

操作手册

ASpect PQ



技术服务

耶拿分析仪器（上海）有限公司
上海市钦州北路1122号91号楼10层
电话：021-54261978
传真：021-54261977
电子邮件：info@analytik-jena.com.cn



为了正确、安全地使用本产品，请遵循说明。保留此操作手册以备将来参考。

一般信息

<http://www.analytik-jena.com.cn>

文件编号

/

版本

C (04/2025)

技术文件

Analytik Jena GmbH+Co. KG

© Copyright 2025, Analytik Jena GmbH+Co. KG

目录

1	ASpect PQ 软件	7
1.1	数据保护信息	7
1.2	启动 ASpect PQ	7
1.2.1	快速启动 窗口	7
1.2.2	从工作表开始	9
1.2.3	在没有工作表的情况下开始	9
1.2.4	打开 ASpect PQ 的第二个实例	10
1.2.5	锁定 ASpect PQ	10
1.3	退出 ASpect PQ	10
1.4	操作须知	11
1.4.1	工作区	11
1.4.2	帮助功能	11
1.4.3	菜单栏、工具栏和图标栏概览	12
1.4.4	常用控制元件	14
2	工作表	16
2.1	创建新工作表	17
2.2	编辑工作表	18
2.3	加载工作表	18
2.4	删除工作表	19
3	方法	20
3.1	创建、保存和加载方法	20
3.1.1	创建新方法	20
3.1.2	保存方法	21
3.1.3	加载方法	22
3.2	指定方法参数	22
3.2.1	指定分析线 (方法 谱线 窗口)	23
3.2.2	配置等离子体和传输光学器件的参数 (方法 等离子体 窗口)	28
3.2.3	样本引入的配置 (方法 样品传输 窗口)	30
3.2.4	评估峰值 (方法 评估 窗口)	31
3.2.5	输入校准参数 (方法 校正 窗口)	35
3.2.6	指定统计分析 (方法 统计 窗口)	39
3.2.7	指定质量控制 (方法 QCS 窗口)	40
3.2.8	指定质量控制 (方法 QCC 窗口)	43
3.2.9	指定结果的输出格式 (方法 输出 窗口)	45
4	序列	47
4.1	创建、保存和打开序列	47
4.1.1	创建新序列	47
4.1.2	保存序列	47
4.1.3	加载序列	48
4.2	序列 窗口	48
4.3	按顺序指定测量和操作	50
4.4	为样本分析/行动选择元素/谱线	52
5	样品信息数据 (样品 ID)	53
5.1	创建、保存和打开样品信息数据	53

5.2	样品ID 样品信息 窗口.....	53
5.3	指定样本信息.....	55
6	进行分析和计算结果.....	56
6.1	主窗口中用于启动分析的菜单命令和按钮概览.....	56
6.2	打开光谱仪并点燃等离子体.....	56
6.3	熄灭等离子体并关闭光谱仪.....	57
6.4	启动测量程序.....	58
6.5	在分析运行期间显示和保存结果.....	59
6.6	中断和继续分析序列.....	60
6.7	重复序列动作.....	61
6.8	后处理分析结果.....	61
6.9	在运行分析的同时评估测量结果（离线模式）.....	64
6.10	在主窗口中显示结果和分析进度.....	64
6.10.1	序列/结果 选项卡.....	65
6.10.2	序列 选项卡.....	65
6.10.3	结果 选项卡.....	65
6.10.4	概览选项卡.....	68
6.11	显示和编辑样本单值.....	69
6.12	显示和编辑强度光谱.....	70
6.12.1	显示光谱 - 编辑谱图 / 显示 窗口.....	70
6.12.2	评估峰值并确定背景校正 - 编辑谱图 处理 窗口.....	73
6.12.3	消除光谱干扰 - 编辑谱图 光谱校正 窗口.....	75
6.13	记录光谱概览.....	77
7	校准.....	79
7.1	校准曲线图.....	80
7.2	显示校准结果.....	81
7.2.1	校准 - 校正表 选项卡.....	81
7.2.2	校准 - 残差 选项卡.....	81
7.2.3	校准 - LOD/ LOQ 选项卡.....	81
7.2.4	校准 - LOD/ LOQ 选项卡.....	82
7.3	编辑校准曲线.....	83
8	质量控制.....	84
8.1	质量控制图的参数.....	84
8.2	质量控制图的条目和界限.....	85
8.3	显示质量控制图.....	86
9	控制和监测光谱仪及配件.....	88
9.1	光谱仪.....	88
9.1.1	配置光谱仪参数和测试功能.....	88
9.1.2	设备参数诊断.....	89
9.1.3	进行连续峰值测量.....	89
9.1.4	记录信号进程.....	91
9.2	等离子体.....	91
9.2.1	点燃等离子体并设置等离子体条件.....	92
9.2.2	检查样品入口和泵.....	93
9.2.3	调整和优化等离子体.....	94

9.3	自动进样器	96
9.3.1	显示连接的自动取样器	97
9.3.2	配置自动取样器架	97
9.3.3	自动取样器的技术参数	98
9.3.4	测试自动取样器功能	99
9.3.5	在自动取样器上显示样品位置	100
9.3.6	稀释功能	100
9.4	循环冷却器	102
10	数据管理	103
10.1	ASpect PQ 中的打印功能	103
10.1.1	打印分析结果	103
10.1.2	打印进一步的分析参数和设置	106
10.1.3	报告模板	106
10.2	ASpect PQ 中所有数据类型的数据管理	108
10.2.1	管理方法和序列	108
10.2.2	管理结果文件	110
10.2.3	导出谱线/波长文件	111
10.2.4	管理校正模型	111
10.2.5	删除校正光谱	112
10.2.6	导入报告模板	112
10.2.7	管理谱线收藏夹	113
10.2.8	导入、导出和删除工作表	113
10.3	以 ASCII/CSV 格式保存结果	114
10.4	指定测量单位	114
10.5	管理储备和质控样本数据库	115
10.6	创建预定义注释	115
10.7	使用 Windows 剪贴板	116
11	自定义 ASpect PQ	117
11.1	查看选项	117
11.2	存储路径	118
11.3	导出选项	118
11.4	连续 ASCII 输出的选项	119
11.5	分析序列选项	119
11.6	校准和空白校正的常规设置	121
12	建立与外部工作管理系统的数据库	123
12.1	导出测量结果	123
12.2	导入样本信息文件	124
12.3	结果导出字段	125
12.4	样本信息文件的字段	126
13	可选 FDA 21 CFR 第 11 部分合规性模块	128
13.1	用户管理	128
13.1.1	用户管理 - 显示和设置	128
13.1.2	配置用户级别	129
13.1.3	配置用户管理的一般设置	130
13.1.4	创建新用户账户	132
13.1.5	更改现有用户账户	133

13.2	更改密码	133
13.3	查看、打印和导出审计线索	133
13.4	电子签名	135
13.4.1	测量结果签名	135
13.4.2	显示签名	135
13.5	AJ 文件保护	136
14	附件	137
14.1	数值显示标记概览	137

1 ASpect PQ 软件

ASpect PQ 是用于下列 ICP-OES 设备的控制和分析软件：

- PlasmaQuant PQ 9000
- PlasmaQuant 9100
- PlasmaQuant 9200

测量程序的方法参数可根据待分析样品的具体要求进行优化。获得的结果数据可以重新计算、导出为各种文件格式并打印出来。

除软件说明外，本手册还包含有关 ICP-OES 设备维护和保养的信息。这些维护说明中的很多都配有动画和视频。

描述的软件版本

本文档基于版本 ASpect PQ 1.4。

预期用途

ASpect PQ 软件专门用于控制上述设备和分析这些设备获得的数据。

对于因非预期使用 ASpect PQ 而造成的问题或损坏，制造商不承担任何责任。

ASpect PQ 及其控制的设备仅限由具备相应资质并经过培训的人员操作。用户必须熟悉本手册和设备用户手册中提供的信息。

1.1 数据保护信息

本软件使用样本名称，并允许选择有关样本的信息（注释）。样本名称是特定样本检测结果的标识符。特别是在临床环境中，样本名称可用于将检测结果指定至接受检测的人。应尽可能减少个人数据，以确保任何人都无法从样本名称或可选注释中获取个人信息。不得使用姓名、社会保险号、身份证号、出生日期或其他个人属性等直接标识符。实验室的数据控制者有责任遵守适用的数据保护法律和义务。

作为客户支持、故障排除和投诉调查等服务相关活动的一部分，耶拿分析仪器有限公司可能会要求共享包含测量结果（包括样品名称或注释）的文件。

1.2 启动 ASpect PQ

- ▶ 打开设备和自动取样器。
- ▶ 单击 Windows 桌面上的 ASpect PQ 图标。
 - ✓ ASpect PQ 启动。
- ▶ 如果已安装用户管理选项，系统将提示您输入用户名和密码。只有成功输入这些信息后，才能访问 ASpect PQ 程序。

软件启动后，将打开快速启动（Quick Start）。此时，您可以选择带有预设方法和序列的工作表来快速开始测量，或者直接切换到 ASpect PQ 界面。

1.2.1 快速启动 窗口

软件启动并有用户登录后（仅在安装了用户管理的情况下），会出现**快速启动**窗口。从这里可以加载工作表或切换到 ASpect PQ，无需任何其他设置。您还可以使用菜单命令文件|快速启动在 ASpect PQ 中打开**快速启动**窗口。

QUICK START TIME: 12.08.2020 14:16:25

Instrument: PQ 9000 ASpect PQ Version: 1.3.0. **analytikjena**
An Endress+Hauser Company

OPERATOR: User1

LAB.:

Routine Method development

Worksheet	Last changed	By
Elemental impurities USP 232_233	09.06.2020 15:50	Analytik Jena
Screening	09.06.2020 15:51	Analytik Jena
Semi Quant	09.06.2020 15:51	Analytik Jena

DESCRIPTION

Elemental impurities USP 232/233
Sample preparation:
Torch material: Quartz

Elem./Wavelength: As 188.979 nm
Plasma power [W]: 1200
View: axial
Plasma gas[L/min]: 12
Neb. gas[L/min]: 0.6
Calibration range: 0 - 112.5 µg/L

Elem./Wavelength: Cd 214.441 nm
Plasma power [W]: 1200
View: axial
Plasma gas[L/min]: 12
Neb. gas[L/min]: 0.6

Favorites Recent Predefined All

Torch material:

Simulation

Logoff... Skip Quick Start Quit **OK**


快速启动 窗口中的设置

下列选项和按钮在快速启动 窗口中可用。

选项/ 按钮	描述
操作者	如果使用可选安装的用户管理功能，该输入字段将显示当前登录的用户。如果不使用用户权限管理，您可以手动输入用户名。
实验室	最多可输入 30 个字符。最后输入的名称将被保存并作为结果报告的信息发布。
常规分析	启动程序进行常规操作。 在常规操作中，只显示启用了常规操作的方法。 如果安装了可选的 "21 CFR 第 11 部分合规性 ASpect PQ" 模块，则会预设常规分析 选项。常规分析 和方法开发 之间没有选择。
方法开发	启动完整程序。方法开发中的所有配置均已发布。
炬管材质	选择所使用的炬管材料（石英或陶瓷），以调整光学等离子体传感器的灵敏度。
模拟	出于培训和演示目的，可以在不连接分析仪的情况下操作 ASpect PQ。 启用后，所有设备功能（包括数据采集和分析）均在模拟模式下运行。
关闭快速启动	在不选择工作表的情况下切换到 ASpect PQ 界面。
配置端口：AX/SDX	仅当 Teledyne Cetac SDXHPLD 稀释系统连接到 ASX-560 自动进样器时。 单击按钮后，将自动配置自动进样器和稀释系统使用的 USB 端口。如果安装了可选的 "21 CFR 第 11 部分合规性 ASpect PQ" 模块（用户管理），则该功能只能由具有管理员权限的用户执行。
退出	关闭快速启动 窗口并退出 ASpect PQ。
OK	选择工作表后，切换到 ASpect PQ 界面。

工作表表格

工作表表格显示当前可用的工作表。这 4 个标签让您更容易找到工作表：

选项卡	内容
推荐方法	工作表标记为 收藏
最近	最近使用的工作表
预定义	在安装 ASpect PQ 时来自耶拿分析的工作表
所有	所有工作表
	使用放大镜图标按元素筛选工作表。单击图标后，将显示元素列表，您可以从中选择元素。如果要搜索多个元素，可以重复选择。如果选择了多个元素，则会显示在存储方法（OR 逻辑）中至少包含一个元素的所有工作表。这种搜索既包括直接链接到工作表的方法，也包括在链接序列中加载的方法。

1.2.2 从工作表开始

工作表是一个包含方法和序列的文件夹。工作表还可选择包含样本 ID 设置和结果文件保存设置。选择工作表后，就可以直接开始测量。如果方法和序列有多个版本，则始终使用最新（当前）版本进行测量。

- ▶ 将附件安装到分析仪上，然后打开附件和设备。
- ▶ 启动软件。
 - ✓ 出现快速启动 窗口。
- ▶ 在操作者 和实验室 字段中输入所需信息。
- ▶ 在矩管材质 中选择石英玻璃或陶瓷。
- ▶ 在工作表表格中选择所需的工作表。
- ▶ 单击OK。
 - ✓ 出现 ASpect PQ 界面。方法和序列已加载。

根据工作表的配置，您现在可以将与工作表一起加载的方法和序列链接到样本 ID 文件，或直接开始测量。

1.2.3 在没有工作表的情况下开始

如果没有准备好的工作表，则必须加载或配置测量方法、序列和样品 ID。

- ▶ 将附件安装到分析仪上，然后打开附件和设备。
- ▶ 启动软件。
 - ✓ 出现快速启动 窗口。
- ▶ 在操作者 和实验室 字段中输入所需信息。
- ▶ 在矩管材质 中选择石英玻璃或陶瓷。
- ▶ 单击关闭快速启动。
 - ✓ 出现 ASpect PQ 界面。

测量程序的一般顺序

为分析任务指定方法和序列，然后启动测量程序。手动或自动测量程序需要执行以下操作：

- ▶ 在方法中指定方法参数（方法开发）。加载方法。
- ▶ 创建序列。序列包含按处理顺序排列的样本和操作信息。可直接输入一些样品描述数据并与序列一起保存，如样品名称及其在自动取样器上的位置。

- ▶ 对于常规分析，创建样品信息文件（样品 ID）是非常有用的。该文件包含与样品相关的数据，如样品名称、稀释因子和自动进样器位置。如果要对原始样本的浓度进行反向计算，则需要这些数据。样本信息文件是文本文件，可通过外部应用程序创建。
- ▶ 开始测量。

在测量过程中，结果会立即写入结果数据库。综合数据管理功能（如导出、打印等）可访问该中央结果文件。

测量开始后，结果数据将输入结果列表。您可以通过选择相应的样本行来访问详细视图（如单个值、光谱）。最后得到的结果总是附加在表格末尾，不可能覆盖结果。

通过再处理功能可以对数据进行进一步分析。测量数据可用于打印报告或导出。

1.2.4 打开 ASpect PQ 的第二个实例

如果应用程序已在运行，则将以脱机模式打开该应用程序的另一个程序实例。在此模式下，无法与设备通信。不过，所有其他功能，如开发方法或加载和分析结果，都可以与第一个程序实例中的运行测量并行使用。

- ▶ 使用文件 | 启动离线 菜单项在第二个实例中启动程序。

1.2.5 锁定 ASpect PQ

可锁定应用程序以进行操作，同时在锁定状态下继续执行测量。结合可选的用户管理功能，需要确认密码以解锁屏幕。

- ▶ 选择其他 | 锁定系统 菜单项。
- ▶ 要解锁应用程序，请单击屏幕上的挂锁图标。

1.3 退出 ASpect PQ

- ▶ 熄灭等离子体。
- ▶ 选择文件 | 退出 菜单项退出程序。
- ▶ 如果此时打开的方法、序列或样本信息数据文件尚未保存，您将收到相应通知。如果要保存文件，请单击是。
- ▶ 等离子体关闭后，ICP-OES 设备仍需要时间进行系统冷却。如果尚未达到目标温度，则会出现一个进度窗口，并提示安全关闭设备。
在退出 ASpect PQ 之前，请勿关闭 ICP-OES 设备。



