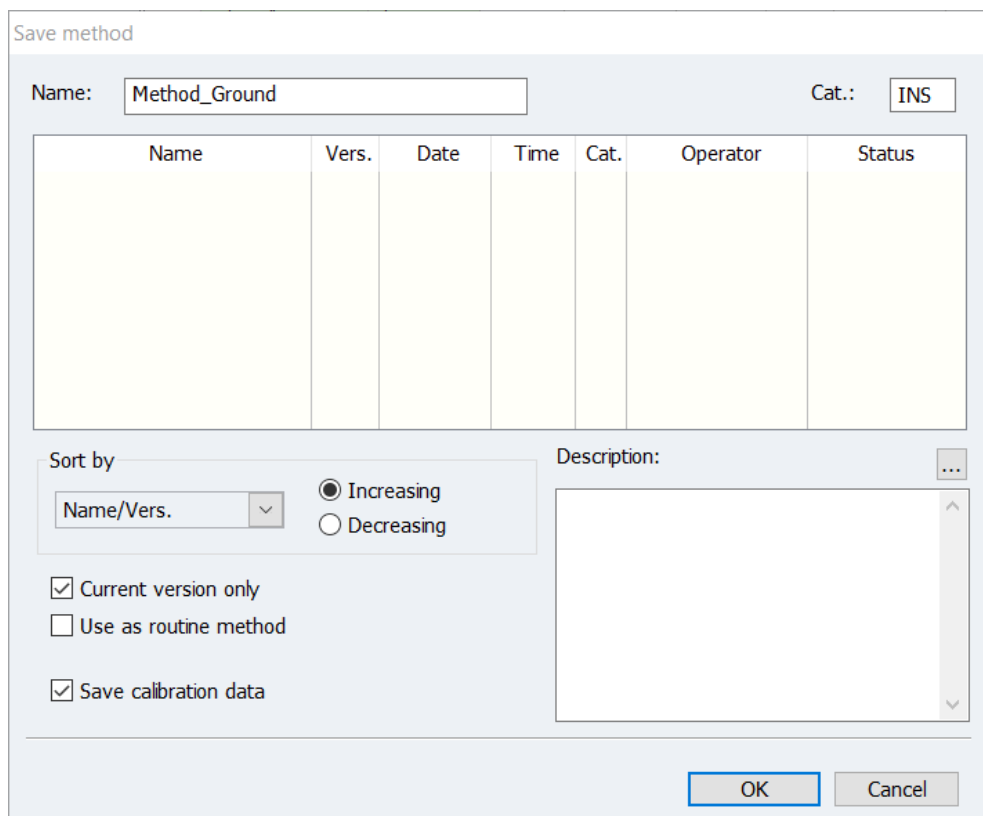
Les types de données susmentionnés sont organisés dans la fenêtre **Données | Gestion des données**. La fenêtre s'affiche en cliquant sur  ou après sélection de l'ordre de menu **Extras | Données**.

### 10.2.1 Gérer les méthodes et les séquences

Les méthodes, les séquences et les modèles de correction sont enregistrés séparément dans une base de données. La base de données de méthodes porte le nom « method.tps ». La base de données avec les séquences est désignée par « sequ.tps ». Les méthodes et les séquences sont désignées dans la suite de ce paragraphe comme « enregistrements ».

Éléments dans la fenêtre de la base de données

Lors de l'enregistrement, de l'ouverture, de la suppression et de l'import/export de méthodes ou de séquences, la fenêtre de la base de données est ouverte avec les mêmes éléments.



Save method

Name:  Cat.:

Name	Vers.	Date	Time	Cat.	Operator	Status

Sort by:   Increasing  Decreasing

Current version only  
 Use as routine method  
 Save calibration data

Description:

Option / Affichage	Description
<b>Nom</b>	Entrer le nom de la méthode/séquence ou afficher la méthode/séquence sélectionnée
<b>Cat.</b>	Caractéristique supplémentaire pour la recherche de méthode / séquence dans la base de données  Il est possible d'entrer au maximum 3 caractères comme désignation de catégorie. L'affichage de la liste peut être réduit en entrant le nom de la catégorie dans le champ <b>Cat.</b> . Effacer l'entrée dans le champ <b>Cat.</b> pour afficher les enregistrements de toutes les catégories.
Liste des enregistrements	Méthodes / séquences enregistrées avec le nom, la version, la date, la catégorie et l'utilisateur
<b>Tri par</b>	Tri de la liste d'après différentes caractéristiques  Une fois l'option choisie, le classement peut être effectué par ordre croissant ou décroissant.
<b>Description</b>	Saisir ou afficher des notes supplémentaires, p. ex. sur l'utilisation des enregistrements  Des remarques prédéfinies peuvent être créées dans la fenêtre <b>Données   Remarques prédéfinies</b> .
<b>Version actuelle uniquement</b>	Si plusieurs versions d'un enregistrement sont définies avec le même nom, seul l'enregistrement avec le numéro de version le plus élevé est affichée.
<b>Méthodes pré-définies</b>	Enregistrer les courbes d'étalonnage disponibles avec la méthode  Les courbes d'étalonnage peuvent être utilisées pour d'autres analyses.


Dans le logiciel, les enregistrements portant le même nom ne sont pas écrasés, mais une nouvelle version est créée à chaque fois et le numéro de version est augmenté de 1.

Vous pouvez importer, exporter ou supprimer depuis les bases de données de méthodes / séquences les enregistrements d'une méthode / séquence donnée.

#### Remarque

Maintenir la touche Ctrl ou Maj enfoncée lors du marquage avec la souris pour sélectionner plusieurs enregistrements dans la fenêtre de la base de données.

Ouvrir la gestion des données

- ▶ Ouvrir la fenêtre **Données | Gestion des données** en cliquant sur .
- ▶ Dans la liste **Type**, sélectionner le type d'enregistrement à traiter : **Méthode** ou **Séquence**.

Exporter des enregistrements

Une exportation permet de mettre des enregistrements à disposition d'autres appareils / ordinateurs. Il est possible d'exporter plusieurs enregistrements simultanément dans un fichier commun. Les données d'exportation reçoivent les extensions suivantes : Enregistrements de méthode - « .met », enregistrements de séquence - « .seq ».

- ▶ Ouvrir la fenêtre de la base de données avec **Exporter**.
- ▶ Sélectionner les enregistrements et cliquer sur **Exporter**.
- ▶ Dans la fenêtre standard **Enregistrer sous**, entrer un nom de fichier et le confirmer avec **Enregistrer**.
  - ✓ La fenêtre de la base de données est affichée avec les fichiers exportés.
- ▶ Quitter la fenêtre de la base de données en cliquant sur **Fermer**.

Importer des enregistrements

En les important, vous pouvez charger des enregistrements d'autres appareils / ordinateurs dans votre base de données. Un fichier d'importation peut comporter plusieurs enregistrements parmi lesquels il est possible de sélectionner ceux à charger.

- ▶ Avec **Importer**, ouvrir la fenêtre **Sélectionner le fichier de la méthode à importer** ou **Sélectionner le fichier de la séquence à importer** avec les fonctions standards pour ouvrir des fichiers.
- ▶ Sélectionner le fichier à importer.
  - ✓ La fenêtre de la base de données s'ouvre avec l'édition du nom, de la date de création et de la catégorie des enregistrements contenus dans le fichier. Dans la ligne de titre de la fenêtre est affiché le nom du fichier d'importation.
- ▶ Dans la fenêtre de la base de données, sélectionner les enregistrements à importer et cliquer sur **Importer**.  
Les enregistrements sont importés dans la base de données. Si un enregistrement du même nom est déjà présent, une nouvelle version de l'enregistrement est créée dans la méthode. Dans la fenêtre de la base de données s'affichent les versions actuelles des enregistrements présents.
- ▶ Quitter la fenêtre de la base de données avec **Fermer** et revenir à la fenêtre **Données**.

Effacer les enregistrements

La fonction Supprimer vous permet de supprimer durablement des enregistrements complets de la base de données.


- ▶ Ouvrir la fenêtre de la base de données avec **Supprimer**.
- ▶ Sélectionner les enregistrements à supprimer.
- ▶ Cliquer sur **Supprimer**.
  - ✓ La fenêtre de la base de données est actualisée et n'affiche plus que les jeux de données restants. Si des enregistrements ont le même nom, le numéro de version est réduit de 1.

Supprimer les enregistrements au moyen du menu Fichier

- ▶ La fenêtre de la base de données **Supprimer méthode** ou **Supprimer séquence** peut également être ouverte à l'aide de l'ordre de menu **Fichier | Supprimer | Méthode** ou **Fichier | Supprimer | Séquence**.
- ▶ Démarrer le nouveau calcul comme décrit plus haut.

## 10.2.2 Gérer les fichiers de résultats

Les fichiers de résultats sont enregistrés pendant la mesure. Il est possible de copier ou de supprimer une base de données avec des résultats.

- ▶ Ouvrir la fenêtre **Données | Gestion des données** avec le point de menu **Extras | Données** ou en cliquant sur .
- ▶ Dans la liste **Type**, sélectionner l'option **Résultats**.

Importer des données de résultats

Le logiciel permet d'importer des données de résultats. Au cours de cette procédure, les données sont classées dans le dossier de résultats au sein de la structure de fichiers du logiciel.

- ▶ Cliquer sur **Importer**.
  - ✓ La fenêtre **Sélectionner fichiers de résultats** apparaît.
- ▶ Sélectionner les fichiers TPS et cliquer sur **Ouvrir**.
- ▶ Sélectionner un sous-dossier pour la mémoire des résultats et cliquer sur **OK**.
  - ✓ Les fichiers TPS et les fichiers SPK correspondants (le cas échéant) sont copiés dans le dossier de résultats sélectionné.

Exporter des fichiers de résultats

Cet ordre permet de copier une ou plusieurs bases de données ainsi que les fichiers de spectre présents dans un autre dossier.

- ▶ Cliquer sur **Exporter**.  
La fenêtre **Exporter** avec l'aperçu des bases de données de résultats existantes apparaît.
- ▶ Sélectionner les bases de résultats à copier par un clic. Marquer plusieurs bases de données avec la touche Ctrl ou Maj enfoncée.
- ▶ Un clic sur **Exporter** permet d'ouvrir la fenêtre **Chercher un dossier**.
- ▶ Sélectionner le dossier cible et cliquer sur **OK**.
  - ✓ Les fichiers TPS et SPK sont copiés dans le dossier-cible.

## Supprimer des résultats

Les données de résultats peuvent être supprimées durablement.

- ▶ Cliquer sur **Effacer**.
- ▶ Dans la fenêtre **Supprimer fichiers de résultats**, sélectionner la base de données de résultats avec un clic.
- ▶ Cliquer sur **Effacer** et confirmer le message de suppression avec **OK**.
  - ✓ Les données sont durablement supprimées.

## Rechercher les résultats d'un échantillon donné

Il est possible de rechercher des échantillons dans les bases de données à l'aide d'un nom d'échantillon.

- ▶ Dans la fenêtre **Données | Gestion des données**, cliquer sur **Chercher éch..**.  
Il est également possible de sélectionner le point de menu **Extras | Rechercher échantillon**.

Search for sample [3 file(s) found]

Search for:

Sample:

Search in (incl. subfolders):

Substring search

Date between:  and:

Search results:


Results file	Folder	Technique	Method	Date
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

Buttons: Open, Start, Close

- ▶ Dans le champ d'entrée **Échantillon**, entrer le nom de l'échantillon.
- ▶ Rechercher des échantillons pour lesquels la chaîne de caractères entrée fait partie du nom, activer **Recherche sous-chaîne**.
- ▶ Cocher la case **Date entre** permet de circonscrire la date de la mesure.
- ▶ Lancer la recherche avec **Démarrer**.
  - ✓ Dans le tableau sont affichés les résultats qui comprennent des échantillons avec le nom entré.
- ▶ Pour ouvrir la base de résultats affichée, marquer cette base de données dans la liste et appuyer sur **Ouvrir**.
  - ✓ Les résultats sont affichés dans la fenêtre principale.