注意

如果在等离子体燃烧时退出 ASpect PQ，等离子体将在查询后自动熄灭！

另见

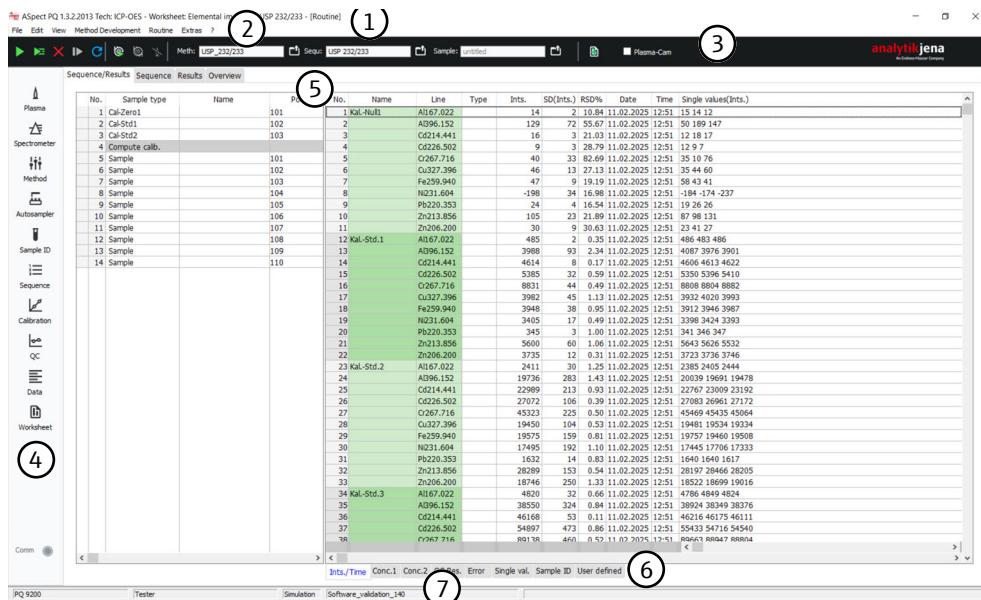
- ▣ 打开光谱仪并点燃等离子体 [▶ 56]


1.4 操作须知

1.4.1 工作区



启动 ASpect PQ 程序后，首先会打开快速启动窗口。在这里，您可以访问工作区。

工作区的主要组成部分



编号	描述
1	在标题栏中，您可以找到有关软件版本、连接设备、技术和工作表（如果已加载）的信息。
2	菜单栏用于访问软件的所有程序功能。
3	工具栏包含启动和暂停测量序列的按钮，并显示当前加载的方法、序列和样本 ID 文件。单击字段后面的  按钮，加载数据记录。您还可以在此处找到创建新工作表的按钮。
4	图标栏可让您访问软件最重要的窗口（功能）。打开其中一个窗口时，相应的图标会变成红色。如果打开了多个窗口，再次单击图标会将该窗口显示在前面。
5	主窗口显示序列和测量结果。
6	有些主选项卡在窗口底部区域还有额外的子选项卡。
7	底部的状态栏显示有关已连接设备、已登录用户和当前显示的结果数据库名称的信息。

另见

-  在主窗口中显示结果和分析进度 [▶ 64]
-  快速启动窗口 [▶ 7]

1.4.2 帮助功能

可通过?|帮助主题菜单项使用 ASpect PQ 的帮助。在使用 ASpect PQ 窗口时，您可以按下 F1 功能键激活上下文相关帮助。

当您将鼠标指针悬停在方法、序列和样品 ID 窗口上时，该程序会显示工具栏和图标栏按钮、其他图标按钮以及列标题的工具提示（简要信息）。

1.4.3 菜单栏、工具栏和图标栏概览





菜单栏中的功能







菜单栏位于 ASpect PQ 界面的顶部，用于启动所有软件操作。当前工作区内容无法访问的菜单和按钮显示为灰色。某些菜单项（如打印功能）的显示取决于其他窗口是否打开。

菜单项	描述
文件	<ul style="list-style-type: none"> 创建、打开和保存方法、序列和样本信息数据 打开结果数据 删除方法和序列 导出频谱数据 打印活动窗口或报告 打开报告设计模式 启动离线或在线程序实例 打开快速启动窗口。 退出应用程序 直接打开上次打开的方法和序列
编辑	<ul style="list-style-type: none"> 复制和插入文本和输入字段的内容 将结果列表中的选定行复制到剪贴板 删除结果列表内容
查看	<ul style="list-style-type: none"> 在分析过程中打开和关闭显示图表和信息（如信号曲线）的窗口 选择图表信号轴的标度
方法开发	<ul style="list-style-type: none"> 方法开发所需的开放窗口 记录概览频谱
常规分析	<ul style="list-style-type: none"> 开始、暂停和取消测量 重新处理结果 删除校准 熄灭等离子体 清洗系统
系统	如果安装了可选的 "21 CFR 第 11 部分合规性 ASpect PQ" 模块，则可用 <ul style="list-style-type: none"> 配置用户管理 更改密码 查看审计跟踪 标志结果
其他	<ul style="list-style-type: none"> 打开数据 和选项 窗口 打开谱线表 搜索样本 打印当前屏幕显示 检查并进行维护（循环冷却器） 锁定工作站
?	<ul style="list-style-type: none"> 查看帮助和版本信息

工具栏




工具栏上的按钮主要用于启动/暂停和继续序列测量。当前加载的方法、序列和样本 ID 显示在工具栏字段中。

工具	描述
	启动测量程序
	测量序列中的选定行
	暂停运行测量程序
	继续暂停的序列测量

工具	描述
	重新处理结果
	启动/停止 ICP-OES 设备上的泵
	加快泵速 (冲洗样品通道)
	熄灭等离子体 (快速关机)
	打开文件 保存的方法、序列或样本 ID 可以加载到程序中，并用于当前分析。
	创建新工作表
检查等离子体	激活等离子体摄像机 软件将连续显示摄像机图像和等离子体记录。可能出现的异常情况，如在点火过程中形成环形等离子体，都能很快被检测出来。 可以使用摄像机窗口中的 设置 裁剪相机图像 菜单命令裁剪摄像机图像。

图标栏

通过图标栏可以快速访问 ASpect PQ 程序的主要功能。单击图标可打开具有相应程序功能的窗口。安装后，图标栏位于屏幕左侧，但可以按住鼠标键随意移动。



图标	描述
	检查雾化情况： <ul style="list-style-type: none"> ▪ 点燃/熄灭等离子体 ▪ 设置气体流量 ▪ 检查将样品输送到雾化器的泵 ▪ 调整传输光学器件 ▪ 优化等离子功率和雾化器气体
	检查光谱仪功能： <ul style="list-style-type: none"> ▪ 设备数据 ▪ 波长校正测试 ▪ 开始测量测试波长 ▪ 为设备优化启动持续测量
	打开方法窗口
	指定自动取样器
	打开样本信息数据窗口
	打开序列窗口
	打开校准窗口
	打开包含质量控制数据的窗口
	打开数据管理
	管理工作表，打开保存的工作表

1.4.4 常用控制元件

ASpect PQ 中使用了各种按钮、鼠标和键盘功能，它们的含义总是相同或非常相似。在此对这些控制元件进行一般性描述。必要时，在相关窗口的说明中会提供具体信息。

常规按钮

当鼠标指针悬停在相应按钮上时，工具提示会显示图标按钮的功能。

按钮	描述
OK	关闭窗口并应用设置
取消	关闭窗口，放弃更改
接受	无需关闭窗口即可应用设置
关闭	关闭窗口，无法永久保存设置
打开	打开选择窗口，加载文件或数据记录
保存	打开选择窗口，保存文件或数据记录
	打开选择对话框，如路径选择对话框
	打开打印窗口。在该窗口中，您可以打印出活动文档窗口的内容，或将其导出到文件中

表格

No.	Line	Calb. 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

Stocks... Calibration Table

在某些窗口中，数值可直接输入表格。根据输入类型的不同，表格单元格的行为类似于输入栏、选择列表或使用箭头键的限制数值范围输入栏。




- ▶ 要选择表格行，请单击表格第一列中灰色突出显示的相应行。然后，您可以使用键盘上的箭头按钮移动选择栏。
- ▶ 要更改列宽，请将鼠标指针移至两列之间的边界线上，直到出现双箭头。按下鼠标左键，调整栏宽。

输入字段还具有以下附加功能：

- ▶ F2 激活编辑模式。在该模式下，键盘上的箭头键用于逐个编辑字符。再次按下 F2 可以重新激活标准模式，使用光标键在单元格之间导航。
- ▶ 文本可复制到 Windows 剪贴板，然后使用编辑 | 拷贝 和 编辑 | 插入 菜单或 Ctrl+C 和 Ctrl+V 组合键再次粘贴。





表格中可访问的按钮

按钮	功能
添加	在列表末尾添加新的表格行。
插入	在所选行之前插入新的表格行。
删除	删除选定的表格行。

按钮	功能
	将选定的表格行向上移动一个位置。 备注：要移动表格行，必须完全选中该行。为此，请单击表格第一列中相关行的编号。
	将选定的表格行向下移动一个位置。
	将所选单元格的值转移到相同样品类型（样品、标准、质控等）的所有后续表格行中。如果选中 inc. 复选框（inc. 表示递增），该值将自动递增，例如，Sample001、Sample002 ...

图表

在图形中，单击鼠标右键即可打开上下文菜单。该菜单提供将图形或整个窗口复制到 Windows 剪贴板的选项。在多个图形窗口中，还可以访问其他图标按钮：

图标	功能
	激活变焦模式 激活按钮后，按住鼠标左键在要放大的图形区域周围拖动一个框，然后松开鼠标键。
	停用缩放模式并将图形恢复到原始比例
	激活文本模式 激活按钮后，按住鼠标左键在图形中拖动一个框架，然后输入文本。双击现有文本可打开编辑或删除文本的窗口。按住 Ctrl 和鼠标右键可移动现有文本。
	激活信号图或频谱图中的选择模式 单击鼠标左键可为测量点添加标签。

功能键

图标	功能
F1	打开上下文相关帮助
F2	编辑表格单元格
F5	开始打印屏幕图像
F6	测量序列的选定行（菜单项 常规分析 运行选中的序列行...）
F7	显示附加图形窗口（如信号曲线）
F8	关闭其他图形窗口
F10	在工作区菜单栏和结果窗口之间切换，通过键盘操作
F11	继续先前停止的测量（菜单项 常规分析 继续）
F12	启动或停止测量过程（菜单项 常规分析 运行序列... 和 常规分析 停止）

使用打印机

如果已经设置了 Windows 默认打印机，ASpect PQ 将使用该打印机。

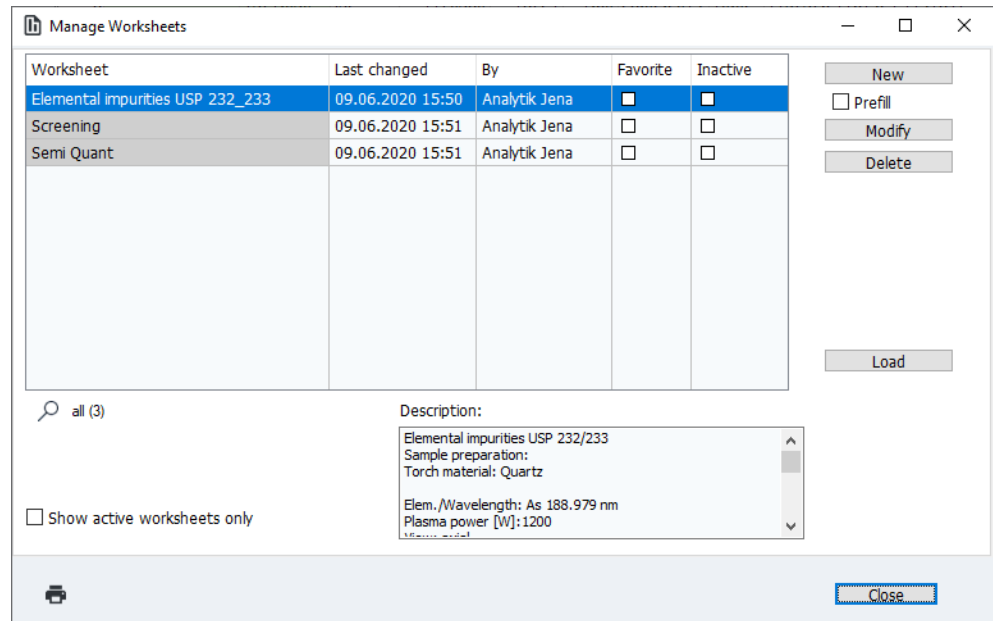
2 工作表

工作表是一个总结方法和顺序的文件夹。此外，样本 ID 文件和结果数据的设置也可存储在工作表中。如果已加载工作表，则可以直接启动测量程序。

您可以创建、修改、删除、停用或加载工作表。可在工作表窗口中找到相关函数。

单击图标栏中的  打开工作表窗口。

工作表窗口中的元素



按钮/选项	描述
新建	创建新工作表
预装填	已加载的序列和方法将被转移到工作表中。
修改	编辑选定的工作表
删除	删除选定的工作表
载入	加载选定的测量工作表
仅显示激活工作表	隐藏表中所有标记为不激活的工作表。
描述	所选工作表的描述 在创建工作表时存储这些信息。

该表显示了有关工作表的以下信息：

表列	描述
工作表	工作表名称
上次更改	最后一次更改工作表的日期
人员	此操作员进行了最后一次更改。操作员名字来自快速启动。
收藏	如果激活，则在快速启动窗口中的推荐方法选项卡上显示工作表。
不激活	如果激活，该工作表将不会显示在“快速启动”中。 但是，可以从工作表窗口加载标记为非活动的工作表。

另见

 从工作表开始 [▶ 9]

2.1 创建新工作表

您可以在创建新工作表窗口中创建工作表。

New Worksheet

Name: ★ Favorite
 Inactive

Method: 📁 🔍
08.06.2020 15:10

Sequence: 📁
09.06.2020 7:45

Sample ID: ▼

Folder: 📁

Results file: ▼

Folder: ▼

Name:

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

Elements:

Last changed: 19.08.2020 12:57



Description:

创建新工作表窗口中的元素

字段/选项	描述
名称	输入工作表名称
方法	工作表中存储的方法 单击 打开数据库窗口并选择方法。
序列	工作表中存储的序列 单击 打开数据库窗口并选择序列。
样品ID	您可以选择定义加载样本 ID 文件的设置： (无) ：不存储样本 ID 文件的任何设置。 打开包含样品ID文件的文件夹 ：加载工作表后，会打开一个文件夹，其中有样本 ID 文件。单击 并选择文件夹。 装载样品ID文件 ：加载工作表时，会自动加载样本 ID 文件。单击 并选择文件。您还可以使用 "*"和"?"通配符定义文件掩码。
结果文件	您还可以选择定义保存结果的设置： (无) 测量从开始窗口开始，在该窗口中指定结果文件的名称和存储位置。 总是创建新文件(附加时间戳) 序列的结果文件每次都保存在一个新文件中。文件名由固定部分（名称）和测量时间戳组成。选择保存文件的文件夹并输入名称。

字段/选项	描述
	新建并附加到文件 序列首次启动时将创建结果文件。以后每次启动序列时，结果都会附加到该文件中。
描述	描述 字段最初默认显示从方法中提取的一些分析参数。您可以自由编辑这些条目，以提供如何使用工作表的具体信息。条目会出现在快速启动和选定工作表的工作表窗口中。
收藏	单击星号，将工作表标记为喜欢： 黄色星号：喜欢 灰色星号：不喜欢
不激活	如果激活，该工作表将不会显示在“快速启动”中。 可以从工作表窗口加载标记为非活动的工作表。

指定工作表


- ▶ 要创建新工作表，请单击图标栏中的  打开工作表窗口，然后单击**新建**。或者单击工具栏中的 。
- ✓ 出现 **创建新工作表** 窗口。
- ▶ 选择方法和顺序。
备注：在序列中，您可以将更多方法作为操作加载。
- ▶ 您可以选择输入保存结果文件和使用样本 ID 文件的规范，并编辑说明（见下文）。
- ▶ 单击**OK** 退出窗口。
✓ 新工作表将显示在工作表窗口中，并可以加载。

另见

 启动测量程序 [▶ 58]


2.2 编辑工作表

您可以编辑现有工作表中的所有设置。

- ▶ 单击图标栏中的  打开工作表窗口。
- ▶ 选择工作表，然后单击 **修改**。
出现 **编辑工作表** 窗口。
- ▶ 更改方法与创建新工作表相同。

2.3 加载工作表

您可以在 **快速启动** 中选择工作表，或在工作表窗口中加载工作表：

- ▶ 单击图标栏中的  打开工作表窗口。
- ▶ 用鼠标单击表格中的工作表，然后单击**载入**。
✓ 工作表加载完毕，序列显示在主窗口中。

根据工作表的配置，您现在可以将与工作表一起加载的方法和序列链接到样本 ID 文件，或直接开始测量。




注意

加载工作表时，始终使用当前版本的方法和序列。

如果加载的方法或序列与工作表不同，结果文件的设置和工作表中的样本 ID 将被重置。

2.4 删除工作表

您可以删除不需要的工作表。


- ▶ 单击图标栏中的  打开工作表 窗口。
- ▶ 选择工作表，然后单击删除。
 - ✓ 确认查询后，工作表将被删除。

3 方法

方法存储分析所需的参数。

- 选择分析线
- 谱线分析参数
- 等离子体和光谱仪设置
- 样品供应类型
- 校准参数
- 统计分析
- 质量控制和保证的设置
- 测量输出的设置

可根据方法创建测量序列。序列定义了测量例程中处理采样和操作的顺序。保存的方法可用于不同序列的分析。

单击图标栏中的  打开方法窗口。显示上一个激活的方法。如果启动 ASpect PQ 后未加载方法，显示的窗口将包含默认设置或为空。

3.1 创建、保存和加载方法

方法保存在数据库中。如果更改现有方法，并以相同名称保存更改后的方法，软件会创建该方法的新版本。因此，现有方法不能被覆盖或无意删除。

可在数据 | 数据管理 窗口中找到导出、导入或删除方法的其他功能。

另见

 管理方法和序列 [▶ 108]

3.1.1 创建新方法

创建新方法时，可以使用默认设置、已保存方法的参数或当前方法参数。

▶ 选择文件 | 创建新方法 菜单项。

如果尚未激活方法，也可以点击 。

▶ 启用新键方法 窗口中三个选项之一：

- 基于默认参数: 打开方法窗口，仅使用校准和统计的默认设置。
- 基于当前参数: 打开方法窗口，其中包含当前设置的方法参数。
- 基于已存方法: 在 载入方法 数据库窗口中选择方法。

▶ 用OK确认您的选择。

✓ 出现带有所选默认设置的方法窗口。

▶ 在各个选项卡上指定方法，并进行必要的优化。

▶ 使用OK 或 接受 按钮启用设置方法参数。

✓ 现在，您可以保存方法或将其用于下一次分析。分析时，根据方法创建序列，并填写样本 ID 表。然后开始测量。

另见

 指定方法参数 [▶ 22]

3.1.2 保存方法

输入方法参数后，将方法保存到数据库。这样，您就可以在以后加载该方法，以便进一步测量或将其纳入工作表中。方法保存在**保存方法**窗口的数据库中。您可以输入其他数据，对方法进行分类，使其更容易查找。

保存方法 窗口中的元素

选项	描述
名称	方法名
分类	类别（三个字符），用于进一步识别和分类方法 此项为可选项。如果安装了 FDA 21 CFR 第 11 部分合规性模块，则可以使用所选类别将方法标记为已批准。您可以在用户管理设置中定义已批准方法的类别。
校正表	现有方法概述
分类	通过该组选项可以对方法列表进行排序。如果启用只有当前版本选项，则只会显示同名方法的最新版本。
用作常规方法	如果启用，该方法可在 常规分析 程序模式中使用。程序模式在 快速启动 窗口中选择。 如果安装了可选的“21 CFR 第 11 部分合规性 ASpect PQ”模块，则无法选择此选项。
预定义方法	保存方法的校准曲线 校准曲线可用于进一步分析。
描述	可选择输入关于方法的更多说明 点击 ... 打开预定义注释列表。您可以在 数据 默认描述 窗口中管理这些注释。

保存方法

- ▶ 在**方法**窗口中，单击**保存**或选择**文件 | 保存 | 方法**菜单项。
 - ✓ 出现**保存方法**窗口。
- ▶ 输入方法名称并选择其他参数。
 - ✓ 此方法将保存到数据库中。如果使用与现有方法相同的名称，则会在数据库中创建此方法的新版本。



注意

测量方法也会保存在测量结果文件中。打开结果文件后，可以从结果文件中还原方法。方法的其他管理功能可在**数据 | 数据管理**窗口中使用。


另见

- ▣ 配置用户管理的一般设置 [▶ 130]
- ▣ 快速启动 窗口 [▶ 7]
- ▣ 管理方法和序列 [▶ 108]


3.1.3 加载方法

您可以加载已保存的方法，并与序列一起启动测量程序。可从方法数据库或现有结果文件中加载方法参数。

从数据库加载

- ▶ 使用以下选项之一打开数据库窗口：
 - 在工具栏中，单击 **方法** 字段旁边的  文件夹图标。
 - 选择 **文件 | 载入方法** 菜单项。
 - 在方法 窗口中，单击 **打开**。
- ▶ 从列表中选择所需的方法。
- ▶ 在**分类** 字段中，您可以通过选择类别来限制显示的方法。如果要查看所有方法，请删除**分类** 字段中的条目。
- ▶ 如果同名方法只显示最新版本的方法，请选中**只有当前版本** 复选框。
- ▶ 用**OK** 退出**方法** 窗口。
 - ✓ 您已加载所需的方法。该方法显示在工具栏**方法** 下。

从结果文件加载

- 可以从主窗口显示的结果文件中提取此方法。
- ▶ 右键单击任何样本。
 - ▶ 在上下文菜单中选择**从结果中载入方法** 项。
 - ▶ 在查询是否应覆盖当前方法参数后，可单击  显示该方法。



3.2 指定方法参数

您可以在**方法** 窗口中指定分析的测量参数和结果评估参数。

单击  打开 **方法** 窗口。

窗口中的按钮 方法

窗口底部包含随时可用的按钮。

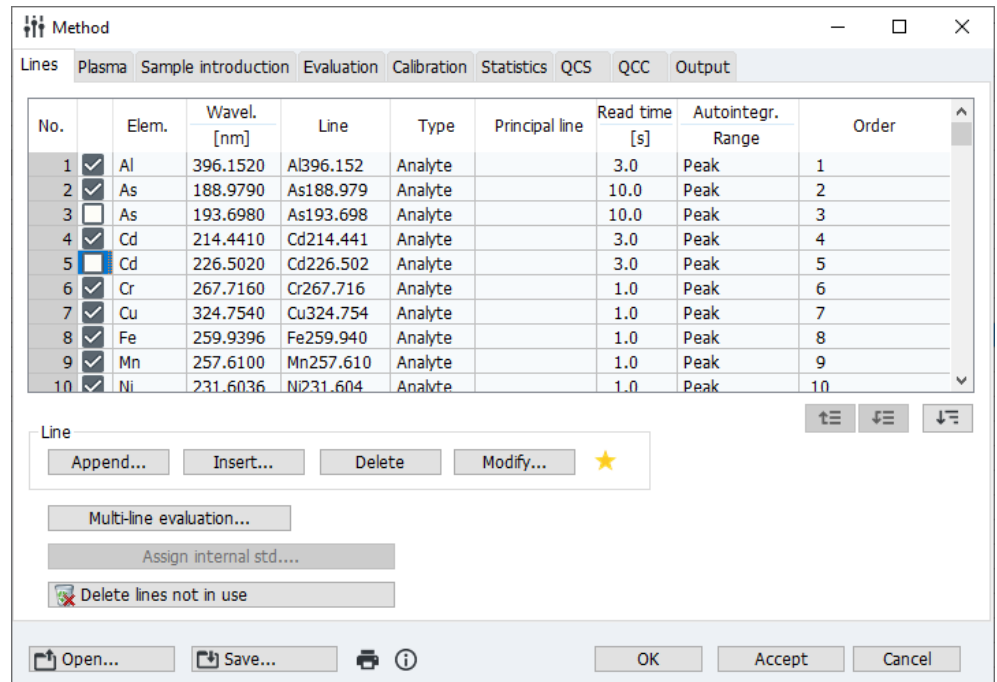
按钮	描述
打开	打开已保存的方法
保存	保存当前方法参数
	打印方法参数
	查看方法属性
OK	接受窗口中的参数并关闭窗口
接受	接受窗口中的参数，但窗口保持打开状态

按钮	描述
取消	不接受更改的参数并关闭窗口

3.2.1 指定分析线 (方法 | 谱线 窗口)





在方法 | 谱线 窗口中，选择测量的分析线。

方法 | 谱线 窗口



谱线表参数

表列	描述
序数	表格中选定谱线的顺序
<input type="checkbox"/> / <input checked="" type="checkbox"/>	<p>仅在方法开发 模式下可用 (不与 "21 CFR 第 11 部分合规性 ASpect PQ" 模块一起使用)</p> <p>这种标记简化了方法的开发过程，即在开始时测量元素的几条谱线，然后选择合适的谱线。如果以复选标记选中元素谱线，则分析时将使用并测量该元素谱线。以下分析不包括停用的谱线，也不对其进行测量。停用的谱线尚未从谱线表中明确删除。</p>
元素	待分析元素的元素图标
波长	分析线波长 (纳米)
分析线	<p>分析线名称</p> <p>在主设置中，谱线名称由元素符号和波长组成。名称可以自由编辑，但必须是唯一的。</p>
类型	在 分析线 (待分析行) 和 内标 (内部参考行) 之间进行选择
主分析线	<p>选择并显示与当前谱线同时测量的分析线 (同步测量)</p> <p>使用一个光谱仪设置测量相距较近的谱线，可以缩短测量时间。单击 合并谱线 显示可能的组合。</p>
读数时间	分析线的总测量时间
自动积分 范围	<p>自动选择积分时间，使 CCD 检测器获得最佳曝光，避免过度曝光</p> <p>曝光过度时，像素吸收的电荷会溢出到相邻像素，从而导致测量误差 (晕染效应)。要确定积分时间，必须选择所考虑的区域：</p> <p>光谱</p> <p>针对光谱范围内的最高峰优化积分时间。这是默认选项，可以获得安全的结果。</p>

表列	描述
	<p>峰高 根据分析峰值优化积分时间。选择该选项时，CCD 检测器的动态范围将以优化方式用于分析。但必须确保分析像素附近没有更高的峰值。在这种情况下，测量结果可能会因晕染效应而失真。</p> <p>检测器 根据探测器上的最高峰调整积分时间。在此选项中，检测器的任何区域都不会曝光过度；分析峰的像素有可能没有得到最佳曝光。</p>
顺序) !因为样品位置已预留.	<p>分析顺序 测量顺序可以自由定义。 备注： 高亮显示一个数字后，单击 ，数字将按升序分配到随后的行中。您可以用  和  在表中按所需的测量顺序排列选定的分析线（元素分析线）；在第一行的“顺序”中输入“1”，并用  将测量顺序按升序分配给所有其他分析线。</p>




谱线 组中的按钮

使用 **添加**、**插入** 和 **修改** 按钮在谱线表中添加其他分析线或编辑选定的谱线。单击其中一个按钮后，将打开**选择元素/分析线**窗口，您可以在此输入更多信息。使用 **删除** 按钮从方法中删除一个或多个选定的分析线。

附加按钮和复选框

按钮	描述
合并谱线	找到可通过一个光谱仪设置同时测量的分析线组合可以同时测量这些分析线。
指定内标	用内标合并和校正分析线
删除不用谱线	<p>仅在 方法开发 程序模式下可用（不与“21 CFR 第 11 部分合规性 ASpect PQ”模块一起使用） 删除方法列表中所有禁用行。 备注： 只有当行列表中的所有行都被使用时，方法才能作为常规方法保存和使用。</p>
优化测量顺序	<p>按波长和测量条件自动排序分析行，缩短总测量时间 如果启用复选框，则无法再对分析行进行手动排序。 备注： 测量时间取决于分析线的数量和分类以及测量条件。因此，为多条分析线选择相似的等离子体和传输光学参数也能缩短测量时间。</p>

另见

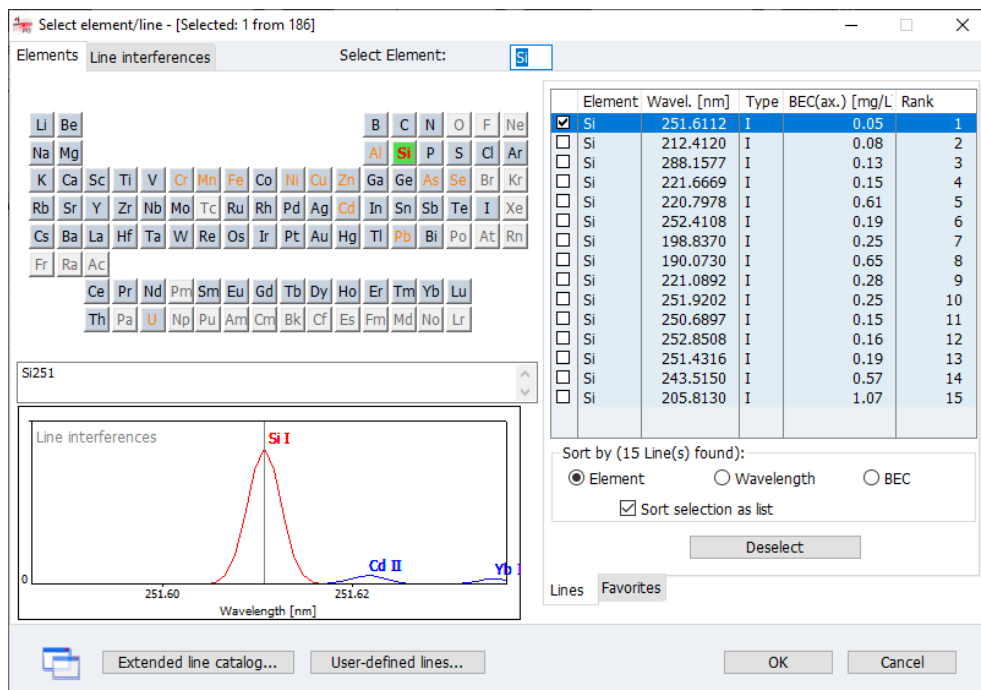
-  [同时测量谱线 \[▶ 26\]](#)
-  [常用控制元件 \[▶ 14\]](#)
-  [确定内部标准 \[▶ 28\]](#)

3.2.1.1 在谱线表中插入分析线

在**选择元素/分析线**窗口中选择分析线。

选择元素/分析线 窗口中的元素

元素 选项卡中的元素周期表包含可使用 ICP-OES 技术分析的所有元素（深灰色按钮和黑色元素符号）。“灰色”元素不可用。**谱线干扰** 选项卡显示所选谱线的已知可能干扰以及相对灵敏度。



推荐方法 电子表格包含推荐应用（关键词）的预选谱线。选择这些谱线时，优化后的方法参数会同时传输到方法中。您还可以在这些收藏夹中添加自己的谱线。

谱线 电子表格包含所有可选择的谱线，并包含以下信息：

表列	描述
元素	元素
波长	分析波长（纳米）
类型	雾化类型显示： I：原子线 II：离子线
BEC	分析线的典型 BEC 值 BEC 值（本底等效浓度）是分析物产生与本底等效强度的浓度。数值越低，灵敏度越高。 BEC 值是在以下条件下测定的： 轴向监控，输出功率 1200 W，等离子气体流量 12 L/min，辅助气体流量 0.5 L/min，雾化器气体流量 0.6 L/min。
顺序	分析线的推荐排序 对分析线的推荐既取决于灵敏度，也取决于其他元素的相邻谱线可能造成的干扰。排序越靠前，分析线取得好结果的可能性就越大。

使用**元素**、**波长**或**BEC**选项，您可以按化学符号、波长或 BEC 以升序排序。

如果启用了**分类排序**选项，则会按照列表的排序顺序(分类)将行插入方法的行表中。如果禁用该选项，则按选择的顺序插入谱线。

选择谱线

- ▶ 在**方法 | 谱线**窗口中，单击**添加**或**插入**。
✓ 出现**选择元素/分析线**窗口。
- ▶ 如果单击元素周期表中的一个深灰色元素符号，**谱线**和**推荐方法**表中只显示所选元素的谱线。
或者，在**选择元素**字段中输入元素符号。
清除**选择元素**字段，以显示行表中元素的完整列表。
- ▶ 在**推荐方法**电子表格中为您的应用程序选择行，或启用**谱线**表中所需谱线的复选框。

- ▶ 切换到**谱线干扰**选项卡，检查所选谱线是否存在已知干扰。
- ▶ 继续，直到为每种被分析物选择谱线。使用**OK**退出窗口。
 - ✓ 选定的谱线将被传送到**方法 | 谱线**窗口。

备注：

在使用各种方法时，为每种分析物选择多个谱线。

扩展谱线目录

安装完成后，分析线列表将包含预选的分析线。此外，还可以从扩展谱线目录中获取分析线。

- ▶ 在**选择元素/分析线 | 元素**窗口中，单击**扩展谱线目录**。
- ▶ 在列表中单击鼠标选择所需的谱线。
在单个谱线上再次单击可取消选择。单击**取消选择**删除所有选择。
- ▶ 单击**添加到分析谱线表**将选择传送到谱线列表。



注意

从扩展谱线目录中添加的谱线不能再从标准目录中删除。

创建和编辑自己的分析线

您可以创建自己的分析线并用于分析。

- ▶ 在**选择元素/分析线**窗口中，单击**自定义谱线**。
- ▶ 在**编辑谱线**窗口中，输入**元素**和**波长**的数据，并在列表框中选择**类型**。
- ▶ 使用**添加**将条目转移到您自己的谱线列表中。
- ▶ 单击**关闭**将您自己的谱线转到谱线列表。

可以编辑自己的谱线或从谱线列表中删除。

- ▶ 未来编辑您自己列表中的谱线，请在**编辑谱线**窗口的列表中单击鼠标选择该谱线。
输入新谱线数据，然后单击**修改**。
- ▶ 单击**删除**可以删除列表中的选定条目。

另见

📖 定义自己收藏的谱线 [▶ 27]