### 10.2.3 Exporter les fichiers de lignes / longueurs d'onde

Le fichier de lignes / longueurs d'onde avec les lignes d'analyse et les centres de crête enregistrés est spécifique à un appareil. Elle est enregistrée sur l'ordinateur avec lequel l'appareil ICP-OES est commandé. Pour utiliser le fichier de lignes / longueurs d'onde sur un autre ordinateur, procéder comme suit :

- ▶ Ouvrir la fenêtre **Données | Gestion des données** avec l'ordre de menu **Extras | Gestion des données** ou en cliquant sur le symbole .
- ▶ Dans la liste **Type**, sélectionner l'option **Fichier raies/long.onde** et cliquer sur **Exporter**.
- ▶ Sélectionner un dossier pour enregistrer le fichier et cliquer sur **OK**.
  - ✓ Le fichier portant le nom « lines.dat » est enregistré dans le dossier sélectionné.

### 10.2.4 Gérer des modèles de correction

Les modèles de correction sont utilisés pour les corrections spectrales. Ils peuvent être transférés depuis un appareil sur un autre. Les fichiers de modèles de correction possèdent l'extension MOD.

- ▶ Ouvrir la fenêtre **Données | Gestion des données** avec l'ordre de menu **Extras | Gestion des données** ou en cliquant sur le symbole .
- ▶ Dans la liste **Type**, sélectionner l'option **Modèles de correction**.

Importer des modèles de correction

Cet ordre vous permet d'importer des modèles de corrections dans ASpect PQ.

- ▶ Cliquer sur **Importer**.
- ▶ Sélectionner le modèle de correction à importer et cliquer sur **Ouvrir**.  
La fenêtre des bases de données **Importation Modèle de correction** apparaît.
- ▶ Cliquer sur **Importer**.
  - ✓ Le modèle de correction est repris dans la base de données.

Exporter des modèles de correction

Cet ordre vous permet d'exporter le modèle de correction pour l'utiliser sur un autre ordinateur.

- ▶ Cliquer sur **Exporter**.
- ▶ Sélectionner le modèle souhaité dans la fenêtre des bases de données **Exportation Modèle de correction**. Un choix multiple est possible.
- ▶ Cliquer sur **Exporter**.
- ▶ Entrer le nom et le lien de sauvegarde dans la fenêtre **Enregistrer sous** et cliquer sur **Enregistrer**.
  - ✓ Le fichier avec le modèle de correction est enregistré.

Supprimer les modèles de correction

Cet ordre vous permet de supprimer les modèles de correction dont vous n'avez pas besoin.

- ▶ Cliquer sur **Effacer**.
- ▶ Dans la fenêtre de la base de données **Modèles de correction**, sélectionner le modèle souhaité.
- ▶ Cliquer sur **Effacer**.
  - ✓ Le modèle de correction est supprimé dans la base de données.



## REMARQUE

### La suppression de modèles de correction peut rendre des méthodes inutilisables

Observer que le système ne contrôle pas si le modèle de correction est utilisé dans une méthode.

#### Voir également

- 📖 Supprimer les perturbations de spectre - fenêtre Modifier les spectres | Corrections spectrales' [▶ 88]

## 10.2.5 Supprimer les spectres de correction

Les spectres de correction non nécessaires peuvent être supprimés de la base de données.

- ▶ Ouvrir la fenêtre **Données | Gestion des données** en cliquant sur le symbole ☰.
- ▶ Dans la liste **Type**, sélectionner l'option **Spectres de correction** et cliquer sur **Supprimer**.
- ▶ Dans la fenêtre de la base de données **Spectres de correction**, sélectionner le spectre à supprimer et cliquer sur **Supprimer**.
  - ✓ Le système contrôle si le spectre est utilisé dans un modèle de correction. Si ce n'est pas le cas, le spectre de correction est supprimé.

## 10.2.6 Importer des modèles de protocole

Il est possible d'importer des modèles de protocole créés de manière externe via la gestion de données dans ASpect PQ :

- ▶ Ouvrir la fenêtre **Données | Gestion des données** en cliquant sur ☰.
- ▶ Dans la liste **Type**, sélectionner l'option **Modèles de rapport** et cliquer sur **Importer**.
- ▶ Dans la fenêtre **Ouvrir**, sélectionner le fichier et cliquer sur **Ouvrir**.  
Les fichiers journaux ont l'extension « .lst ».  
  - ✓ Les modèles de protocole sont importés dans ASpect PQ. Ordonner maintenant le modèle de journal au contenu à imprimer.

#### Voir également

- 📖 Modèles de protocole [▶ 123]

## 10.2.7 Gérer les favoris de ligne

Des favoris de ligne peuvent être définis dans la fenêtre **Méthode**. Ils comportent la ligne d'analyse utilisée pour une application donnée et les paramètres de méthode dépendant de la ligne. Les fichiers de favoris de ligne ont l'extension « .fav ».

- ▶ Ouvrir la fenêtre **Données | Gestion des données** en cliquant sur ☰.
- ▶ Dans la liste **Type**, sélectionner l'option **Favoris**.

Importer des favoris de ligne

Cet ordre vous permet d'importer un enregistrement favori dans ASpect PQ.

- ▶ Cliquer sur **Importer**.


- ▶ Dans la fenêtre de la base de données **Favoris détaillés**, cliquer sur **Importer**.
  - ▶ Sélectionner le fichier favori de lignes à importer et cliquer sur **Ouvrir**.
    - ✓ Après une demande, l'enregistrement de paramètres est ajouté à vos favoris de ligne.
- Exporter des favoris de ligne
- ▶ Cliquer sur **Exporter**.
  - ▶ Dans la fenêtre de la base de données **Favoris détaillés**, sélectionner l'enregistrement souhaité. Un choix multiple est possible.
  - ▶ Cliquer sur **Exporter**.
  - ▶ Dans la fenêtre **Fichier cible (nouveau ou existant)**, entrer le nom et le lien de sauvegarde puis cliquer sur **Enregistrer**.  
Il est également possible d'utiliser un fichier existant comme fichier cible. Dans ce cas, l'enregistrement y est intégré.
    - ✓ Le fichier avec l'enregistrement des favoris de ligne est enregistré.
- Supprimer des favoris de ligne
- Cet ordre vous permet de supprimer des favoris de ligne dont vous n'avez pas besoin.
- ▶ Cliquer sur **Supprimer**.
  - ▶ Dans la fenêtre de la base de données **Favoris détaillés** sélectionner l'enregistrement.
  - ▶ Cliquer sur **Supprimer**.
    - ✓ L'enregistrement marqué est supprimé dans la base de données.

#### Voir également

- 📖 Définir vos propres lignes favorites [▶ 31]

## 10.2.8 Importer, exporter et supprimer des fiches de travail

Des fiches de travail peuvent être importées, exportées et supprimées dans la fenêtre **Données | Gestion des données**. En option, il est possible d'ajouter les méthodes et séquences enregistrées lors de l'exportation. Les fiches de travail possèdent l'extension WST.

- ▶ Ouvrir la fenêtre **Données | Gestion des données** avec l'ordre de menu **Extras | Gestion des données** ou en cliquant sur le symbole .
  - ▶ Dans la liste **Type**, sélectionner l'option **Feuille**.
- Exporter une fiche de travail
- ▶ Cliquer sur **Exporter**.
  - ▶ Dans la fenêtre **Exporter la feuille'**, sélectionner la fiche de travail souhaitée. Pour exporter les méthodes et les séquences contenues dans une fiche de travail, cocher l'option **incluant la séquence et méthode(s)**.
  - ▶ Cliquer sur **Exporter** et entrer un dossier et un nom pour le fichier d'exportation.
  - ▶ Confirmer l'entrée avec **Enregistrer**.
    - ✓ La fiche de travail est exportée avec l'extension WST.
- Importer une fiche de travail
- ▶ Cliquer sur **Importer**.
  - ▶ Sélectionner la fiche de travail dans la fenêtre **Importer la feuille'** et cliquer sur **Importer**. Pour importer les méthodes et les séquences contenues dans une fiche de travail, cocher l'option **incluant la séquence et méthode(s)**.
  - ▶ Dans la fenêtre standard, sélectionner la fiche de travail et cliquer sur **Ouvrir**.

- ✓ La fiche de travail est importée.

- Supprimer des fiches de travail
- ▶ Cliquer sur **Supprimer**.
  - ▶ Sélectionner la fiche de travail dans la fenêtre **Supprimer** et cliquer sur **Supprimer**.

### 10.3 Enregistrer les résultats au format ASCII/CSV

Les résultats de mesure et d'analyse peuvent être enregistrés automatiquement et manuellement au format ASCII/CSV. Les paramètres pour le séparateur décimal et le séparateur de colonne sont réglés dans la fenêtre **Options | Export. ASCII/CSV** pour les deux formes d'exportation.

Exportation de données continue automatique

Lors d'une exportation de données continue automatique, chaque entrée dans le fichier de résultats est immédiatement transférée dans le fichier ASCII convenu. Définir le nom de ce fichier ASCII dans la fenêtre **Options | Export.ASCII en continu**.

Exportation de données manuelle

Lors de l'exportation de données manuelles, vous pouvez sélectionner les lignes d'échantillon à exporter dans le tableau de résultats.

- ▶ Marquer les échantillons dans la liste de résultats.  
Maintenir la touche Ctrl ou Maj enfoncée et sélectionner les échantillons en cliquant sur la ligne d'échantillon. L'ordre de menu **Modifier | Tout sélectionner** permet de sélectionner toutes les lignes d'échantillon.
- ▶ Avec le point de menu **Modifier | Sauvegarder la sélection**, ouvrir la fenêtre standard **Enregistrer sous**.  
Il est également possible de cliquer sur les lignes sélectionnées avec le bouton droit de la souris et de sélectionner un point de menu correspondant dans le menu contextuel.
- ▶ Entrer le nom de fichier et confirmer avec **OK**.  
Les données sont enregistrées dans un format lisible par les tableurs avec l'extension « .CSV ».

#### Voir également

- 📖 Options d'exportation [▶ 138]
- 📖 Options pour l'exportation continue ASCII [▶ 138]

### 10.4 Spécifier les unités

La fenêtre **Données | Unités** permet de gérer les unités disponibles dans tout le programme.

- ▶ Ouvrir la fenêtre **Données | Unités** en cliquant sur le symbole .

3 variantes privilégiées sont disponibles (pour les solutions : mg/L, µg/L, ng/L, mg/kg(liq) ; pour les échantillons solides : mg/kg, µg/kg, ng/kg, m-%). Ces unités ne peuvent pas être modifiées par l'utilisateur. Les unités différentes peuvent être librement définies. En définition libre, entrer sous Facteur le facteur de conversion :

Option	Description
Unité	Désignation de la ligne analyse (max. 10 caractères)
Commentaire	Remarques (max. 20 caractères)

Option	Description
<b>Facteur</b>	Le facteur 1 correspond à 1 µg/L ou µg/kg, le facteur 1 000 correspond à 1 ng/L ou ng/kg
<b>Type</b>	<p><b>solide</b> Unité relative à un échantillon solide</p> <p><b>liquide</b> Unité relative à un échantillon liquide (solution)</p> <p><b>liquide grav.</b> Unité relative à un échantillon liquide pesé, par exemple l'huile</p>

Les boutons permettent de gérer les entrées personnalisées.

Bouton	Description
<b>Ajouter</b>	Ajouter une nouvelle ligne à la fin de la liste
<b>Insérer</b>	Insérer une nouvelle ligne au-dessus du marquage de ligne actuel
<b>Supprimer</b>	Uniquement les unités définies par l'utilisateur, les unités privilégiées ne peuvent pas être effacées
<b>Enregistrer</b>	Enregistrer les modifications et les saisies

## 10.5 Gérer les bases de données pour les stocks et les échantillons QC

Les bases de données avec les étalons de solution mère et les échantillons QC fréquemment utilisés sont gérées dans la fenêtre **Données | Sol. mère/Échant. QC**. Il est possible d'ajouter, de supprimer ou de modifier des entrées de cette base de données. Les étalons de solution mère et les échantillons QC sont disponibles dans le développement de méthodes.

- ▶ Ouvrir la fenêtre **Données | Sol. mère/Échant. QC** en cliquant sur le symbole ☰.
- ▶ Sélectionner l'option **Solution mère** ou **Échant. QC**.
- ▶ Entrer dans le tableau les paramètres des étalons ou les éditer :

Colonne du tableau	Signification
<b>Nom</b>	Entrer la désignation de l'étalon (max. 20 caractères).
<b>Unité</b>	Désignation de la ligne analyse (max. 10 caractères) de l'étalon.
<b>Éléments et concentrations</b>	La saisie de la concentration d'éléments se fait au format « Concentration de Symbole » dans l'unité sélectionnée, p. ex. Fe 0.5;Cu 10; Co 0.005. Il est également possible d'ouvrir avec <b>Concentrations</b> le champ d'entrée <b>Entrée concentration</b> dans lequel la concentration peut être attribuée à chaque élément.


Les boutons permettent de gérer les entrées :

Bouton	Fonction
<b>Ajouter</b>	Ajouter une nouvelle ligne à la fin de la liste.
<b>Insérer</b>	Ajouter la ligne au-dessus d'une ligne marquée.
<b>Supprimer</b>	Supprimer la liste marquée.
<b>Enregistrer</b>	Enregistrer les listes des étalons de stock / des échantillons QC.
<b>Concentrations</b>	Ouvrir le champ d'entrée pour l'élément et la concentration de l'étalon marqué.


## 10.6 Créer des remarques prédéfinies

Des remarques personnalisées peuvent être prédéfinies pour les procédures suivantes :

- Enregistrer méthode
- Enregistrer séquence
- Lancer un recalcul
- Démarrer la mesure

Les remarques personnalisées peuvent être ajoutées en cliquant sur le bouton  à-côté du champ **Description** dans les fenêtres correspondantes.

Créer des remarques

- ▶ Ouvrir la fenêtre **Données | Remarques prédéfinies** en cliquant sur le symbole .
- ▶ Sélectionner la procédure dans la liste **Sélectionner cat..**
- ▶ Cliquer sur **Modifier le modèle** pour ouvrir la liste des remarques.
- ▶ Créer une nouvelle remarque en cliquant sur **Nouveau**. Sous **Nom**, entrer une désignation sous laquelle la remarque peut être sélectionnée. Entrer la remarque en elle-même dans le champ **Texte**.
- ▶ Une remarque peut être éditée en cliquant sur **Modifier** ou supprimée de la liste de sélection en cliquant sur **Effacer**.

## 10.7 Utiliser le presse-papier Windows

Copier les résultats dans le presse-papier

Il est possible de copier les résultats d'échantillons sélectionnés directement dans le presse-papiers de Windows et ainsi de les rendre accessibles à d'autres applications Windows.

Les commandes à cet effet se trouvent dans le menu **Modifier** :

Menu Modifier...	Description
<b>Ne copier que les colonnes visibles</b>	Copier les résultats d'échantillons visibles dans le tableau actuel.
<b>Copier toutes les colonnes</b>	Copier tous les résultats d'échantillons depuis tous les tableaux.
<b>Noms de colonne</b>	Si il est activé (coché), la ligne de titre est copiée avec les désignations de colonne.

- ▶ Marquer les échantillons dans le tableau voulu.
  - Maintenir la touche Ctrl ou Maj enfoncée et sélectionner les échantillons en cliquant sur la ligne d'échantillon.
  - L'ordre de menu **Modifier | Copier toutes les colonnes**. permet de sélectionner toutes les lignes d'échantillon.
- ▶ Si nécessaire, cocher l'ordre de menu **Modifier | Noms de colonne** pour copier la ligne de titre.
- ▶ Sélectionnez l'ordre de menu correspondant pour copier les résultats dans le presse-papiers.

Copier les graphiques comme captures d'écran

Vous pouvez copier la fenêtre de graphique et les graphiques de courbes d'étalonnage, de signaux d'intensité ou de signaux d'émissions comme capture d'écran dans le presse-papier.

- ▶ Faire un clic droit sur le graphique. Dans le menu contextuel apparaissent deux ordres de copie.
- ▶ Sélectionner l'ordre de copie pour copier l'objet voulu : copier le graphique seul ou toute la fenêtre affichée.
  - ✓ L'objet sélectionné est copié dans le presse-papier et est disponible pour les autres applications Windows.

# 11 Adapter ASpect PQ

Dans la fenêtre **Options**, les réglages suivants, valides pour toute l'utilisation d'ASpect PQ, sont effectués :

- Options de visualisation
- Emplacements d'enregistrement pour les fichiers
- Paramètres pour l'exportation de données
- Les réglages généraux pour le processus d'analyse, pour l'étalonnage et la correction de valeur à blanc

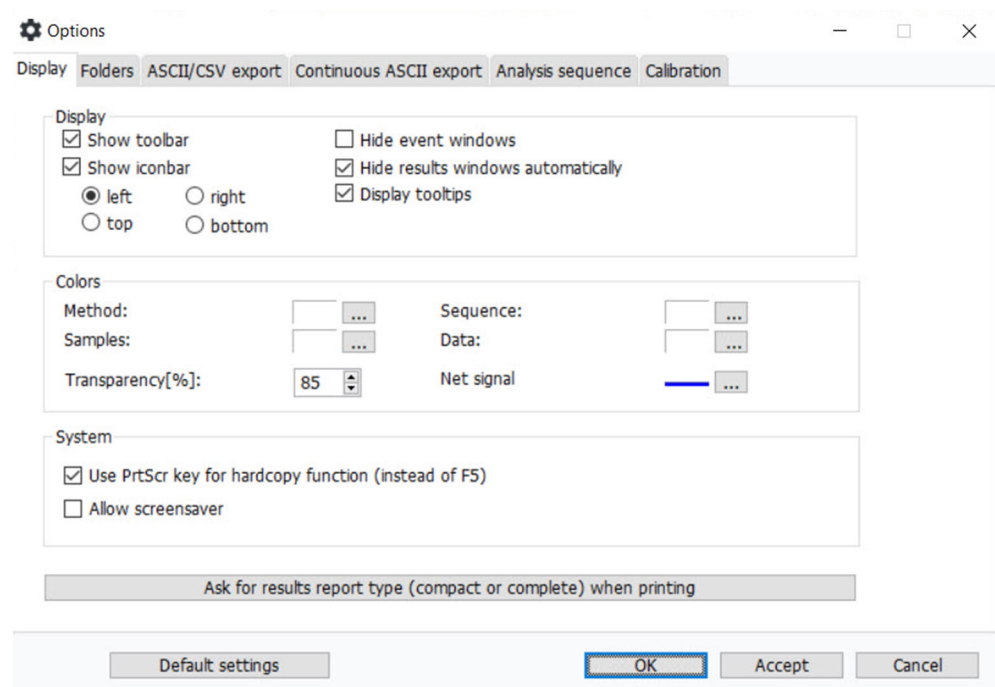
Les réglages effectués restent disponibles après avoir quitté et redémarré ASpect PQ. Le bouton **Paramètres par défaut** permet de restaurer toutes les options aux valeurs pré-définies.

Ouvrir la fenêtre **Options** avec le point de menu **Extras | Options**.

## 11.1 Options de visualisation

La fenêtre **Options | Afficher'**) permet de définir les fonctions visibles sur l'interface de travail. Capture d'écran

Fenêtre Options | Afficher')



Option	Description
<b>Afficher la barre d'outils</b>	Afficher la barre d'outils avec les boutons pour la routine de mesure
<b>Afficher la barre de symboles</b>	Afficher la barre de symboles avec les grands boutons pour l'accès rapide et sélectionner la position de la barre de symboles  La position de la barre de symboles peut également être modifiée en tirant avec la souris. Néanmoins, le réglage n'est pas enregistré jusqu'au prochain démarrage du programme.

Option	Description
<b>Ne pas afficher la fenêtre de résultats</b>	Ne pas afficher les fenêtres des événements (par exemple <b>Délai stabilisation</b> ) À la place, les messages sont affichés dans la barre de statut de la fenêtre principale.
<b>Masquer automatiquement les fenêtres de résultats</b>	Les fenêtres de résultats sont masquées quand les sous-fenêtres (p. ex. la fenêtre <b>Méthode</b> ) sont ouvertes. Une fois la sous-fenêtre fermée, les fenêtres de résultats sont de nouveau affichées.
<b>Afficher les astuces</b>	Afficher les petites infobulles à l'aide de tous les boutons de symboles et pour le titre de colonne dans les fenêtres <b>Méthode</b> , <b>Séquence</b> et <b>ID échant.</b> .
<b>Couleurs</b>	Le bouton <b>...</b> ouvre le dialogue de sélection de couleur. Il est possible de prédéfinir ou de redéfinir les couleurs pour l'arrière-plan de listes.
<b>L'impression d'écran est réalisée avec la touche Impr écran (sinon F5)</b>	Par défaut, l'impression d'écran est déclenchée par F5. La touche <b>Imprimer</b> sur le clavier est utilisée pour la fonction presse-papier de Windows. Si cette case est cochée, la touche <b>Imprimer</b> déclenche l'impression d'écran. Cette option n'est active qu'après le redémarrage d'ASpect PQ.
<b>Autoriser la mise en veille de l'écran</b>	Quand cela est activé, l'économiseur d'écran Windows passe en pause d'entrée.
<b>Proposer le type de rapport (compact ou complet) lors de l'impression</b>	Lors de l'impression de fenêtres de résultats via le point de menu <b>Fichier   Imprimer   Fenêtre active</b> , il est possible de choisir entre un protocole complet et un protocole compact. Cliquer sur ce bouton permet de restaurer la sélection <b>Toujours utiliser ce type de rapport de résultats</b> de telle sorte que le type de protocole peut être de nouveau sélectionné.

## 11.2 Liens de sauvegarde

Lors de l'installation, des liens de sauvegarde sont définis pour les fichiers. Ils sont affichés dans la fenêtre **Options | Dossier** et peuvent en partie être édités ici.

Dossier	Description
<b>Programme</b>	Emplacement d'installation des fichiers de programme exécutables
<b>Répertoire de travail</b>	Dossier pour les données d'utilisateur Le répertoire de travail contient d'autres sous-dossiers. Il est défini à l'installation ou par l'administration utilisateur en option.
<b>Données temporaires</b>	Répertoire des données définies temporairement
<b>Données échantillon</b>	Lien prédéfini pour ouvrir et enregistrer les fichiers d'informations échantillons Il est possible de modifier ce lien. Cliquer sur <b>...</b> pour sélectionner le nouveau dossier. Lors de l'ouverture et de l'enregistrement des fichiers d'informations échantillon, il est possible de sélectionner un lien différent.
<b>Ex/Importation</b>	Emplacement prédéfini pour l'exportation et l'importation de données de méthode et de séquence, ainsi que l'exportation de données de résultats dans des fichiers CSV Il est possible de modifier ce lien. Cliquer sur <b>...</b> pour sélectionner le nouveau dossier. Pour l'exportation et l'importation également, il est possible de sélectionner un chemin d'accès différent.