3.2.1.2 同时测量谱线

可同时测量使用一种光谱仪设置记录的光谱线，以缩短分析时间。使用**合并谱线**功能，您可以在当前方法中找到这些谱线，并将它们组合起来进行分析。

- ▶ 在**方法 | 谱线**窗口中，单击**合并谱线**。
出现同名窗口，显示可能的谱线组合概览。

窗口中的元素 合并谱线

可能的谱线组合列在**合并谱线**窗口中。条形图显示所选列表行的检测器上的谱线位置。

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

表格列/按钮	内容
复选框	如果启用，则在测量方法中同时测量相应的谱线组合。
主分析线	主分析线的测量参数用于测量谱线组合。 分析线 主谱线的谱线名 波长 主谱线波长（纳米）
添加谱线	分析线 待分析的附加谱线的谱线名 波长 待分析附加谱线的波长（纳米）
分析波长	测量波长（以 nm 为单位）（检测器行的中心位置）
状态	备注
没有合并线	删除所有选择 该方法中的任何谱线都不会一起测量。
用作测量	在谱线组合中互换主谱线和附加谱线

对于谱线组合，会自动确定主谱线和附加谱线。附加谱线采用主谱线的分析时间和等离子体参数。通过用作测量可以撤销此分配。


3.2.1.3 定义自己收藏的谱线

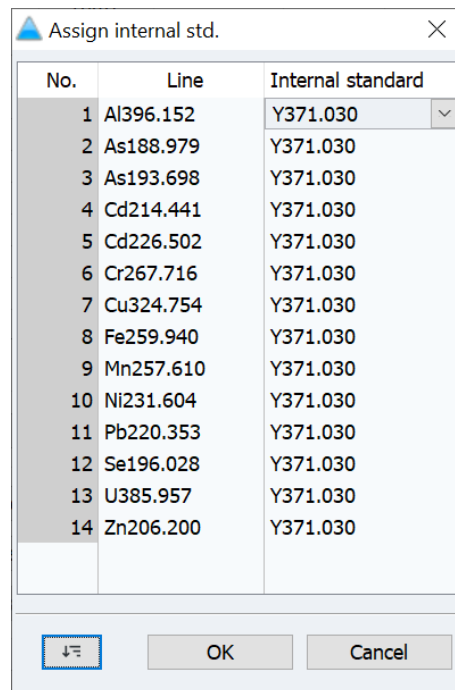
您可以将首选的分析线添加到收藏列表中，并在首选应用中添加备注。分析线的信息与所有谱线相关的方法参数一起保存在此条目中。在每次选择元素谱线时，都可以使用收藏列表。

- ▶ 在方法|谱线窗口的表格中标记该谱线，然后单击★。
- ▶ 在添加到推荐方法窗口中编辑谱线名。
- ▶ 在注释字段中，您可以输入该谱线的附加注释。
- ▶ 在注释列表选择一个或多个应用。
您可以用自己的条目来补充关键词列表。预设关键词以蓝色标出。
✓ 可在选择元素/分析线窗口中使用该谱线。

3.2.1.4 确定内部标准

内部标准主要用于校正非光谱干扰，例如由样品运输故障引起的干扰。您可以在方法|谱线窗口的谱线表中定义内部标准。

- ▶ 在谱线表中插入要用作内部标准的分析线，并在**类型**表列中选择**内标**选项。
- ▶ 单击**指定内标**。
出现**指定内标**窗口。
- ▶ 在表格中，将内标或标准分配到所需的分析线。为此，请单击**内标**列中的相应谱线，然后从列表中选择内标。
- ▶ 单击  将分析线的设置转移到表格中的所有后续谱线。
- ▶ 单击**OK**将设置应用于方法。



3.2.2 配置等离子体和传输光学器件的参数 (方法|等离子体窗口)

在方法|等离子体窗口中进行以下设置：

- 焰炬中等离子体的气体流量
- 选择和调整等离子体的监测方向

方法 | 等离子体 窗口中的元素

Method

Lines Plasma Sample introduction Evaluation Calibration Statistics QCS QCC Output

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	Al396.152	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	Cd226.502	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

Open... Save... OK Accept Cancel

表列	描述
序数	表格中选定谱线的顺序
分析线	分析线名称
功率	有效等离子功率 (瓦) 增加等离子体的功率可提高等离子体的稳定性, 例如在使用有机溶剂或含盐量较高的样品作为测量溶液时。同时, 较高的等离子功率也要求较高的等离子气体流量, 以防止火焰熔化或损坏。
等离子体气	等离子气体流量 (升/分钟) 等离子气体在火焰的内外石英管之间流动。它通过线圈的感应进入等离子状态, 同时冷却火焰的外管。较高的等离子气体流量可以延长火焰的使用寿命。
辅助气	辅助气体流量 (升/分钟) 辅助气体在石英内管和喷射器之间流动。它支持测量通道的前进, 并将等离子体推离注射器尖端。例如, 在测量含有有机溶剂或较高盐浓度的溶液时, 需要更高的辅助气体流量。
雾化气	雾化器气体流量 (升/分钟) 在雾化器中引入雾化气体。它将样品雾化, 并通过喷射室和喷射器送入等离子体。
观测方向	监测等离子体的方向 利用传输选项, 等离子体的发射辐射可以从两个方向耦合到光谱仪。可根据分析线选择最佳监测方向。 侧向 从线圈上边缘上方特定高度的侧面监测等离子体。 轴向 从顶部沿等离子体纵轴进行监测。 这两个监测方向也可能被削弱。这样可以避免检测器在高强度下溢出, 并扩大分析范围。
x-偏离值 和 y-偏离值	传输光学校正 (毫米) 通过沿测量通道移动光学镜片 (用于径向观测) 或从测量通道中心向外移动光学镜片 (用于径向和轴向观测), 可以扫描不同热度的区域, 并确定分析线的最佳雾化液温度。 等离子体 窗口可自动确定谱线的最佳值。



注意

在方法开发的第一阶段（选择合适的谱线），预设的等离子参数就足够了。在确定分析线、必要的背景校正和线性范围后，可以更改这些参数，以进一步优化方法参数。

使用氧气

对于特殊应用，如有机基质，可使用氧气作为附加气体。

- ▶ 在**氧气流量** 字段中设置气体流量。

另见

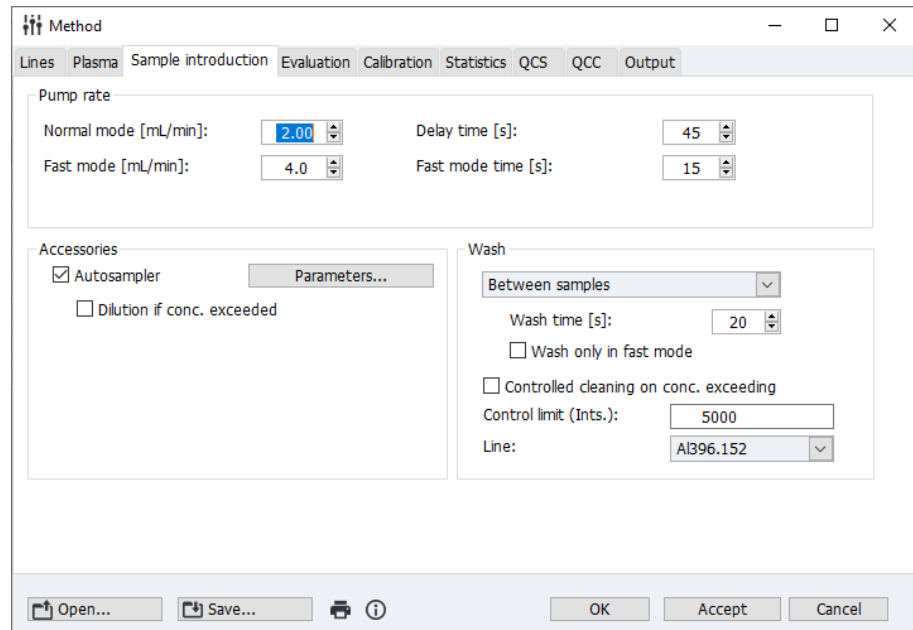
📖 调整和优化等离子体 [▶ 94]

3.2.3 样本引入的配置 (方法 | 样品传输 窗口)

在**方法 | 样品传输** 窗口中，您可以对分析仪进行以下设置：

- 分析仪泵的泵速
- 自动取样器的使用
- 清除选项

方法 | 样品传输 窗口



ICP-OES 设备的泵送时间

选项	描述
正常泵速	分析期间输送样品的正常泵速 该速度应确保样品的最佳雾化效果，并应基于所使用雾化器的建议泵速。
快泵	提高了在测量暂停期间进行清洗（使用清洗液）的速度，以及将样品输送到雾化器的速度 激活该速度可优化传输时间。但是，在测量过程中不能使用这种速度，因为这样将无法确保样品的均匀雾化。
延迟时间	从样品吸入开始到实际测量开始的时间 这段时间用于用样品清洗整个样品路径，包括喷枪，并确保稳定的雾化。 备注： 延迟时间还包括在 快泵时间 字段中输入的时间。
快泵时间	在延迟时间内以高泵速输送样品的时间



注意

在方法|样品传输 窗口中设置 ICP-OES 设备管泵的泵速。在自动进样器或 Cetac 采样器的自动进样器|技术参数 窗口中，可通过泵上方的旋转钮调节自动进样器输送洗涤液的泵速。

使用自动取样器

如果使用自动进样器进行分析，请启用自动进样器 选项。通过 参数 可以进入自动取样器设置。

清洗和控制清洗

在完成一个序列时，您可以设置每次样品测量后的清洗步骤。然后在自动测量过程中从自动进样器的清洗杯中提取清洗液。在手动测量过程中，会出现提供洗涤液的提示。

如果样品浓度超出校准曲线测量范围 10 % 以上，则可清洗样品通道和喷灯，以清除上次测量的污染。在清洗过程中，会测量强度以检查清洗效果，并继续清洗，直到达到控制限值。建议在测量高浓度样品后使用自动清洁控制装置。

选项	描述
清洗	关 洗涤模式已关闭。不自动清洗。
每个样品之间	每次采样后进行清洗，但不在统计序列内进行清洗
清洗时间	在此期间，要清洗从样品到焊枪的路径。
仅在快速模式下清洗	清洗步骤仅在快速模式下进行。 如果禁用该选项，则在输入的快速模式时间 (快泵时间) 内以快速模式进行初始洗涤，在剩余的洗涤时间内以正常模式进行洗涤。
控制清洗	如果启用，超过浓度时会自动进行受控清洁
控制限值 (强度)	在测量下一个溶液之前，洗涤过程中必须达到的信号电平值
分析线	用作控制谱线的元素谱线

3.2.4 评估峰值(方法|评估 窗口)

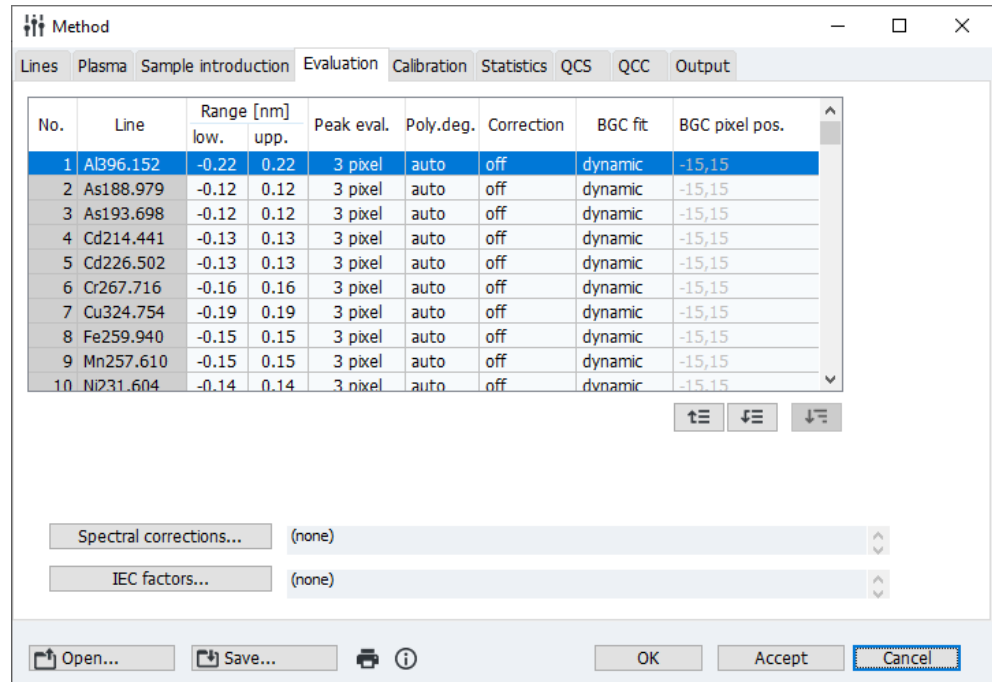
在方法|评估 窗口中，您可以定义峰值评估参数。



注意

在方法开发过程中，您可以在编辑谱图|评估 窗口中确定各分析线背景校正的最佳设置，然后将其转移到方法中。

方法 | 评估 窗口



表列	描述
序数	表格中选定谱线的顺序
分析线	分析线名称
范围	<p>下限 光谱分析波长范围相对于测量波长的下限</p> <p>上限 相对于测量波长的波长范围上限</p>
BGC方程	<p>为静态背景校正选择回归图的多项式系数</p> <p>可选择 0、1、2 和 3 阶多项式阶数，或自动搜索多项式阶数 (自动选项)。</p>
峰值评估	<p>选择峰值评估</p> <p>像素 用于分析强度并最终生成测量值的像素数。 对评估像素的强度进行累加。通过这种方式，可以减少峰值位置波动带来的分析误差。 建议的评估像素数：3</p> <p>峰高 峰值最大值的内插法</p> <p>自定义 自由选择评估像素，例如，用于评估多点 样本条目：50、120-130 是像素 50 和 120 至 130 测量值的总和</p>
校正	<p>光谱校正算法 (见下文)。</p> <p>关 不应用光谱校正</p> <p>LSM 用最小二乘法模型进行光谱校正</p> <p>IEC 使用元素间校正进行光谱校正</p>
BGC模式	<p>调整像素以校正背景</p> <p>关 不应用背景校正</p>

表列	描述
	动态 用于背景校正的像素由软件自动查找。 静态 用户在 BGC像素位置 列中指定用于背景校正的像素。
BGC像素位置	像素相对于测量像素的位置，用于背景校正的静态适应输入用于背景校正的像素编号。

按钮

按钮	描述
光谱校正	指定分析线光谱校正模型
IEC因子	为分析谱线指定元素间校正

另见

📖 评估峰值并确定背景校正 - 编辑谱图 | 处理 窗口 [▶ 73]

3.2.4.1 用最小二乘法模型进行频谱校正

通过光谱校正计算，可以消除因分析线与矩阵元素谱线重叠而产生的结构性背景辐射。一个先决条件是，对于各自的分析谱线，可能的干扰光谱已被合并到一个校正模型中。

- ▶ 在方法 | 评估 窗口中单击**光谱校正** 并为每一谱线分别配置合适的校正模型。
 - ✓ 在校正 栏中，用**LSM** 标识已指定校正模型的谱线。

另见

📖 消除光谱干扰 - 编辑谱图 | 光谱校正 窗口 [▶ 75]

3.2.4.2 元素间校正

通过元素间校正，可以校正直接谱线重叠。条件是干扰物的额外无干扰波长。

使用单元素溶液（IEC 溶液）可确定干扰物两条谱线（重叠分析线和无干扰谱线）的比率。商数（IEC 因子）用于随后的样品测量，从分析线中减去干扰物的表现强度或浓度。

指定IEC元素 窗口中的元素

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

控制元素	说明
IEC溶液	输入用于元素间校正的 IEC 元素溶液和空白值的名称、浓度、单位和采样器位置
添加	在列表末尾添加新行
插入	在选定的列表位置插入新行
删除	删除所选定
干扰谱线校正	强度 通过减去强度进行校正 浓度 通过减去表观浓度进行校正
从结果数据中提取因子	从加载的结果文件中提取计算出的 IEC 因子

表格内容

表列	描述
指定IEC溶液	有干扰的分析线名称
干扰谱线	干扰谱线名称
IEC溶液	含有干扰物的单元素溶液名称。通过IEC溶液 按钮指定 IEC 溶液。
IEC空白	从干扰物强度或浓度中减去的白平衡值溶液名称。通过IEC溶液 按钮指定空白溶液。
IEC因子	IEC 校正系数 计算系数以灰色标出。
手动	如果启用，可手动输入 IEC 因子。无需测量溶液。

指定元素间校正

- ▶ 在方法|评估 窗口中，单击**IEC因子**。
 - ✓ 出现**指定IEC元素** 窗口。
- ▶ 首先指定 IEC 溶液。每个干扰物都需要一个空白值和一个 IEC 溶液（单元素溶液）。
 - 单击**IEC溶液**。

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

Add blank
Add IEC solution
Delete

OK
Cancel

- 在**分析谱线** 窗口的表格中，单击**添加空白** 和**添加IEC溶液**为每个干扰物添加空白值和 IEC 溶液。
- 在相应的表格单元格中输入每个溶液的名称。
- 对于 IEC 溶液，将 IEC 溶液中干扰物的浓度输入**浓度** 列。
- 使用**OK** 确认输入。
- ▶ 回到**指定IEC元素** 窗口，在**指定IEC溶液** 表格列中选择被分析物的干扰谱线。
- ▶ 在**干扰谱线** 列中选择干扰物的无干扰谱线。
- ▶ 在**IEC溶液** 和**IEC空白** 列中配置相应的单一元素溶液和空白溶液。