Dossier	Description
Résultats	Répertoire pour les données de résultats Ce répertoire standard peut contenir d'autres sous-dossiers pour l'enregistrement des résultats. Ces dossiers sont disponibles au démarrage de la mesure pour le rangement des fichiers.
Données	Répertoire de données dans lequel ASpect PQ range les données

### 11.3 Options d'exportation

La fenêtre **Options | Export. ASCII/CSV** permet de définir les paramètres pour l'exportation ASCII de résultats. Les paramètres s'appliquent aussi bien à l'exportation de données automatiquement en continu ainsi qu'à l'exportation manuelle.

Paramètres

Option	Description
Séparateur décimal	Donne le séparateur de nombres décimaux
Séparateur colonne	Indique le caractère séparant les éléments d'une liste entre eux

Pour l'exportation des listes de résultats, sélectionner les séparateurs **Séparateur décimal** et **Séparateur colonne**.

La section **Champs de résultats à exporter** permet de définir quelles colonnes du tableau de résultats sont exportées dans le fichier ASCII. L'option **Tous** exporte toutes les colonnes de la liste de résultats (avec tous les sous-onglets). L'option **uniquement champs sélec.** ouvre une liste dans laquelle les colonnes à exporter peuvent être sélectionnées.

#### Voir également

 Enregistrer les résultats au format ASCII/CSV [[▶ 132](#)]

### 11.4 Options pour l'exportation continue ASCII

Dans la fenêtre **Options | Export.ASCII en continu**, l'exportation automatique de résultats pendant le déroulement de l'analyse est cochée. Le fichier d'exportation est actualisé après l'entrée d'une nouvelle ligne dans la fenêtre de déroulement et de résultats. Les données sont jointes à des fichiers déjà existants.

D'autres options d'exportation peuvent être définies dans la fenêtre **Options | Export. ASCII/CSV**.

Exportation de résultats

La case de contrôle **Export. ASCII cont. des résultats** active la fonction d'exportation. Ensuite, une option pour le nom de fichier doit être sélectionnée :

Option	Description
Nom de la méthode.csv	Le nom de fichier correspond à la désignation de la méthode. L'extension de données est « .csv ». Le fichier est déposé sur le lien de standard Exportation / importation (fenêtre <b>Options   Dossier</b> ).
Nom fichier résultats.csv	Le nom de fichier correspond à la désignation du fichier de résultats. L'extension de données est « .csv ». Le fichier est déposé sur le lien de sauvegarde standard Exportation / importation (fenêtre <b>Options   Dossier</b> ).

Option	Description
autre	Le nom de fichier et le lien peuvent être attribués librement. Le bouton <b>...</b> ouvre la fenêtre standard <b>Sauvegarder sous</b> pour attribuer un lien de sauvegarde et un nom de fichier. Les données sont inscrites à la suite dans ce fichier jusqu'à ce qu'un nouveau nom soit donné ou qu'une autre option de désignation soit sélectionnée.
Créer un fichier pour chaque échantillon (la ligne et le nom d'échantillon sont ajoutés au nom de fichier)	Le nom de fichier est complété d'un numéro de ligne de la liste de résultats. Les caractères non autorisés sont remplacés par des tirets bas (par exemple méthode de test 001 QC 1 mg_L.csv).

Exportation de spectre

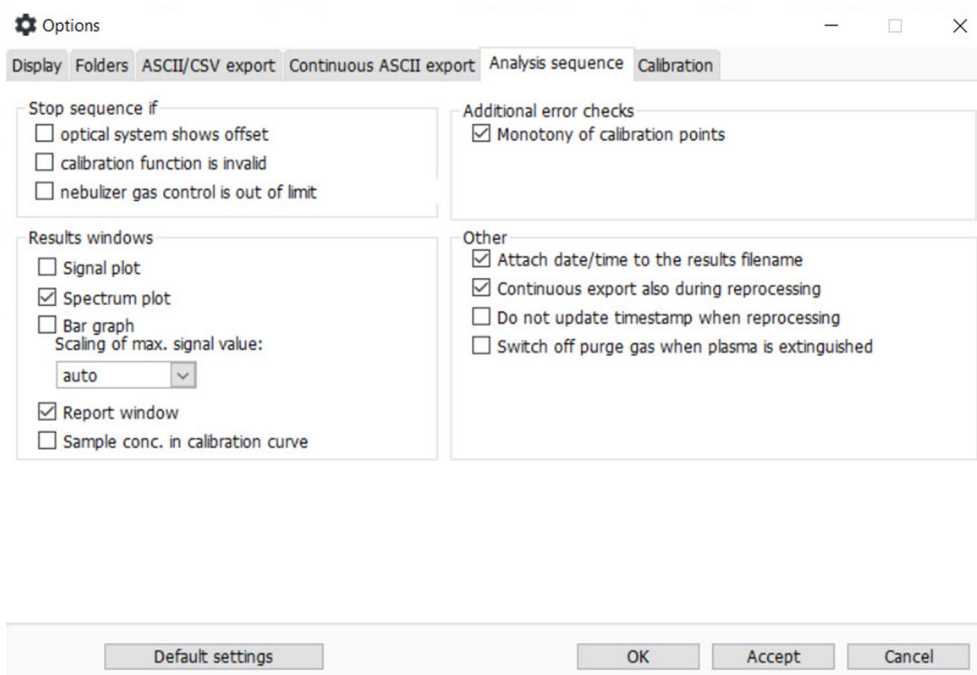
Pour l'exportation de spectre, activer l'option **Exportation continue des spectres (CSV)** et sélectionner un lien de sauvegarde.

Les spectres sont en outre exportés comme fichiers CSV sur le lien d'exportation spécifique. Le nom de fichier est constitué selon le schéma « Ligne de la liste - désignation de l'échantillon - désignation de la ligne - mesure de répétition », . ex. 0007-Échantillon-AI309-02.csv.

## 11.5 Options pour le déroulement de l'analyse

Dans la fenêtre **Options | Séquence**, définir les réglages généraux pour le processus d'analyse. Capture d'écran

Fenêtre Options | Séquence



Arrêter la séquence après les erreurs suivantes

L'analyse est surveillée à la recherche des erreurs suivantes et peut être interrompue en présence des erreurs suivantes :

Option	Description
Décalage du système optique	S'arrête si le réglage de la longueur d'onde (correction Ne) est erroné
Fonction d'étalonnage invalide	S'arrête si la fonction d'étalonnage n'a pas pu être calculée
Valeur de contrôle du nébuliseur dépassée	S'arrête si la valeur de contrôle du nébuliseur est dépassée La valeur de contrôle du débit du nébuliseur est déterminée pendant l'étalonnage. Si la valeur de contrôle est modifiée pendant l'analyse suivante, cela est un signe que des particules détériorent le nébuliseur.

Contrôles d'erreur supplémentaires

Option	Description
Monotonie des points d'étalonnage	Un test de monotonie des points d'étalonnage a lieu. Le test de monotonie permet d'examiner si des concentrations de solution étalon plus élevées entraînent aussi des valeurs mesurées plus élevées.

Fenêtres de résultats

Option	Description
Fenêtre du signal	Pendant le déroulement de l'analyse, une fenêtre avec une représentation du déroulement du signal de mesure en fonction du temps s'affiche.
Fenêtre du spectre	Pendant le déroulement de l'analyse, une fenêtre avec une représentation de la plage de spectre enregistrée s'affiche.
Barres graphiques	Montre les intensités mesurées sous forme de diagrammes en bâtons
Changement d'échelle de la valeur max. du signal	Fixe le maximum de l'axe de valeur mesurée pour les représentations de la courbe du signal <b>auto:</b> Étalonnage automatique de l'axe. Ce réglage peut également être effectué avec la fonction de menu <b>Visée   Changement d'échelle</b> .
Diagnostic Plasma	Pendant le déroulement de l'analyse, une fenêtre s'affiche qui donne des informations de statut sur le plasma.
Conc. échant. dans courbe étalon	Affiche la fenêtre <b>Conc. échant. dans courbe étalon</b> avec la courbe d'étalonnage actuelle et, si déjà mesurée, la courbe de réétalonnage. Après la mesure de l'échantillon, le calcul de la concentration non corrigée à partir de l'émission est mis en évidence par des lignes auxiliaires rouges. En cas d'étalonnage par addition, la correction d'addition convertie est affichée.

Divers

Option	Description
Ajouter date/heure au nom du fichier de résultats	L'heure du PC au démarrage de la mesure est automatiquement jointe au nom du fichier de résultats.
Exportation continue même pour retraitement	Après un nouveau calcul, les résultats sont automatiquement exportés.
Actualiser l'horodatage pour le recalcul	Après le recalcul des résultats, les heures d'origine de la mesure sont maintenues.
Arrêter le gaz de purge lors de l'extinction plasma	Pour économiser du gaz, le gaz de rinçage est désactivé à l'extinction du plasma.

### Voir également

- 📖 Étalonnage [▶ 92]
- 📖 Entrer les paramètres d'étalonnage (fenêtre Méthode | Étalonnage) [▶ 40]

## 11.6 Réglages généraux pour l'étalonnage et la correction de valeur à blanc

Dans la fenêtre **Options | Séquence**, définir les réglages généraux pour l'étalonnage et sélectionner un procédé pour la correction de valeur à blanc.

### Étalonnage

Ce groupe permet d'effectuer l'étalonnage de paramètres essentiels. Dans le préréglage, toutes les cases de contrôle sont désactivées.

Option	Description
<b>Correlation coefficient</b>	Sélectionner un indice d'adaptation de la courbe d'étalonnage <b>R</b> : Coefficient de corrélation <b>R<sup>2</sup> !</b> : Coefficient de détermination <b>R<sup>2</sup> (aj.)</b> : degré d'exactitude ajusté
<b>Afficher la prédiction au lieu de l'intervalle confiance</b>	Si cela est activé, la bande de pronostic est affichée pour l'étalonnage. La bande de confiance est prévue dans les paramètres par défaut.
<b>Le mode auto utilise la fonction quadratique'</b>	« auto » désigne la sélection automatique de la fonction d'étalonnage. Si cela est activé, la fonction quadratique est utilisée pour la comparaison. La fonction rationnelle fractionnelle est le paramètre par défaut.
<b>Calculer la pente pour la concentration moyenne au lieu de 0</b>	Si cela est activé, la montée de la courbe d'étalonnage est calculée sur la concentration moyenne de la plage d'étalonnage. Dans les paramètres par défaut, on calcule la montée pour la concentration 0.



### REMARQUE

Pour la compatibilité du calcul de la fonction d'étalonnage quadratique selon DIN 38402 et ISO 8466-2, toutes les options mentionnées ci-dessus doivent être activées.

### Correction de valeur à blanc

Deux procédés de calcul différents sont disponibles pour la correction de valeur à blanc : Basé sur Conc.1 ou Basé sur Conc.2.

Pour la procédure de calcul basée sur Conc.2, la concentration d'origine de la valeur à blanc (Conc2<sub>BV</sub>) est calculée à l'aide des ID échantillons de la valeur à blanc. Pour le calcul de la Conc.2 de l'échantillon, Conc2<sub>BV</sub> est pris en compte.

Pour la procédure de calcul basée sur Conc.1, la concentration de valeur à blanc déterminée directement de l'échantillon (Conc1<sub>Blank</sub>) est utilisée pour le calcul de la concentration d'échantillon. Ce procédé peut être utilisé lorsque les données d'ID échantillons (p. ex. les dilutions) n'ont pas beaucoup d'effet sur la concentration des solutions de valeur à blanc et par conséquent aucune donnée d'ID échantillons n'a été saisie pour les valeurs à blanc.

Exemple de calcul pour un échantillon original liquide avec pré-dilution :

- Basé sur Conc.1 :  $\text{Conc2}_{\text{Sample}} = (\text{Conc1}_{\text{Sample}} - \text{Conc1}_{\text{Blank}}) * \text{DF}_{\text{Sample}}$
- Basé sur Conc.2 :  $\text{Conc2}_{\text{Sample}} = (\text{Conc1}_{\text{Sample}} * \text{DF}_{\text{Sample}}) - \text{Conc2}_{\text{Blank}}$

Conc1 <sub>Sample</sub>	Concentration de l'échantillon sans prendre en compte les informations dans l'ID échantillons
Conc2 <sub>Sample</sub>	Concentration originale de l'échantillon
Conc1 <sub>Blank</sub>	Concentration de la valeur à blanc sans prendre en compte les informations dans l'ID échantillons
Conc2 <sub>Blank</sub>	Valeur à blanc originale
DF <sub>Sample</sub>	Facteur de dilution de l'échantillon

Pour la correction de la valeur à blanc, le procédé basé sur Conc.2 est défini par défaut. Cocher l'option **Correction du blanc basée sur Conc1** pour utiliser le procédé plus court basé sur Conc.1 sans prendre en compte les ID échantillons des valeurs à blanc.

Limite de détection et de quantification

Les facteurs et le nombre de répétitions des mesures peuvent être modifiés pour les limites de détection et les limites de détermination. Les limites de détection / limites de détermination calculées s'affichent dans la fenêtre **Étalonnage**. Si les paramètres doivent être utilisés pour des résultats existants, les résultats doivent être recalculés. Les facteurs et le nombre de répétitions de mesures utilisés sont indiqués dans la fenêtre **Étalonnage** et dans les protocoles d'impression de l'étalonnage et dans les résultats/mesures de valeur à blanc.

Pour éditer les facteurs et les répétitions de mesures, cliquer sur **LD et Fond**. Les paramètres par défaut suivants sont prévus :

Paramètres	Valeur
Facteur LD	3
FacteurLQ	9
Répliques	11

## 12 Mettre en place un échange de données avec un système externe de gestion des tâches

Vous pouvez exporter les résultats de mesure au format ASCII/CSV d'ASpect PQ dans un système de gestion des informations de laboratoire (LIMS) ou dans un autre programme externe via une interface de données.

De plus, des données d'informations échantillon (ID échantillon) peuvent être importées au format ASCII/CSV provenant de programmes externes, par exemple LIMS ou des applications Microsoft Office.

### 12.1 Exporter des résultats de mesure

Des résultats de mesure peuvent être exportés automatiquement ou manuellement dans d'autres applications, par exemple un LIMS, dans les formats texte ASCII/CSV, à des fins de traitement complémentaire.

Définir des options d'exportation

- ▶ Ouvrir la fenêtre **Options** avec le point de menu **Extras | Options**.
- ▶ Dans l'onglet **Dossier**, sous **Ex/Importation**, définir le lien de sauvegarde pour l'exportation de données de résultats.
- ▶ Dans l'onglet **Export. ASCII/CSV**, définir les séparateurs :
  - **Séparateur décimal** : sélectionner le séparateur pour les chiffres décimaux.
  - **Séparateur colonne** : sélectionner le caractère qui sépare les éléments d'une liste entre eux.
- ▶ Définir les champs pour l'exportation de résultats :
  - **Tous** : exporter toutes les colonnes de la liste de résultats avec tous les sous-onglets.
  - **uniquement champs sélec.**: Cliquer sur **...** pour ouvrir une liste, dans laquelle il est possible de sélectionner les colonnes à exporter.
- ▶ Reprendre les réglages d'exportation en cliquant sur le bouton **Accepter**.
  - ✓ Les options d'exportation sont définies. Les réglages s'appliquent à l'exportation automatique et manuelle.

Configurer l'exportation automatique

Configurer l'exportation automatique des données de résultats pendant le processus d'analyse. Le logiciel met immédiatement à jour le fichier d'exportation après l'entrée d'une nouvelle ligne dans la fenêtre de déroulement et de résultats. Le logiciel ajoute les nouvelles données dans le fichier d'exportation existant.

- ▶ Dans la fenêtre **Options**, passer à l'onglet **Export.ASCII en continu**.
- ▶ Cocher la case **Export. ASCII cont. des résultats**.
- ▶ Définir le nom du fichier d'exportation :
  - **Nom de la méthode.csv**: Le nom de fichier correspond à la désignation de la méthode avec l'extension « .csv ».
  - **Nom fichier résultats.csv**: Le nom de fichier correspond à la désignation du fichier de résultats avec l'extension « .csv ».
  - **autre**: Cliquer sur le bouton **...** pour ouvrir la fenêtre standard **Sauvegarder sous**. Indiquer un lien de sauvegarde et un nom de fichier.

- ✓ Le logiciel écrit les données dans le fichier jusqu'à ce qu'un nouveau nom soit indiqué ou une autre option soit sélectionnée pour la désignation du fichier.
- ▶ Cocher la case **Créer un fichier pour chaque échantillon (la ligne et le nom d'échantillon sont ajoutés au nom de fichier)**, afin de générer un fichier pour chaque échantillon.
  - ✓ Le logiciel complète le nom de fichier avec le numéro de la ligne de la liste de résultats et le nom d'échantillon. Les caractères non autorisés sont remplacés par des tirets bas (par exemple méthode de test 001 QC 1 mg\_L.csv).
- ▶ Cocher la case **Exportation continue des spectres (CSV)** pour exporter également des spectres automatiquement. Sous **Chemin exportation**, sélectionner le lien de sauvegarde.
- ▶ Reprendre les réglages d'exportation en cliquant sur le bouton **Accepter**.
- ▶ Passer à l'onglet **Séquence**.
- ▶ Cocher la case **Exportation continue même pour retraitement** pour exporter également des résultats après un nouveau calcul automatiquement.
- ▶ Fermer la fenêtre en cliquant sur **OK**.
  - ✓ L'exportation automatique de données a été configurée.

Exporter des résultats manuellement

Les résultats de mesure peuvent également être exportés manuellement.

- ▶ Passer à l'onglet **Résultats** dans la fenêtre principale.
- ▶ Marquer les échantillons dans la liste de résultats.  
Maintenir appuyée la touche Ctrl ou majuscule et sélectionner les données à exporter en cliquant avec la souris sur la ligne d'échantillon.  
Le point de menu **Modifier | Tout sélectionner** permet de sélectionner toutes les lignes d'échantillon.
- ▶ Sélectionner le point de menu **Modifier | Sauvegarder la sélection**.
- ▶ Entrer un nom de fichier dans la fenêtre standard **Sauvegarder sous**. Confirmer l'entrée en cliquant sur **OK**.
  - ✓ Le logiciel exporte les résultats au format ASCII/CSV avec l'extension de fichier « .CSV ».
- ▶ Sélectionner le point de menu **Modifier | Ne copier que les colonnes visibles** ou **Copier toutes les colonnes** pour que le logiciel copie les données dans le presse-papier. Les données peuvent être transférées à l'aide de la combinaison de touches Ctrl+V dans un fichier Excel ouvert.

Format des données

Le logiciel sépare les entrées du fichier texte grâce au séparateur de liste. Chaque ligne se ferme avec une extension de ligne (CR/LF).

- Le fichier d'exportation commence avec les données d'en-tête, les informations relatives à l'appareil, la version du logiciel utilisé ainsi que la date et l'heure de la création du fichier.
- La date est formatée en fonction du réglage dans le panneau de configuration Windows. Le format de date (court) est alors utilisé.
- Après une ligne vide, la liste suit les champs à exporter.
- Les données d'en-tête ne sont générées qu'une seule fois. Les valeurs de mesure viennent après les données d'en-tête.

## Exemple pour un fichier d'exportation :

```

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;

```

Fig. 1 Exportation CSV

## 12.2 Importer des fichiers d'informations échantillon

Les fichiers d'informations échantillon (ID échantillon) peuvent être générés et importés manuellement au format ASCII/CSV avec un LIMS ou des applications Microsoft Office.

Pour une importation réussie, veiller à ce que chaque ligne du fichier d'informations échantillon se termine par des caractères de fin de ligne (CR/LF).

Exemple de fichier d'informations échantillon valide :


```

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

```

Fig. 2 Importation CSV

Importer manuellement des ID échantillon

- ▶ Vous pouvez ouvrir une ID échantillon de l'une des manières suivantes :
  - Dans la barre d'outils, cliquer sur le symbole  à côté du champ **Échantillons**.
  - Sélectionner le point de menu **Fichier | Ouvrir le fichier données échantillon**.
  - Dans la fenêtre **ID échant.**, cliquer sur **Ouvrir**.
- ▶ Sélectionnez le fichier dans la fenêtre par défaut **Ouvrir**.
  - ✓ Les ID échantillons sont affichés dans la fenêtre **ID échant.** et peuvent être utilisés pour la prochaine analyse.

## 12.3 Champs de l'exportation de résultats

Nom du champ	Description	Type de données
N°	Numéro dans la liste des séquences	Nombre entier

Nom du champ	Description	Type de données
<b>Nom</b>	Nom de l'échantillon, du standard ou de l'échantillon/standard QC	Chaîne de caractères, max. 20 caractères
<b>Raie</b>	Ligne d'éléments	Chaîne de caractères, max. 10 caractères
<b>Type</b>	Analyte ou étalon interne 0 = analyte IS1 ... x = étalon interne	Nombre entier
<b>Unité1</b>	Unité de la concentration 1 (concentration de l'échantillon à analyser)	Chaîne de caractères, max. 10 caractères
<b>Conc.1</b>	Concentration de l'analyte dans l'échantillon / l'étalon	Nombre décimal
<b>SD1</b>	Écart-type de la concentration 1 (moyenne statistique)	Nombre décimal
<b>RSD%</b>	Écart-type relatif de la concentration 1 (moyenne statistique)	Nombre décimal
<b>NivConf</b>	Plage de confiance de la concentration 1	Nombre décimal
<b>FD</b>	Facteur de dilution en cas de dilution automatique de l'échantillon (pris en compte pour le calcul de la concentration)	Nombre décimal
<b>Unité2</b>	Unité de la concentration 2 (concentration de l'échantillon d'origine)	Chaîne de caractères, max. 10 caractères
<b>Conc.2</b>	Concentration de l'échantillon d'origine	Nombre décimal
<b>SD2</b>	Écart-type de la concentration 2 (moyenne statistique)	Nombre décimal
<b>RSD%</b>	Écart-type relatif de la concentration 2 (moyenne statistique)	Nombre décimal
<b>NivConf</b>	Plage de confiance de la concentration 2	Nombre décimal
<b>Norm. 100 %</b>	Concentration normée en pourcentage 2	Nombre décimal
<b>CQ</b>	Informations relatives au QC et à l'étalonnage	Chaîne de caractères, max. 30 caractères
<b>CQ</b>	Informations relatives au QC et à l'étalonnage	Chaîne de caractères, max. 30 caractères
<b>CQ</b>	Informations relatives au QC et à l'étalonnage	Chaîne de caractères, max. 30 caractères
<b>Remarq.</b>	Remarques	Chaîne de caractères, max. 40 caractères
<b>Ints.</b>	Moyenne des intensités ponctuelles mesurées	Nombre décimal
<b>SD (Ints.)</b>	Écart-type standard (moyenne statistique)	Nombre décimal
<b>RSD%</b>	Écart-type moyen (moyenne statistique)	Nombre décimal
<b>Date</b>	Date de la mesure	Réglage Windows pour le format de date court, par exemple 30/01/2024