- ▶ 根据**强度** 或 **表观浓度** 选择内部元素校正类型。
- ▶ 使用**OK** 确认输入。
 - ✓ 在**方法|评估** 窗口的谱线表中，使用**IEC** 在**校正** 列中标识指定了元素内校正的谱线。

IEC 溶液的测量必须按照校准标准的测量或校准计算的顺序进行。

手动输入系数

无需通过测量单元素溶液来确定元素间校正因子，可直接将已知因子输入表中。

- ▶ 输入**指定IEC溶液** 和 **干扰谱线** 后，选中**手动** 复选框。
- ▶ 在**IEC因子** 列中输入已计算出的系数。

3.2.5 输入校准参数 (方法|校正 窗口)

在**方法|校正** 窗口中，您可以定义校准和空白值校正类型。一般来说，校准时会使用多种元素标准，您可以将其输入为储备标准。

方法|校正 窗口

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

选择校准方法

从**校正模式** 列表中选择方法：

校准方法	描述
无校正	抽样结果完全以强度表示。这些测量无需校准。不需要在 校正 选项卡上输入其他条目。从逻辑上讲，序列列表应该只包含样本。
标准校正	校准使用已知浓度的分析物样品（标准品）。根据此校准值测量未知浓度的样品。
标准加入法	在未知样品中加入不同数量的已知样品，然后测量所得物质。通过比较得出分析物的浓度。
标准加入校正法	校准曲线是通过标准添加法建立的，通过它可以确定其他浓度。同时，通过这种方法还可以测出第一个样品的浓度。

标准制备

选项	描述
手动	校准标准溶液由人工配制。
自动进样器制备	仅在使用带自动稀释功能的 Cetac SDXHPLD 自动取样器时使用 标准品是在自动进样器的涡旋器（混合容器）中稀释后制备的。

空白校正

标准添加方法和添加校准需要进行空白值校正。从空白扣除列表中选择方法：


校正	描述
强度扣除	在每个标准添加过程中，都要对空白值进行测量，并从所有测量值中减去测得的强度值，然后再计算回归线。这种方法已经沿用了很长时间，但在许多实际样品中，这种方法会导致错误的结果。
浓度扣除	首先，使用与样品相同的添加浓度对空白溶液进行单独的标准添加。由此得出的浓度会自动减去通过标准添加法确定的所有其他浓度（浓度 2）。

特定谱线校准参数

在表中设置特定谱线参数：

表列	描述
序数	表格中选定谱线的顺序
分析线	分析线名称
校正方程	仅用于使用标准方法进行校准 线性 校准函数的线性级数 $y = a + bx$ 非线性比例方程 有理函数描述的校准函数的非线性级数 $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$ 非线性二次方程 二次函数描述的校准函数的非线性级数 $y = a + bx + cx^2$ 自动选择 为校准计算线性和非线性函数。比较残差平方和（曼德尔检验）。如果非线性函数的总和明显低于线性函数的总和，则将选择非线性校准曲线。否则，将使用线性校准曲线。在选项 校正 窗口中选择非线性函数。默认设置为断裂比功能。 备注： 标准添加法和添加校准只允许线性曲线递增。
截距	设为零 校准曲线正好截取测量的零值点。 计算 与其他校准点一样，零值也包含在计算中。
权重	没有 以相同方式对待所有校准点。 1/conc 更多考虑浓度较小的校准点。 1/SD 在标准的多次重复测量中，更多考虑偏差较小的点（要求：已激活平均值统计选项）。 1/(SD*conc) 计算方法的组合：1/conc 和 1/SD

表列	描述
检查	<p>该软件可根据人工选择的统计确定性计算出的预测范围，自动检查已确定的校准曲线。</p> <p>没有 所有已测量和未删除的校准点都用于计算曲线。校准点既没有标记，也没有消除。</p> <p>剔除异常值 如果校准点超出计算预测范围，则通过 F 检验（检验排除某个点是否会显著改善残余散射）来排除异常值：</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 对超出预测范围最远的校准点进行 F 检验。 如果排除该点并不能明显改善残余散射，则纳入该点，不再进一步优化校准曲线。 ▪ 如果排除该点后校准结果有明显改善，则将该校准点定义为离群点（在表格中用"!"标出，在图表中用红色标出），并在排除该点的情况下重新计算校准结果。 ▪ 对现在偏离预测范围最大的点再次进行 F 检验。重复这一过程，直到去除所有异常值。 ▪ 所有超出新预测范围且未作为异常值消除的校准点都会在表中用"?"标出，并在图中用蓝色标出。
单位	为每种元素分别输入浓度单位。

使用  将活动单元格的值转移到表格列中的所有后续单元格。使用 **校正表格** 按钮打开用于输入标准浓度的表格。

另见

 分析序列选项 [▶ 119]

3.2.5.1 指定标准储备液

如果使用标准储备液，则可以输入各个标准的稀释因子，而不是浓度。为此，您必须在完成校准表之前指定储备标准物质，而且可以使用多种不同元素和浓度的储备标准物质。

- ▶ 在方法 | 校正窗口中，单击**储备液**。
 - ✓ **储备液标准**窗口随即打开。
- ▶ 单击**新建** 或 **插入** 在储备清单中添加新谱线。
最大标准储备液数量：20
- ▶ 对于来自**储备液数据库** 选项，在列表中选择股票名称。在**数据 | 标准储备液/QC 样品** 窗口中管理储备数据库。
- ▶ 如果不使用数据库中的储备，请选择**手动输入** 选项。
- ▶ 返回**储备液标准** 窗口，直接在表格中输入储备数据：

表列	描述
名称	标准名称
元素和浓度	<p>元素和相应的标准浓度 使用浓度，可以打开一个列表，用于输入浓度。 或者直接在该行输入以下输入格式的值，格式为 元素标志-空格-浓度，例如，镍的浓度为 0.5 mg/L：Ni 0.5 其他元素及其浓度用分号分隔。输入格式示例见储备清单。</p>
单位	标准中元素的浓度单位。

另见

 管理储备和质控样本数据库 [▶ 115]

3.2.5.2 输入校准表

在校准表中输入标准数据。

校正表格窗口

Calibration Table

Number of standards
 Calib-Zero standards: 1
 Calibration standards: 2

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

Name	Unit	Cal-Zero1	Cal-Std1	Cal-Std2
Postion		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
Ti190.796	µg/L	0	20	60
Au242.795	µg/L	0	250	750

Shift selected column: [Left] [Right] [Inc] [Dec] inc.

OK

▶ 在方法|校正窗口中，单击校正表格。

▶ 首先在输入框中输入标准数。根据所选的校准方法，必须选择不同的标准。

对于标准方法，必须输入校准标准数(校正法标准)和校准零点标准数(校正零点)。例如，如果要分析的元素存在于不同溶剂中，则可输入多个零标准。在这种情况下，各元素谱线的浓度必须设置为“0”，其他列保持空白。

对于标准加入法和标准加入校正法，每次都必须输入加入法标准的编号。

▶ 使用连接的稀释系统制备标准物质时，必须在储备液行中选择所用的标准物质，并在稀释因子行中为每个校准标准物质选择稀释因子。
 可以选择以下稀释因子：1, 2, 5, 10, 15, 20, 25, 50, 75, 100, 200, 250, 500, 1000, 1500, 2000, 2500, 5000。稀释因子的数量受自动进样器|自动稀释窗口中的范围设置限制。对于稀释因子1...100，稀释一步完成，对于更高稀释因子，稀释分两步完成。

✓ 选择标准储备液和稀释因子后，软件会自动计算每个校准标准和每个分析线的浓度。

▶ 选中灵活选择复选框后，可以从表中手动删除不需要测量的标准浓度。要重新激活已删除的条目，请在相关字段中输入加号(+)，然后用回车键确认或用鼠标移动到下一个单元格。

▶ 如果手动制备校准标准液，也可以通过选择标准储备液并输入稀释因子，让软件计算校准标准液的浓度。
 或者，为表格中的每种标准物质输入每条分析线的浓度。

▶ 对于手动制备的标准液，可在位置行中定义标准液在自动进样器中的位置。如果不使用自动进样器，则不考虑这一行中的条目。
 对于具有稀释功能的自动进样器来说，浆料的位置取自浆料数据库。自动取样器位置的分配可在序列中输入或更改。

- ▶ 对于指定为序列操作或 QC 操作序列的重新校准，必须在 **重新校正** 行中至少选择一个校准零标准和一个校准标准或至少两个校准标准。如果为一条谱线选择了两个以上的重新校准标准，则使用最低和最高的重新校准标准。

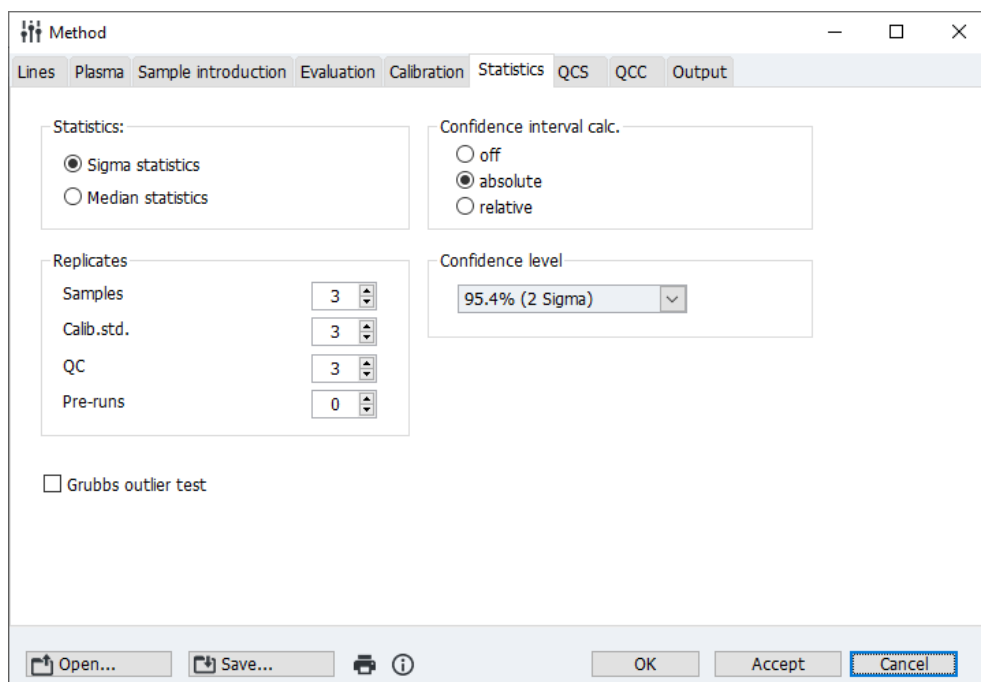
另见

- 📖 指定标准储备液 [▶ 37]
- 📖 稀释功能 [▶ 100]

3.2.6 指定统计分析 (方法 | 统计 窗口)

在 **方法 | 统计** 窗口中，选择要应用于校准和样本测量的统计方法。这些设置与所选的校准方法无关，并且在每次更改校准方法时保持不变。

方法 | 统计 窗口



统计类型

选项	描述
Sigma统计	<p>计算平均值和标准偏差</p> <p>根据算术平均值进行误差统计： 盲法循环后，要对样品进行多次测量。根据测量结果，计算出算术平均值、标准偏差和相对标准偏差。</p>
中值统计	<p>计算中位数和范围 (R)。</p> <p>根据中值法进行误差统计： 在空白循环后重复测量样品。测量值按大小排序。显示的中位数为：</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 如果测量周期数为奇数，则为排序列表中间的值。 ▪ 如果测量周期数为偶数，则取排序列表中间两个测量值的平均值。 <p>由于最小和最大的单个测量值不会影响测量结果，因此中值统计适用于消除异常值。</p>

重复测量次数

选项	描述
样品	每个样品的重复测量次数
标准	每个校准样本的重复测量次数

选项	描述
QC样品	每次质量控制测量的重复测量次数
预运行	空白测量重复次数 空白测量值是统计序列之前的样本测量值，在计算测量结果时不予考虑。

格拉布斯离群值检验

对于平均值统计，每个样本至少有 3 次重复测量

状态	描述
已禁用	包括统计序列的所有值，用于计算平均值。
已启用	异常值被剔除，不用于统计计算。以这种方式确定的平均值在输出表中以"! "标记。

置信区间计算

置信区间的计算基于所选的统计确定性（见下文）。在计算置信区间时，样本测量误差，特别是校准误差都会包括在内，因此即使统计功能已停用，也会显示一个值。

设置	描述
关	未计算置信区间
绝对	以绝对值（浓度单位）显示置信区间
相对	以相对值（浓度值的百分比）显示置信区间

置信水平

置信水平（可在 68.3 ...99.9%之间选择）计算样品的置信区间和校准曲线的预测范围。

另见

 指定质量控制 (方法|QCS 窗口) [▶ 40]

3.2.7 指定质量控制 (方法|QCS 窗口)

在方法|QCS 窗口中，可以指定质量控制 (QC) 样品。在此过程中，在预定点插入带样品的控制测量，以提供已知的测量结果。它要么是绝对值（吸光度/浓度），要么是与前一个已知样品的浓度差。您可以为质量控制定义不同的样本类型。

控制测量的结果可自动记录在质量控制 (QC) 图表上。质量控制图系统用于长期质量监测。质控图与测量方法一起保存，并在每次测量时继续使用。

No.	Line	Exp. conc. incr	lower deviat. [%]	upper deviat. [%]	QC chart	React.!
1	Al396.152	9.5	10	10	-	-
2	As188.979	9.5	10	10	-	-
3	As193.698	9.5	10	10	-	-
4	Cd214.441	9.5	10	10	-	-
5	Cd226.502	9.5	10	10	-	-
6	Cr267.716	9.5	10	10	-	-
7	Cu324.754	9.5	10	10	-	-
8	Fe259.940	9.5	10	10	-	-
9	Mn257.610	9.5	10	10	-	-
10	Ni231.604	9.5	10	10	-	-

方法 | QCS 窗口中的元素

元素	描述
类型	该质控样本显示在谱线表格中。您可以在这里编辑质控样本的参数。
名称	显示的质控样本名称
反应	如果质控样本的结果超出或低于规定限值，该怎么办。
新建/修改	定义新的质控样本或修改现有的质控样本
删除	删除显示的质控样本
空白扣除	除质控标准值和质控空白值外，还可对所有质控样本激活空白值校正功能
单位	列表框，用于选择相应的浓度单位。
QC样品浏览	打开一个列表，其中包含所有质控样本的谱线特定参数
谱线表	表格显示在类型列表框中所选质控样本的参数

质控样本类型

您可以指定以下质控样本类型：

选项	描述
QC样品	<p>将样本定义为质控样本</p> <p>可从数据库加载或直接输入质控样本的浓度。</p> <p>来自数据库 在相邻的列表框中选择相关的质控样本。您可以在方法 QCS 窗口中管理质控样本数据库。</p> <p>手动输入 直接在表格中输入质控样本的浓度</p> <p>质控样本的最大数量：50</p>
QC标准	<p>将标准品定义为质控样本</p> <p>校准表中定义的任何标准都可用作质控标准。</p> <p>可能的质控标准品数量 = 校准表中的标准品数量（最多 65 个）</p>
QC空白	将空白样本定义为质控样本

选项	描述
QC加标	<p>将加标样品定义为质控样本</p> <p>使用该选项，可以检查一个或多个样品中定义浓度添加的测量结果。为此，应在样品表中的任何样品之后定义质控储备样品（质控储备样品 = 样品 + 添加已知浓度的溶液）。测量后，将浓度差值（样品和质控库存样品的浓度 1）与此处指定的预期浓度增加值（期望浓度增加）进行比较，并计算回收率。</p>

如果没有经过认证的对照样本，也可使用重复测定法进行质量控制：

选项	描述
QC趋势	<p>当对照样品首次出现在分析序列中时，测量的浓度值将被保存。当下一次出现质控样本时，就会形成浓度差并进行评估。建议在样品系列的开始和结束时测量这些控制样品。</p>
QC基体	<p>在制备样品之前，要对待分析的样品进行分割。两部分样品分别进行所有的样品制备步骤。它们分别作为 QC Trend 和 QC Matrix 放在自动进样器托盘上。评估所确定的浓度之间的差异。</p>