Nom du champ	Description	Type de données
Heure	Heure de la mesure	hh:mm, par exemple 14:29
Intens.norm.	(pas utilisé dans ASpect PQ)	/
SD	(pas utilisé dans ASpect PQ)	/
RSD%	(pas utilisé dans ASpect PQ)	/
Masse	(pas utilisé dans ASpect PQ)	/
Unité	(pas utilisé dans ASpect PQ)	/
Hum.[%]	(pas utilisé dans ASpect PQ)	/
RHF[%]	(pas utilisé dans ASpect PQ)	/
Poids [mg]	(pas utilisé dans ASpect PQ)	/
Erreur	Message d'erreur si une erreur survient pendant la mesure	Chaîne de caractères
Pos	Position de l'échantillon dans le distributeur d'échantillons	Nombre entier
FD	Facteur de pré-dilution. Facteur duquel l'échantillon original a été dilué avant d'être placé dans le distributeur d'échantillons ou d'être amené dans le plasma en cas de travail sans distributeur d'échantillons. Le facteur est nécessaire pour le calcul de la concentration de l'échantillon d'origine ( <b>Conc. 2</b> ).	Nombre décimal
Poids [mg]	Pesée en milligrammes. Masse de l'échantillon d'origine, dilué dans la solution lors du traitement initial de l'échantillon (est utilisée lors du calcul de la conc. 2)	Nombre décimal
Vol. [mL]	Volume du solvant dans lequel la pesée correspondante a été diluée (est utilisé lors du calcul de la conc. 2)	Nombre entier
Pds.tot. [g]	Pesée totale de l'échantillon et du solvant en grammes	Nombre décimal
Nom(2)	Désignation supplémentaire de l'échantillon	Chaîne de caractères, max. 20 caractères
AS-FD	Facteur de dilution du distributeur d'échantillon ou du système de dilution	Nombre décimal
Corr. blc	Correction de valeur à blanc <b>arrêt</b> Aucune correction de valeur à blanc n'est effectuée. <b>marche</b> Pour le calcul de la concentration de l'échantillon d'origine, la dernière valeur à blanc mesurée dans la séquence est soustraite.	0   1
Facteur	(pas utilisé dans ASpect PQ)	/
Répliques(Ints.)	Valeurs individuelles des mesures d'intensité	Chaîne de caractères de nombres décimaux séparés par des espaces, max. 1000 signes

Nom du champ	Description	Type de données
Fond(Ints.)	Intensité de fond au niveau de la ligne d'éléments	Chaîne de caractères de nombres décimaux séparés par des espaces, max. 1000 signes

## 12.4 Champs des fichiers d'informations échantillon

Nom du champ	Description	Type de données
Pos	Position de l'échantillon dans le distributeur d'échantillons	Nombre entier
Nom	Nom de l'échantillon, du standard ou de l'échantillon/standard QC	Chaîne de caractères, max. 20 caractères
FD	Facteur de pré-dilution. Facteur duquel l'échantillon original a été dilué avant d'être placé dans le distributeur d'échantillons ou d'être amené dans le plasma en cas de travail sans distributeur d'échantillons. Le facteur est nécessaire pour le calcul de la concentration de l'échantillon d'origine ( <b>Conc. 2</b> ).	Nombre décimal
Unité	Unité pour la concentration de l'échantillon	Chaîne de caractères, max. 10 caractères
Facteur	Facteur d'unité Le facteur 1 correspond à 1 µg/L ou µg/kg, le facteur 1 000 correspond à 1 ng/L ou ng/kg	Chaîne de caractères, max. 10 caractères
Type	Type d'unité 0 = liquide 1 = solide 2 = liquide gravimétrique	Nombre entier
Poids [mg]	Pesée en milligrammes. Masse de l'échantillon d'origine, dilué dans la solution lors du traitement initial de l'échantillon (est utilisée lors du calcul de la conc. 2)	Nombre décimal
Vol. [mL]	Volume du solvant dans lequel la pesée correspondante a été diluée (est utilisé lors du calcul de la conc. 2)	Nombre entier
Pds.tot. [g]	Pesée totale de l'échantillon et du solvant en grammes	Nombre décimal
Nom(2)	Désignation supplémentaire de l'échantillon	Chaîne de caractères, max. 20 caractères
AS-FD	Facteur de dilution du distributeur d'échantillon ou du système de dilution	Nombre décimal
Corr. blc	Correction de valeur à blanc <b>arrêt</b> Aucune correction de valeur à blanc n'est effectuée.	0   1

Nom du champ	Description	Type de données
	<b>marche</b> Pour le calcul de la concentration de l'échantillon d'origine, la dernière valeur à blanc mesurée dans la séquence est soustraite.	
<b>Type éch.</b>	Échantillon ou valeur à blanc 0 = échantillon 1 = réactif - valeur à blanc	Nombre entier
<b>Éléments</b>	Éléments ou lignes à analyser dans l'échantillon  Tous = tous les éléments de la méthode  Symboles d'élément séparés par une virgule, par exemple Fe, Co, Ni	Chaîne de caractères, max. 10 caractères

## 13 Module de conformité FDA 21 CFR Part 11 en option

Le module de conformité FDA 21 CFR Part 11 en option pour ASpect PQ comporte les fonctions suivantes conformément aux exigences FDA Electronic Records and Electronic Signatures (21 CFR Part 11) :

- Gestion des utilisateurs
- Signatures électroniques
- Historique
- AJ File Protection protège les données contre la manipulation volontaire et involontaire

Dans la gestion des utilisateurs, 6 niveaux d'utilisateurs sont définis de façon standard. Les niveaux d'utilisateurs peuvent être configurés librement et complétés par d'autres niveaux d'utilisateurs.

Lorsqu'une gestion des utilisateurs est installée et configurée, le point de menu **System** est activé dans ASpect PQ. Il permet d'accéder aux fonctions de la gestion des utilisateurs.

Toutes les modifications des données utilisateur sont enregistrées de manière permanente dans une base de données cryptée.

### 13.1 Gestion des utilisateurs

#### 13.1.1 Gestion des utilisateurs – Affichages et paramètres

La gestion des utilisateurs peut être configurée au premier démarrage de la gestion des utilisateurs après l'installation ou à un moment ultérieur par les utilisateurs ayant des droits d'administrateur.

Un compte est créé pour chaque utilisateur dans lequel est enregistré le profil utilisateur. Si le compte utilisateur n'est plus nécessaire, il peut être désactivé ou verrouillé. Impossible de supprimer les comptes utilisateur.

- ▶ Dans ASpect PQ, ouvrir le point de menu **System | User Management**.
- ▶ Il est également possible d'ouvrir la gestion des utilisateurs en dehors de ASpect PQ via le menu Windows-**ASpect PQ | User Management**.
- ▶ Les données de connexion d'un utilisateur avec des autorisations pour la gestion des utilisateurs.
  - ✓ La fenêtre **User Management** apparaît.

Fenêtre User Management

La fenêtre contient une liste des noms d'utilisateur entrés et des noms complets correspondants. Sur le côté droit de la fenêtre sont affichés les détails du profil de l'utilisateur sélectionné.

Détails du profil utilisateur

Les données suivantes s'affichent pour un utilisateur sélectionné dans la liste :

Option	Description
User ID	Identifiant de l'utilisateur
User level	Niveau d'utilisateur attribué avec droits d'utilisateurs
Full name	Nom complet de l'utilisateur
E-signature	<b>Yes:</b> L'utilisateur peut signer les résultats électroniquement. <b>No:</b> L'utilisateur ne peut pas signer électroniquement.

Option	Description
<b>Status</b>	<b>Active:</b> Le nom d'utilisateur peut être utilisé (cercle vert). <b>Disabled:</b> Le nom d'utilisateur est désactivé et ne peut plus être utilisé (cercle rouge).
<b>Passwd. protect.</b>	<b>Active:</b> La connexion de l'utilisateur nécessite un mot de passe. <b>Not active:</b> La connexion de l'utilisateur est possible sans mot de passe. Un clic sur le symbole du verrou permet d'ouvrir la fenêtre <b>Modify user data</b> . Si le verrou est fermé, la protection par mot de passe est activée.
<b>Valid until:</b>	<b>Indefinitely:</b> Le mot de passe reste toujours valide. <b>Date/days :</b> L'utilisateur peut modifier le mot de passe une fois écoulé le délai spécifié. L'option n'est pas affichée si la connexion est effectuée via Active Directory.

## Boutons

Bouton	Description
<b>New ...</b>	Créer un nouvel utilisateur La fenêtre <b>Add user data</b> apparaît.
<b>Modify ...</b>	Modifier les données utilisateur pour la ligne de tableau marquée La fenêtre <b>Modify user data</b> apparaît pour un utilisateur sélectionné. La fenêtre peut aussi être ouverte en double-cliquant sur l'utilisateur.
<b>Active users only</b>	Afficher uniquement l'utilisateur actif
<b>Audit trail</b>	Ouvrir le protocole des événements
<b>Permissions</b>	Attribuer des droits d'utilisateur dans le logiciel
<b>Exit</b>	Quitter l'application

### 13.1.2 Configurer les niveaux d'utilisateurs

À partir du module de conformité FDA 21 CFR Part 11 version 2.0, la gestion des utilisateurs possède une nouvelle fonctionnalité pour la configuration des niveaux d'utilisateurs. Alors que dans les versions précédentes du logiciel, les autorisations disponibles des niveaux d'utilisateurs étaient définies, ces niveaux peuvent maintenant être configurés librement. Dans une liste de fonctions logicielles, cocher ou décocher les fonctions qui doivent être accessibles pour un niveau d'utilisateurs.

#### Nombre de niveaux d'utilisateurs disponibles

Dans la gestion des utilisateurs, 6 niveaux d'utilisateurs sont définis de façon standard. Les niveaux d'utilisateurs peuvent être configurés librement et complétés par d'autres niveaux d'utilisateurs.

- Niveau Administrateur (niveau 0)  
L'administrateur possède tous les droits pour la gestion des utilisateurs et peut configurer cette dernière ainsi que les droits dans les niveaux d'utilisateurs, mais aussi créer ou bloquer des utilisateurs. Dans le pré-réglage, l'administrateur ne possède aucune autorisation pour ASpect PQ et ne peut pas se connecter au logiciel.
- Niveau 1  
Les utilisateurs de ce niveau possèdent toutes les autorisations pour ASpect PQ pour le développement de la méthode et la routine, et peuvent configurer le logiciel.
- Niveaux 2 à 4  
Les utilisateurs de ces niveaux ont des autorisations par palier pour la réalisation d'analyse, où ce qui suit s'applique : Niveau 2 > Niveau 3 > Niveau 4. Ils ne possèdent pas d'autorisation pour la configuration d'ASpect PQ.

- Niveau d'utilisateur 5  
Les utilisateurs de ce niveau possèdent des autorisations pour la connexion à la gestion des utilisateurs et ASpect PQ avec des autorisations minimales, par exemple à des fins d'audit.

En option, jusqu'à 4 au niveaux (6 à 9) peuvent être créés pour des configurations spéciales.

Configurer les niveaux d'utilisateurs

- ▶ Dans la fenêtre **User Management**, cliquer sur **Permissions**.  
✓ La fenêtre **Change user permissions** apparaît.
- ▶ Dans la matrice Autorisation/niveaux, il est possible d'activer une fonction dans un niveau en cochant la case.  
Un clic droit sur une case permet de définir ou de supprimer toutes les coches dans un niveau via le menu contextuel ou de reprendre les autorisations d'un autre niveau.
- ▶ Pour ajouter d'autres niveaux de matrice, cliquer sur **Configure**. Cocher l'option **Additional user levels (max.4)**: et régler le nombre souhaité dans la liste.
- ▶ Pour réinitialiser l'attribution de droits aux pré-réglages, cliquer sur **Configure**. Activer l'option **Reset permissions and levels to default**. Si d'autres niveaux d'utilisateurs ont déjà été attribués à des utilisateurs, une demande de modification du profil utilisateur correspondant apparaît.
- ▶ Une ID est attribuée à chaque autorisation de fonction. Si un utilisateur souhaite effectuer une action pour laquelle il ne possède aucune autorisation, cette ID est indiquée dans Avertissement/message d'erreur. L'ID permet d'identifier clairement les autorisations manquantes. Si nécessaire, cocher l'option **Show column "ID"**.