超出误差限值时的程序

对于质控样本类型，您可以选择在超出误差限时要遵循的不同程序：

选项	描述
QC样品	<p>标记</p> <p>测量值已标记在样本表中。测量程序继续进行下一个采样。</p>
QC标准	<p>重校 + 继续</p> <p>运行重新校准。然后再次测量质控样本。如果质控样本在量程范围内，则继续测量下一个样品，否则停止测量程序。</p> <p>校正 + 继续</p> <p>运行新的校准。然后再次测量质控样本。如果质控样本在量程范围内，则继续测量下一个样品，否则停止测量程序。</p> <p>重校 + 返回</p> <p>运行重新校准。然后再次测量质控样本。如果质控样本超出量程，测量程序将停止。如果在范围之内，则将重新测量上次质控样本或上次（重新）校准之后测量的所有样品。如果质控样本再次超出允许误差范围，测量程序将被停止。</p> <p>校正 + 返回</p> <p>运行新的校准。然后再次测量质控样本。如果质控样本超出量程，测量程序将停止。如果在范围之内，则将重新测量上次质控样本或上次（重新）校准之后测量的所有样品。如果质控样本再次超出允许误差范围，测量程序将被停止。</p> <p>下一个方法</p> <p>如果序列中包含另一种方法，则取消当前测量程序并启动下一种方法的测量程序。</p> <p>停止</p> <p>当前测量程序已中止。</p>
QC加标	<p>标记</p> <p>重校 + 继续</p> <p>校正 + 继续</p> <p>下一个方法</p> <p>停止</p>
QC空白	<p>标记</p> <p>下一个方法</p> <p>停止</p>

选项	描述
QC趋势	无反应
QC基体	

质控样本类型的特定谱线参数 在谱线表中输入质控样本类型的特定谱线参数。

选项	描述
分析线	分析线名称
期望浓度	对于QC样品和QC标准 质控样本中的预期浓度
期望浓度增加	对于QC加标 从样品到加标样品的预期浓度增加值 输入与储备液体积和储备液浓度相对应的数值。
期望强度	对于QC空白 质控空白值中的预期强度
上限	误差下限范围（百分比）。
下限	误差上限范围（百分比）。
QC图表	如果标记为"+", 则该谱线的质量控制结果将显示在结果列表的QC选项卡上。
响应	如果超出误差范围限制, 则应使用此程序。如果多个谱线都标有"+", 则只需其中一个谱线超出误差限值即可触发反应（OR逻辑）。
单位	对于QC标准 预期浓度单位

输入质控样本的参数

- ▶ 单击**新建/修改**为质控样本类型创建新参数集或编辑选定的样品类型。
 - ✓ **添加/修改QC样品类型**窗口随即打开。
- ▶ 在**类型**列表中选择样本类型。
- ▶ 仅限质控样本：如果定义了多个质控样本，请在列表框中指定一个连续的编号。
- ▶ 只有质控标准：根据校准表中的顺序选择列表框中的标准件编号。
- ▶ 在表中输入特定谱线参数。
 - ✓ 在检测方法中定义了质控样本。

另见

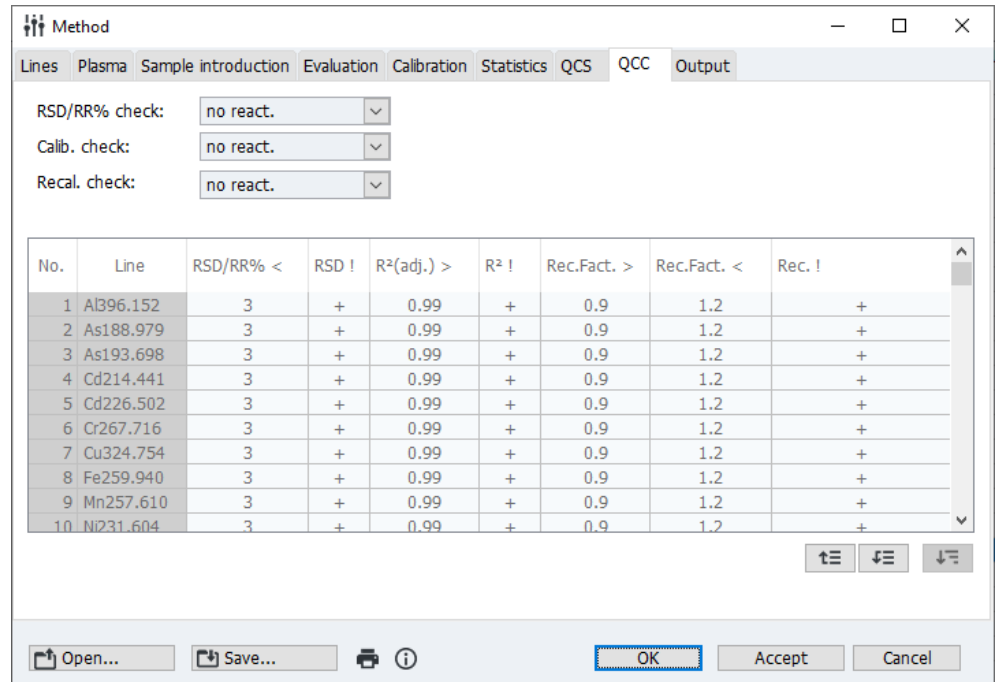
管理储备和质控样本数据库 [▶ 115]

3.2.8 指定质量控制 (方法|QCC 窗口)

在**方法|QCC**窗口中，指定序列期间的质量控制参数：

- 相对标准偏差（平均值统计）或相对范围（中位数统计）
- 校准控制
- 重新校准控制
- 超出误差限值时的程序

您可以同时选择具有不同反应的各种控制选项。



质量控制类型

控制类型	描述
RSD/RR%检查	控制相对标准偏差或相对范围
校正检查	校准测定系数的控制
重校检查	控制重新校准系数

超出错误限制时的反应

反应	描述
没有	不执行相关控制
标记	如果超出误差限值，则在样本表中标记相应的样本、校准或重新校准
重复 + 继续	只有在 RSD/RR%检查 在测量下一个样品之前，如果超过了系列精度限值，则重复测量相应的样品
校正 + 继续	仅限 校正检查 和 重校检查 如果超出校准或重新校准因子的误差限值，则运行新校准。然后继续测量下一个样本
下一个方法	仅限 校正检查 和 重校检查 如果超出误差限值，当前测量程序将被终止，并启动方法中下一元素谱线的测量程序。只有在方法中指定了一个以上的元素谱线时，才能选择该选项。
停止	仅限 校正检查 和 重校检查 如果超出误差限值，则停止当前运行方法的测量。

针对谱线的质量检查参数

在表中输入各种质量检查的谱线特定参数。您可以为每条分析线定义是否进行检查。如果一条或多条受控线路超出误差限值，就会触发上述选择的反应。

质量控制	参数/含义
RSD/RR%检查	RSD/RR% < 如果相对标准偏差或相对范围大于或等于指定值，系统将使用定义的程序作出响应。 RSD! 对于标有 "+" 的行，将检查 RSD% 或 RR%。
校正检查	R2相关系数 回归的决定系数R2相关系数 必须大于或等于指定值。否则，系统将按所选的方式响应。 R²! 对于标有 "+" 的行，将检查R2相关系数。
重校检查	重校因子> 重新校准因子的上限 重校因子< 重新校准因子的下限 如果校准因子超出了这些指定限值，所选响应将被释放。 重校! 对于标有 "+" 的行，将检查重新校准因子。

另见

指定统计分析 (方法 | 统计 窗口) [▶ 39]

3.2.9 指定结果的输出格式 (方法 | 输出 窗口)

在方法 | 输出 窗口中，您可以指定在屏幕上和打印输出上显示结果的小数位数、其他输出类型以及在打印输出上分析多个元素的行顺序。

在下表中，定义强度和浓度值显示和打印输出的小数点位数，以及分析线在打印输出中的显示顺序。

方法 | 输出 窗口中的元素

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

元素	描述
有效数字 强度	强度值的有效数字个数
小数点位数 浓度	浓度值的小数点位数
有效数字 浓度	浓度值的有效数字个数
100%回归	输出浓度浓度 2 被转换为相对于总浓度的百分比值。 总浓度是标有“+”线的浓度总和。
氧化物因子	如果选择了氧化物，输出浓度浓度 2 将转换为氧化物的浓度/含量。氧化物系数显示在括号中，例如，通过乘以 1.6681 转换为 TiO ₂ 。
打印顺序	报告中各谱线的显示顺序

4 序列

序列定义了测量例程中处理采样和操作的顺序。一些样品描述数据，如样品名称和在样品架上的位置，也可以直接输入。不过，为了永久保存，样本描述数据必须保存为样本信息文件。

序列以加载方法为基础，其中包含校准类型、统计分析、质量控制等信息。

4.1 创建、保存和打开序列


与方法一样，序列也会保存到数据库中。您可以创建、修改、保存和加载序列。您可以在**数据 | 数据管理**窗口中找到管理序列的其他功能。

另见

 管理方法和序列 [▶ 108]

4.1.1 创建新序列

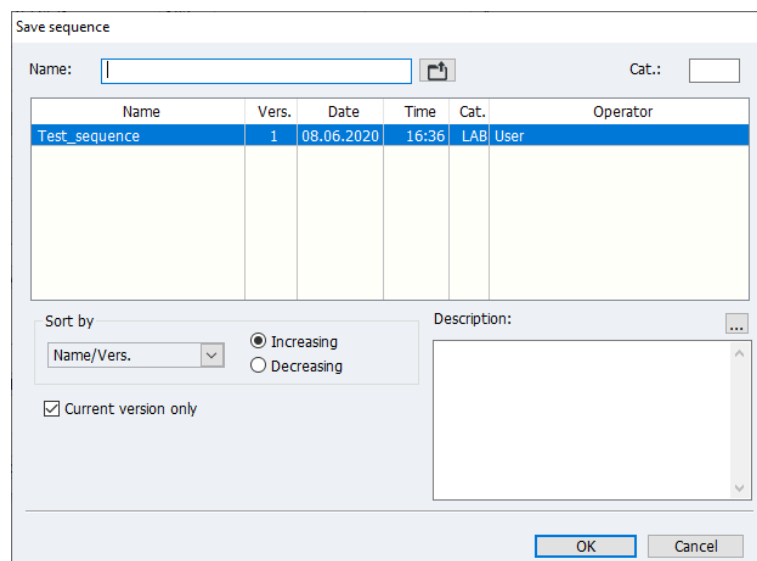
首先创建或加载一个方法。您可以根据此方法指定新的样本测量和操作序列。

- ▶ 选择**文件 | 新建序列**菜单项。
- ▶ 或者，通过单击或使用**方法开发 | 序列**菜单项打开包含当前序列参数的窗口。
 - ✓ 出现**序列**窗口。现在您可以定义测量值和连续操作。


4.1.2 保存序列

输入测量值和操作后，将序列保存到**保存序列**窗口中的数据库。这样您就可以在以后的测量中重复使用该序列。保存序列时，您可以添加其他数据，对序列进行分类，使其更容易查找。

保存序列 窗口中的元素



Save sequence

Name:  Cat.:


Name	Vers.	Date	Time	Cat.	Operator
Test_sequence	1	08.06.2020	16:36	LAB	User

Sort by: Increasing Decreasing

Current version only

Description:

OK Cancel

选项	描述
名称	序列名称
分类	类别（三个字符），用于进一步识别和排序序列 此项为可选项。
表	现有序列概览
分类	该组中的选项允许您对序列列表进行排序。 如果启用只有 当前版本 选项，则同名序列将只显示最新版本。
描述	可选择输入序列的进一步解释 单击  打开预定义注释列表。您可以在 数据 默认描述 窗口中管理这些注释。

保存序列


- ▶ 在**序列**窗口中，单击**保存**或选择**文件 | 保存 | 序列**菜单项。
- ▶ 在**保存序列**窗口中，输入序列名称并选择其他参数。
- ▶ 使用**OK**确认设置。
 - ✓ 这样，序列就会保存到数据库中。如果选择现有序列名称，现有方法不会被覆盖，但会在数据库中创建一个新版本。

另见

 [创建预定义注释 \[▶ 115\]](#)

4.1.3 加载序列

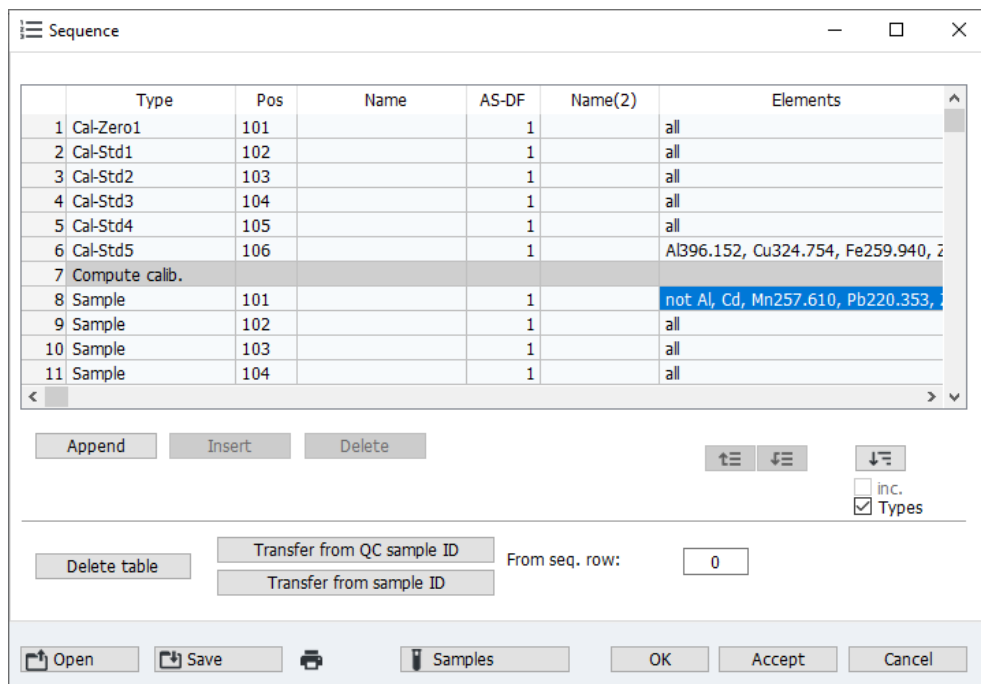
您可以加载已保存的序列，并根据序列和方法启动测量程序。

- ▶ 使用以下选项之一打开序列数据库窗口：
 - 在工具栏中，单击**序列**字段旁边的  图标。
 - 选择**文件 | 打开序列**菜单项。
 - 在**序列**窗口中，单击**打开**。
- ▶ 您还可以在**分类**字段中选择一个类别，从而限制序列的显示。如果您想查看所有类别的序列，请删除**分类**字段中的条目。
- ▶ 如果只想查看同名序列中版本号最高的序列，请选中**只有当前版本**复选框。
- ▶ 在表格中选择序列，然后单击**OK**。
 - ✓ 显示带有已保存参数的**序列**窗口。

4.2 序列窗口

在**序列**窗口中，您可以指定测量顺序和分析期间的其他操作。

单击  打开**序列**窗口。



样本和动作序列表

下表按处理顺序列出了所选样本和动作序列。

表列	说明
类型	样品类型或分析步骤。
位置	样品在自动进样器托盘上的位置（如果使用）。
名称	样品名称 此选项为可选项。对于校准和质控样本，如果在方法中指定了样品名称，该样品名称将从方法中转移过来。对于分析和质控样本，可从样品信息文件中调用名称。
名称 (2)	用于样本识别的附加名称（可选）
元素	选择样本中要分析的元素或要执行特殊操作的元素。 <ul style="list-style-type: none"> ■ 没有 当前选择已删除。 ■ 所有 将确定方法中定义的所有元素（默认）。 ■ 元素符号 只确定指定的元素，如“铜、铅”。 ■ 元素谱线（符号 + 波长） 只确定指定的元素谱线，例如“锰 257.610，钙 315.887”。 ■ 不元素符号或不元素谱线 未确定指定的元素或元素谱线，例如：“不 Cu, Pb”，“不 Mn 257.610, Ca 315.887”

按钮

您可以使用这些按钮在序列列表中添加样本和操作，删除它们或传输现有的样本信息数据。

按钮	说明
添加	在列表末尾添加新行并打开编辑序列窗口
插入	在所选列表位置上方插入新行
删除	删除选定的行
删除表格	删除整个序列列表

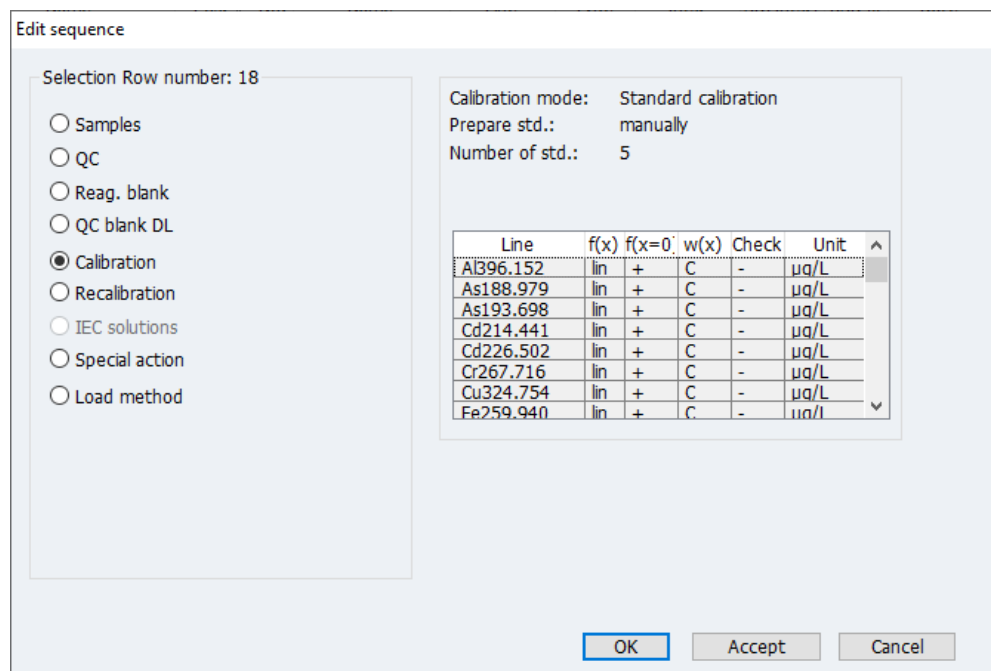
按钮	说明
从QC样品ID导入	从样品 QC样品信息 窗口传输有关质控样品名称及其在自动取样器中位置的信息 将质控样本 ID 表中的信息输入序列表。带有新样本标识的第一行定义在来自序列行 字段中。
从样品ID导入	从样品 窗口传输有关样品名称、自动取样器中的位置和待分析元素的信息 将样本 ID 表中的信息输入序列表。带有新样本标识的第一行定义在样品 字段中。
样品	打开样品ID窗口。

另见

- 常用控制元件 [▶ 14]
- 为样本分析/行动选择元素/谱线 [▶ 52]

4.3 按顺序指定测量和操作


在编辑序列 窗口中，您可以为分析指定测量和操作的顺序。单击序列 窗口中的添加或插入 时，将显示该窗口。



可能的测量和行动

您可以根据方法设置为分析指定不同的测量和操作。


样本/行动	描述
样品	测量数量 中指定的样本数。
QC样品	测量质控样本，并按照方法规定进行评估 在列表中选择方法中指定的质控样本。质控样本的参数显示在相反的区域。
试剂空白	测量空白值分析物
QC空白DL	测量空白样，根据空白样方法确定检测限和定量限
校正	测量校准样品，并根据方法中的规范计算校准值

样本/行动	描述
重校	测量用于重新校准的校准样本并计算重新校准值
样品-加入	校准过程 添加校准方法 加入该样品并确定校准曲线和样品浓度
空白-加入	校准过程 添加校准方法和空白校正 浓度校正 加入空白样品并确定空白
IEC溶液	仅用于使用 IEC 进行峰值校正 测量 IEC 溶液
特殊动作	这些操作不会直接影响样品的测量（见下文）。
载入方法	加载已保存的方法，例如在序列中启动另一项分析 使用  打开已保存方法的数据库窗口。从两种保存方法中选择一种。

特别动作

动作	描述
熄火	熄灭等离子体
暗电流测量	进行额外的暗电流测量 通过这种暗电流测量方法，可以在快门关闭的情况下确定信号。暗电流测量始终自动进行，即使未插入序列中。
等待时间	等待字段中输入的时间（分钟），然后继续分析 使用自动进样器时，插管保持在清洗位置，进一步吸入清洗液。
暂停	停止分析 然后可以点击  或使用常规分析 继续 菜单项继续执行序列。
峰鸣	允许 PC 发出信号音，例如，用于指示校准结束
重复 / While循环	在序列中定义一个循环（重复）。 起点 重复 和终点 While循环 所围成的序列部分将重复执行，直至满足取消标准。作为取消标准，可以指定循环次数或以分钟为单位的时间。 要进行在线测量（作为远程维护的一部分），必须启用 自动 选项。这可以防止在手动模式下出现采样测光提示。
显示标准曲线图	在运行过程中显示校准曲线，直至等待时间（分钟）结束。等待时间结束后或点击 OK 后，软件将继续测量。 如果您在未输入等待时间的情况下激活 显示标准曲线图 操作，则在您使用 OK 确认校准之前，软件不会继续测量。 如果点击 校正 窗口中的 停止 按钮，软件将关闭窗口并中断分析序列，而不管设置的等待时间长短。
清洗系统	以正常泵速用清洗液清洗样品通道直至焰炬 在输入框中输入清洗时间。

指定序列

- ▶ 单击  打开**序列**窗口。
- ▶ 单击**添加**。
 - ✓ 出现**编辑序列**窗口。
- ▶ 使用**接受**逐个激活所需的操作并将其转移到序列表中。
- ▶ 使用**OK**确认最后一个操作。
 - ✓ 您返回**序列**窗口。现在，序列表中包含了按选择顺序排列的所有操作。
- ▶ 作为待分析元素的默认设置，**所有**选项已在每个样本/操作的序列表中被选中。点击相关样本/操作的**元素**表单元格，就可以在窗口中更改该设置。

- ▶ 使用自动进样器时：
 - 指定自动取样器中样本的位置位置。自动从方法中提取校准和质控样本的位置。
 - 不过，您可以在此更改位置，但序列中设置的位置始终具有优先权。
- 最好在**样品ID**窗口中输入要分析的样本数据，然后将其转移到序列列表中。

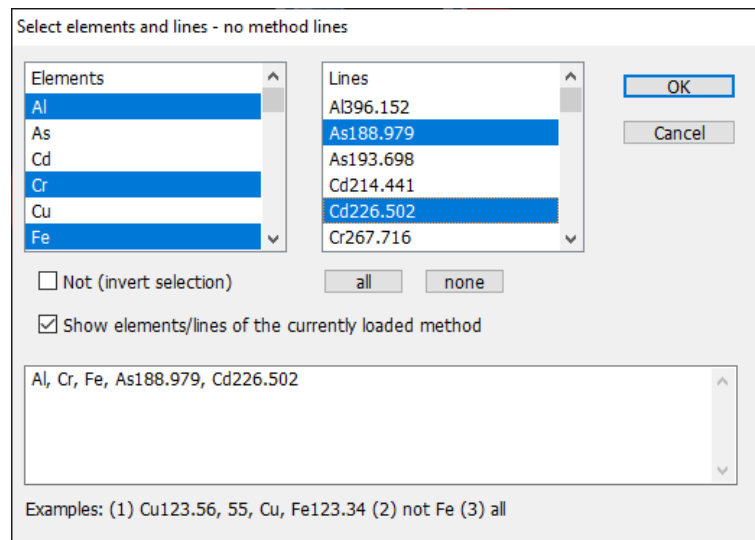
4.4 为样本分析/行动选择元素/谱线

在序列中，所有用于分析样本或执行操作的元素都已默认启用。如果要在分析样本或操作时排除元素，请按以下步骤操作：

- ▶ 在**序列**窗口中，单击相应样本或操作的表格单元格。出现**选择元素和谱线**窗口。
 - 选中**显示当前加载方法的元素/分析线**复选框。
 - ✓ 在**元素**列表中，方法中设置的所有元素/行都以蓝色高亮显示。
- ▶ 要完全排除某个元素，请单击相应的元素来移除选择。要启用该元素，请再次单击该元素。
- ▶ 如果在方法中为一个元素设置了多行，而您只想使用所选的行，请在**分析线**列表中单击鼠标选择所需的行。
- ▶ 通过**所有**和**没有**按钮，您可以启用所有元素或排除所有元素进行分析/操作。
- ▶ 使用**不(反选)**选项，所有选定的元素/谱线都将被排除在分析/操作之外。只分析未选中的元素/谱线。元素/谱线列表前面有"不"字样。

在输出栏中会列出所有选中的元素/谱线。返回序列窗口后，可直接在表格单元格中编辑元素/谱线。

选择元素和谱线窗口




5 样品信息数据 (样品 ID)

样品信息数据 (样品 ID) 包括当前分析样品和质控样本的具体数据, 如样品名称、在自动进样器上的位置、初始重量、稀释或浓度单位。通过鼠标单击, 可将样本名称和位置转移到序列表中。样本信息数据以 CSV 格式保存为表格, 也可在 Excel 等电子表格程序中进行编辑。也可以反过来: 将外部创建的样本表导入 ASpect PQ。

单击图标栏中的  打开**样品ID**窗口。

5.1 创建、保存和打开样本信息数据


创建新的样本 ID 集

- ▶ 在图标栏中, 单击  或选择**方法开发 | 样品ID** 或 **文件 | 新建样品信息文件** 菜单项。
 - ✓ 出现**样品ID**窗口。
- ▶ 指定样品和质控样本的数据。
- ▶ 单击**导入到序列**将数据记录转入序列。
 - ✓ 样品已激活, 将用于下一步分析。您还可以保存样本 ID, 以便日后分析。

保存样本 ID

- ▶ 在**样品ID**窗口中, 单击**保存** 或选择**文件 | 保存 | 样品信息** 菜单项。
- ▶ 在**另存为** 默认窗口中保存数据记录。
 - ✓ 样本 ID 以 CSV 格式保存。您可以加载数据进行进一步分析, 或在电子表格程序中进行编辑。


开放样本信息数据

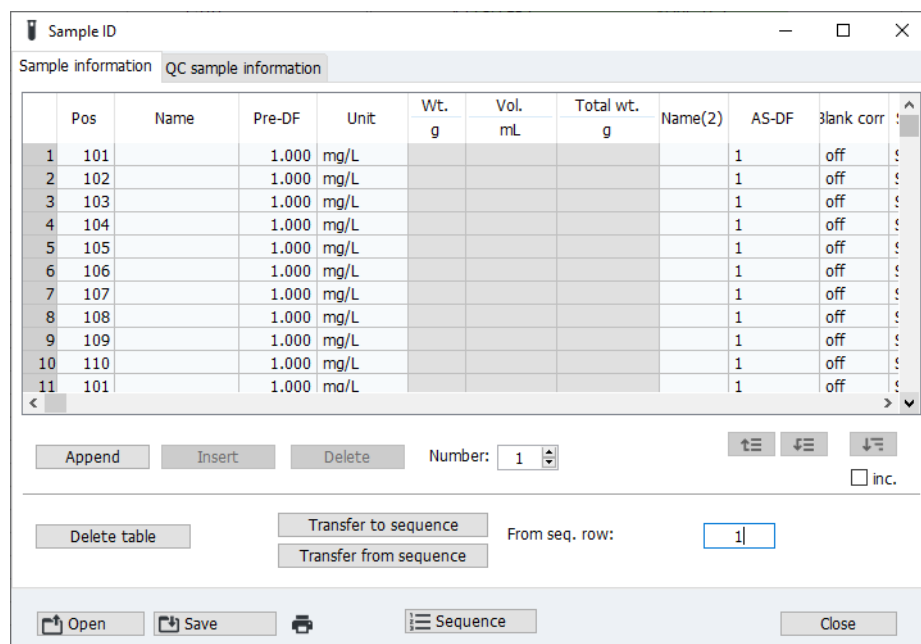
- ▶ 您可以使用以下方法之一打开样本 ID :
 - 在工具栏中, 单击**样品** 字段旁边的  图标。
 - 选择 **文件 | 打开样品信息文件** 菜单项。
 - 在**样品ID**窗口中, 单击**打开**。
- ▶ 在打开默认窗口中, 选择文件。
 - ✓ 样本 ID 显示在 **样品ID**窗口中, 可用于下一次分析。

另见

 指定样本信息 [▶ 55]

5.2 样品ID | 样品信息 窗口

在 **样品ID**窗口中, 您可以指定样本和质控样本。除了名称和在自动进样器中的位置外, 您还可以输入对分析很重要的参数。单击  打开**样品ID | 样品信息**窗口。



选项卡 样品信息

样品信息 选项卡包含样本列表及其特征。

表列	描述
位置	样品在自动取样器上的位置
名称	样品名称 此项为可选项。最大字符数：20
预稀释因子	对于单元类型 液体 和 固体 样品的预稀释因子是指原始样品在放入自动进样器之前或在不使用自动进样器的情况下提供给等离子体之前所稀释的因子。计算原始样本浓度时需要使用该系数 (浓度2)。
单位	样品的浓度单位。
重量	以克为单位的初始重量 (仅适用于单位类型 固体) 在样品制备过程中溶解的原始样品的质量。初始重量是计算原始样品浓度所必需的 (浓度2)。
体积	总容积或填充容积 (毫升) (仅适用于单位类型 固体)
总重量	样品和溶剂的初始总重量 (克) (仅适用于单位类型 液体重量 , 例如油类)。
名称 (2)	附加样本名称。 此项为可选项。 最大字符数：20
进样器稀释因子	自动进样器的稀释因子。
空白扣除	空白值校正 (仅适用于样本类型 样品) 关 不执行空白校正。 开 在计算原始样品的浓度时, 要减去序列中最后测得的空白值。 在 选项 校正 窗口中选择空白校正程序。
样品类型	在两者之间选择, 样品 和 空白
元素	样品中要分析的元素或品系 单击表格单元格后, 选择元素和谱线 窗口将打开, 在该窗口中可以进行这些设置。

按钮

按钮	描述
添加	在列表末尾插入新行列数。
插入	在所选列表位置前插入新行列数。
删除	删除标记行。
数量	输入栏，用于输入要插入的行数。
删除表格	删除完整的样本信息表。
导入到序列	将样品名称、自动进样器中的位置和要分析的元素转移到序列列表中。 必须在来自序列行 输入字段中定义序列列表的第一行，并从中传输样本数据。
从序列导入	将样品名称、自动进样器中的位置和要分析的元素从序列列表转移到样品 ID 表。必须在来自序列行 输入字段中定义序列列表的第一行，并从中传输样本数据。

QC样品信息 选项卡

与**样品信息**选项卡类似，该选项卡包含质控样本。此外，**类型**列还包含有关 QC 类型的信息。省略**单位**一栏是因为单位已在方法中定义。空白校正在质控样本的方法中定义，此处无法选择。

按钮



按钮	描述
导入到序列	将自动取样器上的质控样本名称和位置转移到序列列表中

另见

- ▣ 分析序列选项 [▶ 119]
- ▣ 为样本分析/行动选择元素/谱线 [▶ 52]
- ▣ 指定测量单位 [▶ 114]

5.3 指定样本信息





如果需要样品或质控样品的更多分析数据，如初始重量或预稀释因子，则必须在**样品ID**窗口中指定数据。此处指定的自动取样器中的样品名称和位置可以转移到序列中。

- ▶ 单击  打开**样品ID | 样品信息**窗口。
- ▶ 然后在**数量**字段中输入要分析的样本数量。然后点击**添加**将行插入表格。
- ▶ 在表格中，输入每个样本所需的信息。
- ▶ 如果列中的条目完全相同，可以使用  将所选单元格中的条目复制到列中的所有后续单元格中。如果启用**增加**复选框 (inc. 表示递增)，则每次将信息传送到下一个单元格时，值都会增加 1。通过这种方式，您可以轻松地在自动取样器的托盘上分配连续的位置，或对样品名称进行连续编号。
- ▶ 您可以将输入字段中的文本复制到剪贴板，然后再次粘贴。为此，请使用 Ctrl+C 和 Ctrl+V 组合键，或右键单击表格单元格并使用上下文菜单命令。
- ▶ 输入所有信息后，在**来自序列行**字段中，输入序列中希望将样本信息转移到序列的行。点击**导入到序列**传输信息。
- ▶ 在**样品ID | QC样品信息**窗口中以同样方式指定 QC 样品信息。单击**导入到序列**将质控样本信息转入序列。
 - ✓ 样本信息将用于下一步分析。

6 进行分析和计算结果

6.1 主窗口中用于启动分析的菜单命令和按钮概览

测量程序（基于序列的分析过程）可通过工具栏上的图标或常规分析 菜单启动。

图标	菜单项	功能
	常规分析 运行序列	启动测量程序
	常规分析 运行选中的序列行...	运行序列中选定的行或多行。使用鼠标和 Ctrl 键和/或 Shift 键可以标记多行。
	常规分析 停止	停止测量程序
	常规分析 继续	继续已停止的测量程序

6.2 打开光谱仪并点燃等离子体



小心

臭氧和一氧化二氮导致的中毒风险

- 在点燃等离子体之前打开排气装置。
- 运行时请打开排气装置。


为确保等离子体的安全运行，设备使用安全电路监控以下条件。

- 等离子舱门已关闭。
- 等离子焰炬处于工作位置。
- 提供足够的冷却。
- 废气抽排已启动。
- 确保氦气供应。

除非满足所有条件，否则不要点燃等离子体。如果其中一个安全电路在运行过程中报告故障，设备将熄灭等离子体。

点燃等离子体



- ▶ 使用电源开关打开 ICP-OES 设备。
- ▶ 使用电源开关打开电脑并启动操作系统。
- ▶ 打开氦气供应。将初步压力设置为 500 ... 700 kPa (5 ... 7 bar)。
- ▶ 打开排气装置。
- ▶ 使用电源开关打开循环冷却器。
- ▶ 打开等离子体舱门。检查焰炬是否处于启动位置。喷射器尖端必须位于感应线圈底部边缘下方约 1 至 2 毫米处。
- ▶ 检查轴向观察窗的锥面是否有污染和磨损。使用随附的钩形扳手检查锥体是否拧紧。
 - i** 注意！如果锥体松动，就不能充分冷却，就会腐蚀。
- ▶ 关闭等离子体舱门。
- ▶ 对于 PlasmaQuant 9200 Elite：打开可选的取样舱照明。
- ▶ 检查软管。更换不再柔软或有严重磨损痕迹的管子。