Remarques concernant les droits d'utilisateur

Certains droits d'utilisateur sont associés aux réglages généraux dans la gestion des utilisateurs. Ces réglages sont accessibles dans la fenêtre **User Management** via le point de menu **Extras | Preferences**.

Droit	Description
<b>Skip calibration interval (ME003)</b>	Une période de validité pour l'étalonnage peut être définie dans les réglages de la gestion de l'utilisateur. Si cette période est cochée et que l'utilisateur ne possède pas ce droit, il ne peut lancer aucune mesure.
<b>Measurement with unreleased methods (categories) (ME004)</b>	Lors de l'enregistrement, il est possible d'indiquer la caractéristique <b>Cat.</b> (catégorie) pour les méthodes et ainsi identifier une méthode pour l'utilisation. Dans la gestion des utilisateurs, jusqu'à 5 désignations peuvent être indiquées pour les catégories via lesquelles les méthodes sont identifiées comme approuvées.  Si un utilisateur possède ce droit, il peut lancer une mesure avec une méthode non validée.

Remarques concernant la mise à jour

Si une gestion des utilisateurs a déjà été configurée, les utilisateurs sont affectés aux nouveaux niveaux d'utilisateurs Admin et Niveau1 à 4. Vérifier si les autorisations définies sont conformes à vos besoins et modifier les droits des différents niveaux. Veiller plus particulièrement à ce que dans la nouvelle installation, l'administrateur n'ait accès qu'à la gestion des utilisateurs et ne possède aucun droit quant à la commande d'ASpect PQ.

### 13.1.3 Configurer les paramètres généraux de la gestion des utilisateurs

La fenêtre **Preferences** permet de configurer de manière générale la gestion des utilisateurs à l'aide des options suivantes :

- Connexion et directives relatives au mot de passe

- Utilisation de répertoires de données
- Réglages pour l'utilisation d'étalonnages et de méthodes
- Signatures

Les paramètres s'appliquent aux nouveaux comptes d'utilisateur créés et doivent donc être effectués après l'installation, avant de créer des comptes d'utilisateur.

- ▶ Dans la fenêtre **ASpect PQ User Management**, sélectionner le point de menu **Extras | Settings....**  
La fenêtre **Preferences** apparaît.
- ▶ À gauche, sélectionner le groupe d'actions à modifier.
- ▶ Procéder à la configuration.  
Cliquer sur **Default settings** pour restaurer les paramètres par défaut pour le groupe d'actions sélectionné. Les paramètres des autres groupes ne sont pas affectés.
- ▶ Reprendre les réglages en cliquant sur **OK**.

#### User access

La connexion peut être configurée localement via la gestion des utilisateurs ou par le biais d'un serveur de connexion via Active Directory.

Pour une connexion locale, sur la page **User access**, sélectionner l'option **Local (with user management)** et configurer les directives générales pour les connexions et les mots de passe :

Option	Description
<b>Number of login attempts:</b>	Nombre de tentatives de connexion invalides (max. 10) Si ce nombre est dépassé, ASpect PQ est terminé après un temps d'arrêt et il doit être redémarré pour une nouvelle connexion. Une entrée (avertissement) a lieu dans le fichier Historique.
<b>Disable account after failed login attempts</b>	L'utilisateur est bloqué après avoir échoué trop souvent pour se connecter
<b>Minium user name length:</b>	Nombre minimal de caractères pour les noms d'utilisateur nouvellement créés (max. 10)
<b>Enforce login with password</b>	Un mot de passe doit être attribué aux noms d'utilisateur nouvellement créés.
<b>Password with letters and numbers:</b>	Seuls les mots de passe comportant à la fois des lettres et des chiffres peuvent être attribués. Cette directive vaut également pour le changement de mot de passe.
<b>Password and user ID must be different</b>	Le mot de passe doit différer du nom d'utilisateur. Cette directive vaut également pour le changement de mot de passe.
<b>User must change password at next login is active</b>	Les nouveaux utilisateurs doivent par défaut modifier leur mot de passe à la première connexion.
<b>Password expires in</b>	Une fois ce délai écoulé, l'utilisateur est prié de changer son mot de passe à la prochaine connexion. Le mot de passe est alors prolongé de la durée définie (max? 999 jours) dans les directives. La valeur est reprise en tant que modèle.
<b>Minium password length:</b>	Nombre minimal de caractères pour les mots de passe nouvellement créés Nombre de caractères : de 3 à 10

Pour la connexion basée sur serveur, cocher l'option **Server-based (with Active Directory)** et configurer ce qui suit :

Option	Description
<b>Domain name(s)</b>	Nom de domaine du serveur de connexion Il est possible d'indiquer 2 serveurs.
<b>Allow local login if login server not reached</b>	Si la connexion via le serveur est un échec, l'utilisateur possédant les droits correspondants peut se connecter localement à la gestion des utilisateurs via le menu de démarrage de Windows. À cette fin, l'utilisateur doit également disposer d'un mot de passe local.  Dans la gestion des utilisateurs, l'utilisateur autorisé peut cocher l'option <b>Local (with user management)</b> , de sorte qu'une connexion locale à ASpect PQ est possible.
<b>Allow local login for AJService account</b>	L'activation de cette option permet d'exécuter des maintenances AJ Service-Personal sur l'appareil sans le soutien supplémentaire de l'administrateur.

Folders

Le répertoire de travail du logiciel de commande et d'évaluation ainsi que le répertoire pour le fichier de piste d'audit peuvent être spécifiés.

Option	Description
<b>ASpect working directory</b>	Réglage du répertoire de travail  Le répertoire de travail comprend les bases de données de méthodes et de séquences et les fichiers de résultats. Le répertoire de travail a été défini à l'installation d' ASpect PQ et peut y être modifié.
<b>Audit trail</b>	Réglage de l'emplacement du fichier de piste d'audit Il est possible de modifier ce lien.
<b>Folder with user database</b>	Affichage de l'emplacement de la base de données utilisateur Ce lien ne peut être modifié qu'à l'aide du programme d'installation.
<b>Protection des fichiers AJ</b>	Le logiciel en option AJ File Protection offre une protection supplémentaire. Il protège les données contre la manipulation volontaire et involontaire, p. ex. l'effacement ou la modification de données.  Quand AJ File Protection est installée, l'interface est active et indique le statut de protection par un marquage. Vert / la protection des fichiers est active ; rouge : le pilote de protection de fichier n'est pas actif. Après avoir cliqué sur le bouton, une fenêtre apparaît avec une liste des répertoires protégés.

Permissions (Details)

Dans ce groupe se trouvent les réglages généraux des méthodes et des étalonnages, qui ont un impact sur les autorisations dans les niveaux d'utilisateur.

Option	Description
<b>Calibration validity period [h:mm]:</b>	Spécifier la période de validité optionnelle de l'étalonnage  Si l'autorisation <b>Skip calibration interval</b> est décochée pour un utilisateur (voir niveaux d'utilisateur), l'utilisateur ne peut démarrer aucune séquence une fois la période de validité écoulée.  Si l'autorisation <b>Skip calibration interval</b> est cochée, l'utilisateur peut démarrer la séquence. Une remarque indiquant que la période de validité de l'étalonnage est écoulée s'affiche.
<b>Method categories for released methods</b>	Jusqu'à 5 catégories indiquant que les méthodes sont approuvées peuvent être indiquées. Les catégories peuvent être spécifiées lors de l'enregistrement de la méthode dans le champ <b>Cat.</b>  Si l'autorisation <b>Measurement with unreleased methods (categories)</b> est décochée pour un utilisateur, celui-ci ne peut démarrer aucune séquence si la méthode correspondante n'est pas marquée avec une des catégories prédéfinies.

## Signatures

La liste affiche la signification des signatures et les niveaux d'utilisateurs correspondants pouvant être sélectionnés en signant.

Bouton	Description
<b>Add</b>	Ajouter une nouvelle signification de signature Après avoir cliqué sur le bouton, la fenêtre <b>Edit list of signature meanings</b> apparaît. Elle permet de sélectionner une nouvelle signification de signature, ainsi que le niveau d'utilisateur autorisé.
<b>Modify</b>	Éditer la signification de la signature sélectionnée
<b>Delete</b>	Supprimer la signification de la signature sélectionnée

### 13.1.4 Créer un nouveau compte utilisateur

Seuls les utilisateurs ayant les droits utilisateur correspondants peuvent configurer un nouveau compte. Les droits pour la gestion des utilisateurs peuvent être attribués au niveau Admin dans les paramètres par défaut des niveaux d'utilisateurs. La configuration d'un nouvel utilisateur avec les droits correspondants se fait dans la fenêtre **Add user data**.

## Options dans la fenêtre Add user data

Option	Description
<b>User ID</b>	L'utilisateur se connecte avec ce nom. Les majuscules / minuscules ne sont pas contrôlées. La longueur minimum dépend des configurations générales de la gestion des utilisateurs.
<b>Full name</b>	Nom complet de l'utilisateur Ce nom est utilisé comme élément de la signature électronique. Nbre max. de caractères : 32
<b>Description</b>	Champ pour les notes L'entrée est optionnelle.
<b>User level</b>	Sélection du niveau d'utilisateur avec les droits correspondants
<b>Password</b>	Choisir un mot de passe Les mots de passe sont sensibles à la casse. Si l'on actionne le dialogue de mot de passe sans entrer de mot de passe, la protection par mot de passe est désactivée. La longueur minimum et d'autres règles concernant les mots de passe sont déterminées dans les configurations générales de la gestion des utilisateurs. Longueur max. du mot de passe : 20 caractères
<b>Symbole du verrou</b>	<b>Fermé</b> : la protection par mot de passe via la saisie d'un mot de passe est activée. <b>Ouvert</b> : la protection par mot de passe est désactivée.
<b>Password never expires</b>	Si cela est activé, le mot de passe est valide indéfiniment. Si cela est désactivé, le mot de passe a une durée d'expiration prédéfinie. La valeur prédéfinie est reprise des directives relatives aux mots de passe. L'utilisateur peut également prolonger à l'avance la durée de validité du mot de passe. Ce réglage est masqué si la connexion s'effectue via le serveur de connexion et Active Directory.
<b>User-specific working directory</b>	Un répertoire de travail propre à l'utilisateur est créé selon le schéma suivant : \ASpect-Répertoire de travail\Nom d'utilisateur. La structure du dossier est créée lors de la première connexion de l'utilisateur.

Option	Description
<b>Use e-signature</b>	L'utilisateur a le droit d'apposer une signature électronique aux résultats de mesure. Il a pour cela à disposition les significations de signature de son niveau d'utilisateur.
<b>Disable user ID</b>	Désactiver le compte d'utilisateur  Le nom d'utilisateur peut être désactivé temporairement. La désactivation d'un compte d'utilisateur permet d'empêcher que le nom d'utilisateur puisse être de nouveau attribué à des utilisateurs nouvellement créés.
<b>User must change password at next login</b>	L'utilisateur est prié de changer son mot de passe à la prochaine connexion.

Spécifier les données d'utilisateur

- ▶ Dans la fenêtre **User Management**, cliquer sur **New ...**.  
La fenêtre **Add user data** apparaît.
- ▶ Dans les champs et options, modifier les paramètres et cliquer sur **OK** pour confirmer.
  - ✓ Le nouveau compte d'utilisateur apparaît dans la fenêtre **ASpect PQ User Management**.

#### Voir également

- 📖 Configurer les paramètres généraux de la gestion des utilisateurs [▶ 152]

### 13.1.5 Modifier un compte d'utilisateur existant

Les propriétés d'un compte d'utilisateur peuvent être modifiées.

- ▶ Dans la fenêtre **User Management** sélectionner le compte d'utilisateur et cliquer sur **Modify ...**.  
La fenêtre **Modify user data** apparaît avec les paramètres du compte.
- ▶ Procéder au paramétrage et cliquer sur **OK**.
  - ✓ Les modifications sont enregistrées et prendront effet lors de la prochaine connexion de l'utilisateur.

#### Voir également

- 📖 Créer un nouveau compte utilisateur [▶ 155]

## 13.2 Modifier le mot de passe

Cette fonction est uniquement disponible en cas de connexion locale dans ASpect PQ ou dans la gestion des utilisateurs. En cas de connexion via un serveur de connexion, les mots de passe et leur validité y sont gérés.

Selon la règle définie dans le compte utilisateur, l'utilisateur doit modifier à intervalles réguliers le mot de passe attribué en cas de connexion locale.

- ▶ Dans **ASpect PQ** sélectionner le point de menu **System | Change password**.  
La fenêtre **Change password** apparaît.
- ▶ Saisir l'ancien mot de passe et deux fois le nouveau mot de passe, puis cliquer sur **OK** pour confirmer.
  - ✓ Le message **Password was changed** apparaît lorsque l'entrée est correcte.

### 13.3 Afficher, imprimer et exporter la piste d'audit

Dans la piste d'audit sont enregistrés les événements du système ainsi que tous les messages d'avertissement et d'erreur d'ASpect PQ ainsi que la gestion des utilisateurs. Les droits nécessaires dans le compte utilisateur doivent être accordés pour afficher la piste d'audit.

Ouvrir la piste d'audit dans ASpect PQ via le point de menu **System | Audit Trail** ou dans la gestion des utilisateurs en cliquant sur **Audit Trail**.

Les fonctions suivantes sont disponibles pour la piste d'audit :

- Vue
- Filtre
- Actualisation
- Imprimer
- Exportation du fichier au format CSV (seulement si la piste d'audit a été ouverte depuis la fenêtre Administration Utilisateur)

Les paramètres suivants sont documentés dans l'historique :

Colonne du tableau	Description
<b>Type</b>	Affichage du type d'événement Les types d'événements suivants sont mentionnés dans l'historique et marqués par des symboles : info, avertissement, erreur, connexion et déconnexion
<b>Date/Time</b>	Date et heure de l'événement (horloge du PC) Les boutons [+] et [-] dans l'en-tête des deux colonnes du tableau permettent de trier les entrées de la plus ancienne à la plus récente ou vice-versa.
<b>Time zone</b>	Fuseau horaire valable au moment de l'événement (panneau de configuration Windows)
<b>User</b>	Utilisateur connecté au moment de l'événement
<b>Source</b>	Distinction en fonction des événements dans la gestion des utilisateurs ou dans ASpect PQ
<b>Description</b>	Informations complètes concernant l'événement sélectionné

Sélectionner l'affichage

Si la piste d'audit est ouverte dans la fenêtre **User Management**, les événements sont visibles dans ASpect PQ et dans la gestion des utilisateurs. Dans la liste View, l'affichage peut être limité aux événements dans ASpect PQ ou aux événements administratifs.

Si la piste d'audit est ouverte dans ASpect PQ avec le point de menu **System | Audit Trail**, seuls les événements dans ASpect PQ sont affichés.

Filtrer la piste d'audit

Un clic sur **Filter** permet de faire une recherche en fonction des utilisateurs connectés, des types d'entrée ou des durées. De plus, la recherche d'actions concernant des méthodes, des séquences, des résultats ou des fiches de travail peut être limitée. Un clic sur **Deactivate filter** permet de supprimer les restrictions du filtre appliqué.

Actualiser l'historique

Cliquer sur **Refresh** permet d'actualiser la liste d'entrées de la piste d'audit. Cela peut être nécessaire si d'autres entrées ont été faites avec l'écran Historique ouvert.

Imprimer la piste d'audit

La piste d'audit peut être imprimée. Lorsqu'un filtre est utilisé, seules les entrées filtrées sont imprimées.

- ▶ Lancer l'impression de la piste d'audit actuellement affichée en cliquant sur **Print**. La fenêtre d'impression s'ouvre.

- ▶ Sélectionner le format d'édition dans la liste **Direct to**.
- ▶ Lancer l'impression en cliquant sur **Start**.
  - ✓ La piste d'audit est imprimée dans le format d'édition donné.

Exporter l'historique

Exporter les entrées de la piste d'audit dans un fichier au format CSV. La fonction d'exportation est uniquement disponible lorsque la piste d'audit est ouverte dans la gestion des utilisateurs. Si un filtre est activé, seules les entrées filtrées sont exportées.

- ▶ Un clic sur **Export** permet d'ouvrir la fenêtre **Enregistrer sous**.
- ▶ Saisir un emplacement et le nom, puis confirmer en cliquant sur **OK**.
  - ✓ Le fichier de piste d'audit est exporté.

## 13.4 Signatures électroniques

Dans ASpect PQ, les données électroniques peuvent être signées avec une signature électronique. La signature termine le travail sur un fichier et les modifications de fichiers ultérieures conduisent à un statut de signature invalide. Les significations de signature et leur appartenance à un niveau d'utilisateurs sont définies dans les paramètres généraux de la gestion des utilisateurs. Le réglage permettant à un utilisateur de signer un document s'effectue dans le compte utilisateur. Un utilisateur peut également signer un document si cette fonction est activée dans son compte utilisateur et qu'aucune signature n'est prévue pour son niveau d'autorisation.

Le processus de signature crypte les fichiers et ceux-ci sont pourvus d'un statut de signature et des données de l'utilisateur qui signe. En outre, un fichier de signature est créé avec la même désignation que le fichier de résultats, mais avec l'extension de fichier « .sig ». Ce fichier comporte les sommes de contrôle du fichier de résultats, y compris (si présent) le fichier de spectres.

Un fichier peut être signé par plusieurs utilisateurs.

### Voir également

- 📖 Configurer les paramètres généraux de la gestion des utilisateurs [▶ 152]
- 📖 Configurer les niveaux d'utilisateurs [▶ 151]

### 13.4.1 Signer les résultats de mesure

Les utilisateurs habilités peuvent apposer leur signature électronique aux fichiers de résultats de mesure à la fin de la mesure ou après chargement ultérieur du fichier dans la fenêtre **Signataire**.

Options dans la fenêtre Signataire

Option	Description
<b>Nom d'utilisateur</b>	Identifiant de l'utilisateur actuel  Il est possible de modifier ce nom d'utilisateur. Cela permet à d'autres utilisateurs de signer.
<b>Mot de passe</b>	Mot de passe de l'utilisateur
<b>Signification</b>	Signification de la signature  La liste des significations de signature est définie par l'administrateur de la gestion des utilisateurs.
<b>Commentaire</b>	Remarques en option (max. 256 caractères)
<b>Signataire</b>	Signer le document avec les paramètres définis ci-dessus

## Signer les résultats

- ▶ Afficher les résultats de mesure à signer dans la fenêtre principale du logiciel.
- ▶ Sélectionner le point de menu **Système | Signer les résultats**.
- ▶ Saisir le nom d'utilisateur et le mot de passe.
- ▶ Sélectionner la signification de la signature.
- ▶ Cliquer sur **Signataire**.
  - ✓ Le système demande si la signature doit être apposée ou si le processus doit être interrompu. L'apposition de la signature est confirmée.

**Voir également**

- 📄 Créer un nouveau compte utilisateur [▶ 155]
- 📄 Configurer les paramètres généraux de la gestion des utilisateurs [▶ 152]

**13.4.2 Afficher la signature**

Lors de la prévisualisation ou de l'impression de données de résultats signés, une section **Signatures** est ajoutée à la fin du protocole. Ce paragraphe comporte les signatures électroniques du fichier correspondant :

Option	Description
<b>Issued by</b>	Nom complet et identifiant de l'utilisateur qui a signé le fichier
<b>Signed on</b>	Date / heure de la signature
<b>Status</b>	<p>Le statut de la signature peut avoir l'une des deux significations suivantes :</p> <p><b>Valid</b> La signature et les résultats sont complets et corrects. Les sommes de contrôle calculées des fichiers ne présentent pas de différences avec les sommes de contrôle enregistrées dans le fichier de signatures au moment de la signature.</p> <p><b>Invalid (missing or invalid signature file)</b> Le fichier de signature inclus dans l'enregistrement n'a pas été trouvé ou est manquant.</p> <p><b>Invalid (TPS data)</b> Le fichier de résultats a été modifié après la signature. La comparaison entre les sommes de contrôle nouvellement calculées et celles enregistrées montre des différences.</p> <p><b>Invalid (SPK data)</b> Le fichier des données de spectres brutes a été modifié après la signature. La comparaison entre les sommes de contrôle nouvellement calculées et celles enregistrées montre des différences.</p>
<b>Meaning</b>	Signification de la signature
<b>Comment</b>	Commentaire facultatif dans la signature

**13.5 Protection des fichiers AJ**

Le logiciel en option AJ File Protection protège les données contre la manipulation volontaire et involontaire, p. ex. l'effacement ou la modification de données. Un pilote de filtre permet l'accès au répertoire par des applications autorisées ; l'accès par d'autres ap-

plications est bloqué. La fonctionnalité des antivirus et des logiciels professionnels de réplique, de synchronisation ou de sauvegarde de données n'est pas affectée si les normes Microsoft sont respectées.

AJ File Protection doit être installé et configuré par l'administrateur système. L'installation requiert des droits d'administrateur.

Vous trouverez une description détaillée de l'installation et de la configuration du logiciel sur le support d'installation.

En lien avec les droits distincts pour l'enregistrement et l'exportation automatiques, le logiciel AJ File Protection garantit une protection des données sans faille de la création de la méthode, de l'enregistrement des données et de l'analyse.

## 14 Annexe

### 14.1 Aperçu des marquages dans l'affichage des valeurs

Remarque	Signification	Valeurs	Édition
> Étal.	La moyenne de l'échantillon est supérieure à la plage de travail de la courbe d'étalonnage	Moyennes	Fenêtre de déroulement et de résultats
< Étal.	La moyenne de l'échantillon est inférieure à la plage de travail de la courbe d'étalonnage	Moyennes	Fenêtre de déroulement et de résultats
< LD	La valeur d'échantillon est inférieure à la limite de détection	Moyennes	Fenêtre de déroulement et de résultats
< LQ	La valeur d'échantillon est inférieure à la limite de quantification et supérieure à la limite de détection	Moyennes	Fenêtre de déroulement et de résultats
ETR !	La moyenne d'échantillon ou la moyenne standard est en dehors de la plage d'écart-type relatif prédéfinie	Moyennes	Fenêtre de déroulement et de résultats
RR !	La moyenne d'échantillon ou la moyenne standard est en dehors de la plage d'étendue relative prédéfinie	Moyennes	Fenêtre de déroulement et de résultats
Facteur !	Dépassement de limite du facteur de réétalonnage pour la courbe d'étalonnage	Courbe d'étalonnage	Fenêtre de déroulement et de résultats
R <sub>2</sub> (adj.) ou R	Le degré d'exactitude de la régression R <sub>2</sub> (adj.) ou R (selon la sélection dans la fenêtre <b>Options   Séquence</b> ) de la courbe d'étalonnage est inférieur à la valeur prédéfinie	Courbe d'étalonnage	Fenêtre de déroulement et de résultats Fenêtre <b>Étalonnage</b>
#MAN.	Une valeur individuelle d'échantillon ou une valeur individuelle d'étalon a été exclue manuellement du calcul des moyennes d'échantillon	Valeurs ind.échant.	Fenêtre <b>Répliques des échantillons'</b>
#KOR.	Une valeur individuelle d'échantillon ou une valeur individuelle d'étalon a été exclue du calcul des moyennes d'échantillon par test des valeurs extrêmes	Valeurs ind.échant.	Fenêtre <b>Répliques des échantillons'</b>