- ▶ 将每根软管夹在 ICP-OES 设备泵的塞子之间。
- ▶ 将夹紧支架放在管子上，用夹紧杆固定导轨。确保夹紧杆卡入到位！
i 注意！注意泵的方向。该泵逆时针旋转。
- ▶ 确保瓶中有足够的清洗液用于分析。
i 注意！洗涤液的酸含量应与样品和标准品相同。除非另有规定，否则请使用 2 % 的硝酸溶液。
- ▶ 检查废液瓶的装液量，如果没有足够的储液器用于分析，则清空瓶子。
- ▶ 在没有自动进样器的情况下进行手动操作时，将样品吸样管浸入洗涤液中。等离子点火过程中不得有空气进入。
- ▶ 启动 ASpect PQ 程序。
- ▶ 在**快速启动**窗口中，进行以下设置：
 - 选择**常规分析**或**方法开发**选项。
 - 如果使用 HF 套件，请在**矩管材质**下选择**陶瓷**选项，以调整光学等离子体传感器的灵敏度。
 - 可选地：在**工作表**区域，选择为快速启动准备的工作表，例如根据 USP 232/233。工作表包含方法设置和准备好的序列。
- ▶ 如果使用工作表启动软件，请在**快速启动**窗口中使用**OK**完成快速启动。
- ▶ 如果在没有工作表的情况下启动软件，请单击**关闭快速启动**进入 ASpect PQ 界面。
- ▶ 如果系统长期停用或雾化室被拆卸，则使用雾化气体吹扫雾化室和喷灯，以排出系统中的空气。单击  打开**等离子体|控制**窗口，然后单击**吹扫雾化室**。
- ▶ 点燃等离子体在**等离子体|控制**窗口中，单击**点火按钮**。
 ✓ 随后是初始阶段，用氩气吹扫焰炬，并检查 ICP-OES 设备的安全电路。如果一切正常，则点燃等离子体。
- ▶ 观察等离子体是否正确形成。等离子体必须呈圆锥形，超出感应线圈，并向顶部逐渐变细。
- ▶ 如果形成环形等离子体，则等离子体仅在感应线圈内形成，否则会听到噼啪声。在这种情况下，按下设备上的红色等离子体关闭按钮。
- ▶ 在进行下一次点火尝试之前，检查样品管是否浸入洗液中，以及气体供应和循环冷却器是否正常工作。
 ✓ 只有在成功点火并形成稳定的等离子体后，光谱仪才会冷却。1 ... 2 min 点火程序完成，管泵启动。发射光谱仪已准备好进行测量。
- ▶ 现在只需对分析系统进行进一步设置，并启动测量程序。

另见

 启动 ASpect PQ [▶ 7]

6.3 熄灭等离子体并关闭光谱仪

- ▶ 分析结束后，用泵将洗涤液泵入系统约 3 分钟，然后用水冲洗 1 分钟。然后等待设备晾干。如果需要更换导管，导管中应没有剩余的酸！
- ▶ 点击工具栏上的  在 ASpect PQ 程序中熄灭等离子体。
或者，使用  打开**等离子体**窗口，然后单击**熄火**。
- ▶ 使用**文件|退出**退出 ASpect PQ 程序。

- ▶ 如果要关闭检测器的吹扫气体，请使用 **是** 确认关闭吹扫气体的查询。如果只是短暂中断工作（不足 30 分钟）或在紫外范围内工作，则不要关闭清洗气体。这样可以节省点火过程中的等待时间，直到探测器被充分净化。在测量间歇期间不要关闭设备。
- ▶ 等待设备和冷却可以关闭的信息出现。
- ▶ 使用电源开关关闭 ICP-OES 设备和自动进样器（如适用）。
- ▶ 在日常测量操作中，您也可以使用设备前部的待机开关关闭 ICP-OES 设备。设备仍连接至电源。在待机模式下关闭燃气供应。
- ▶ 松开 ICP-OES 设备上的泵管。松开压力杆，使夹紧支架不再压在管子上，然后将泵一侧的管塞从锁扣中拉出。
- ▶ 如果使用自动进样器，则以同样的方式松开泵管。
- ▶ 关闭设备后，关闭气源。
- ▶ 使用电源开关关闭循环冷却器。
- ▶ 关闭排气装置。
- ▶ 关闭 Windows 并关闭电脑。
 - ✓ 分析仪现已关闭。



注意

等待 ICP-OES 设备冷却后再关闭！
熄灭等离子体后，至少等待 30 秒，然后使用电源开关关闭设备。

6.4 启动测量程序

在准备测量的过程中，请制定方法和顺序，或使用准备好的工作表。


如有必要，准备一个包含稀释等其他样品信息的样品 ID。

准备测量设备：

- 打开设备和附件，点燃等离子体。

准备好要测量的样品，例如放在自动进样器托盘上。

开始测量

- ▶ 打开发射光谱仪和附件。点燃等离子体
- ▶ 加载方法：
 - 在工具栏中，单击 **方法** 字段旁边的文件夹图标。在 **打开方法窗口** 中选择方法。
- ▶ 创建新序列或加载现有序列：
 - 在序列开始时进行校准。
 - 在加载序列时，确保校准与方法相匹配。
校准标准的分析线必须与您在 **< 校正** 标签上的方法中选择的分析线一致。
 - 校准后，测量质控样本以验证校准的正确性。
- ▶ 如有必要，可创建一个样本 ID 表，其中包含有关样本的其他信息。
- ▶ 开始测量单击  或使用 **常规分析 | 运行序列** 菜单项启动测量例程。
- ▶ 在 **开始** 窗口中，为结果文件选择一个文件名。
您可以将结果保存到一个新文件中，或附加到现有文件中。无法覆盖现有文件。

- ✓ 选择文件名后，将根据方法和顺序中的设置启动测量程序。使用自动进样器时，测量自动进行。
- ▶ 对于没有自动进样器的手动样品导入，请按照屏幕上的样品制备说明进行操作。

另见

 分析序列选项 [▶ 119]


6.5 在分析运行期间显示和保存结果

在分析过程中显示

在测量过程中，测量结果会实时显示在主窗口中。还可以显示当前结果的其他窗口。

- **光谱图**：分析线视图
- **信号图**：测量信号曲线
- **棒柱图**：条形图中的测量值
- **报告窗口**：等离子体报告
- **样品浓度显示在标准曲线上**：校准曲线中的样本值

您可以在 **选项 | 分析序列** 窗口中选择这些显示窗口。在分析过程中，可以显示或隐藏显示窗口。




- ▶ 使用 **查看 | 打开结果窗口** 菜单命令或 F7 功能键打开窗口。
- ▶ 使用 **查看 | 关闭结果窗口** 菜单命令或 F8 功能键隐藏窗口。
- ▶ 使用  还可以在分析过程中打开窗口。

在主窗口的序列列表中，会记录测量进度。在表格栏中，有连续操作的行用以下符号标出：

图标	意义
-	尚未测量/执行。
0	仅在测量。
+	已经测量/执行。

图标栏中的按钮

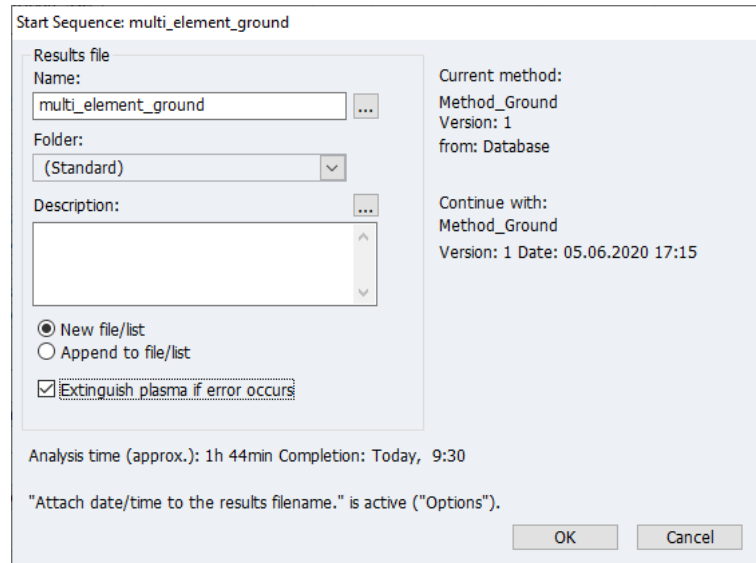
测量过程中，图标栏会显示以下按钮：

按钮	描述
	打开和关闭显示窗口
	显示序列窗口 方法只能被读取，不能被更改。
	显示序列窗口 该序列可在分析过程中进行扩展。序列窗口包含 样品 按钮，该按钮可打开用于添加样本数据的 样品ID 窗口。

在分析过程中保存结果数据

在测量过程中，分析结果会直接保存到默认文件夹或用户自定义子文件夹中的数据库中。这些数据可选择保存到新数据库或添加到现有数据库。但是，无法通过选择相同名称来覆盖结果数据库。

测量程序开始时，将自动请求结果存储目标。此时会打开相关的**开始**窗口，其中包含以下结果文件选项：



选项	
名称	输入结果数据库的文件名 新文件/列表 如果启用，则必须输入新文件名。程序会检查文件名是否已经存在。不能覆盖现有文件。 附在文件/列表后 新结果被附加到现有结果文件中。点击...打开一个选择窗口，您可以从其列表选择一个现有的结果文件。
文件夹	选择结果文件的存储路径 在选项 分析序列 窗口中，如果启用了在结果文件名中附上日期/时间 选项，该信息将自动附加到结果名称中。该窗口中会出现一条关于启用该选项的信息。
描述	在这里，您可以输入附加注释，这些注释将与分析结果一起保存 您可以单击 ... 以选择用户定义的描述。
如果故障发生熄火	如果测量因错误信息而取消，则等离子体熄灭

该文件包含测量和评估结果以及样品 ID 信息。此外，方法参数会保存在结果数据库中。

结果数据库的保存扩展名为".tps"（方法参数、强度和浓度）和".spk"（原始光谱数据）。

6.6 中断和继续分析序列


分析序列可以中断，然后再继续。

- ▶ 使用常规分析 | 停止 菜单项或 会立即停止分析序列。
- ▶ 通过常规分析 | 继续或 继续执行被中断的例程。
 - ✓ 打开 继续运行分析序列窗口，显示中断前的操作状态。
 - ✓ 如果更改了方法，请启用 根据修改方法继续运行 选项。这将在结果文件中产生一个新的方法条目，并保存方法的另一个版本：

选项	描述
继续	继续当前采样、当前谱线和当前统计运行
第一次统计运行	继续当前样本、当前行和第一次统计运行
第一元素	继续当前样本、第一行和第一次统计运行
从表格行 ->	继续文本框中显示的表格行

6.7 重复序列动作

序列中的单个操作可以重复。

- ▶ 在主窗口的序列 或序列/结果 标签上，选择要重复操作的一行或多行。按住 Ctrl 或 Shift 键的同时单击相关行，就可以选择多个。
- ▶ 点击  或使用常规分析 | 运行选中的序列行... 菜单项启动测量例程。
- ▶ 在开始 窗口中，选择要保存重复测量结果的文件名。您可以选择将结果保存到新文件中，或附加到现有文件中。无法通过选择相同的文件名来覆盖现有结果。
 - ✓ 接下来将开始重复所选的操作。



注意

如果在此期间对方法进行了更改，则在重复序列或单行时将使用更改后的方法，并将结果保存为新版本。

6.8 后处理分析结果

分析结果的再处理用于改变分析条件，如改变校准函数或方法，以便在分析中生效。样品信息数据的更改，如样品名称、稀释因子等，也需要重新处理，以便在分析结果输出中加以考虑。

重新处理后的数据可附加到当前结果文件或保存到新文件中。排除了对原始数据的操纵。如果在一个结果文件中多次重复使用不同的参数进行再处理，则每次再处理都会回溯到结果文件的原始数据。

i 注意！每次再处理都会保存一个新的方法版本。




重新处理结果 窗口中的输入选项

选项/字段	描述
开始数据	<p>选择起始数据</p> <p>名称 显示数据被重新处理的结果文件名称。</p> <p>修改的样品信息数据 如果样品信息文件中的数据（如稀释因子）已更改，则启用该功能。如果不启用该选项，在重新处理结果时将不会考虑样本信息文件中的更改。</p> <p>更新结果图 结果窗口，例如 显示谱图，将与测量结果一样更新。 备注：这就减慢了后处理的速度。</p>
结果文件 目标	<p>选择保存再处理结果数据的位置。</p> <p>新文件/列表 将结果数据保存在新文件中 为结果文件选择 文件夹 和 名称 下计算数据的存储位置。</p> <p>附在文件/列表后 再处理后的数据将附加到现有结果文件中。</p>
描述	<p>该附加说明与重新处理的分析结果一起保存。如果安装了可选的 21 CFR 第 11 部分合规性模块，则需要输入此项。 可从列表中选择用户自定义的描述。</p>
重新处理输入	<p>选择要重新处理的行。</p> <p>所有 重新处理结果列表中的所有条目。</p> <p>选择输入 只重新处理选定的序列行。 单击 ... 并在 选择输入 窗口中选择要重新处理的所有序列行。</p> <p>当前方法的分析线 在列表中选择要再处理的所有谱线。 选择所有 选择所有谱线。 取消选择 删除谱线列表中的所有选择。</p>




选项/字段	描述
暂时改变	保存用于再处理的临时更改（波长偏移、删除标记）（文件扩展名为".rep"）。数据随后会自动加载到相应的结果文件（同名）中。
添加到QC图表	激活后，QC 样品类型结果将在再处理过程中输入 QC 图表。

进行后处理

- ▶ 更改可在方法参数或**样品ID**窗口中进行。
- ▶ 单击或选择**常规分析 | 再处理**菜单项。
重新处理结果窗口随即打开。
- ▶ 指定起始数据（名称、修改后的样本信息数据、更新后的结果图）、存储位置和目标文件名。
备注：如果由于样本信息发生变化而需要重新计算，请启用**修改的样品信息数据**选项。否则，这些变更将不予考虑。
- ▶ 选择要重新处理的行/谱线。
- ▶ 用**OK**开始重新处理。如果没有指定目标文件，则会出现查询“不保存到一个永久文件重新处理数据?”。


更换校准标准

现有的校准标准可由稍后测量的标准替代。为此，请按以下步骤操作：

- ▶ 在主窗口的**序列**或**序列/结果**选项卡上，选择要更换的校准标准的行。
- ▶ 单击开始测量序列行。
- ▶ 在**开始**窗口中，定义要将结果附加到现有文件中。
接下来，开始测量校准标准。
- ▶ 单击打开**重新处理结果**窗口。
- ▶ 启用**选择输入**选项，并单击打开同名窗口。
- ▶ 选择最后测量的标准，使用箭头键将其移动到要替换的标准位置。
- ▶ 选择要重新处理的所有行。停用不应再纳入计算的旧标准。
- ▶ 单击**OK**返回**重新处理结果**窗口，并指定起始数据、存储位置和目标文件名。
- ▶ 用**OK**开始重新处理。
 - ✓ 重新处理选定行的数据。

更换校准标准中的单个谱线

或者，您也可以按如下方式替换标准：


- ▶ 在主窗口的**序列**或**序列/结果**选项卡上，选择要更换的校准标准的行。
- ▶ 单击开始测量序列行。
- ▶ 在**开始**窗口中，定义要将结果附加到现有文件中。
接下来，开始测量校准标准。
- ▶ 在结果列表中，右键单击要替换的标准（谱线）。在上下文菜单中选择**样品单个值**项。
- ▶ 在**样品单个值**窗口中启用**用输入相应的行数替换**复选框，并在输入框中输入要替换的标准的行号。
- ▶ 如上所述，开始重新处理。
 - ✓ 重新处理选定行的数据。

另见

- 📖 创建预定义注释 [▶ 115]
- 📖 指定质量控制 (方法 | QCS 窗口) [▶ 40]

6.9 在运行分析的同时评估测量结果（离线模式）

在测量过程中，不可能在同一程序实例中评估结果。不过，也可以在脱机模式下启动应用程序的第二个程序实例，同时在第一个实例中运行测量。在此模式下，无法与设备通信。不过，所有其他功能，如开发方法或加载和分析结果，都可以与第一个程序实例的运行测量并行使用。

- ▶ 使用文件 | 启动离线 菜单项在第二个程序实例中启动 ASpect PQ。
- ▶ 使用文件 | 打开结果 菜单项打开当前正在运行的测量结果文件。目前测得的结果将载入结果窗口。
- ▶ 点击工具栏上的  或使用查看 | 更新结果列表 菜单项，即可加载当前测量的其他结果。
 - ✓ 结果显示已更新。可以进一步编辑结果。

i 注意！在重新处理中，重新计算的结果会保存到新的数据库中。无法访问原始结果文件。

6.10 在主窗口中显示结果和分析进度

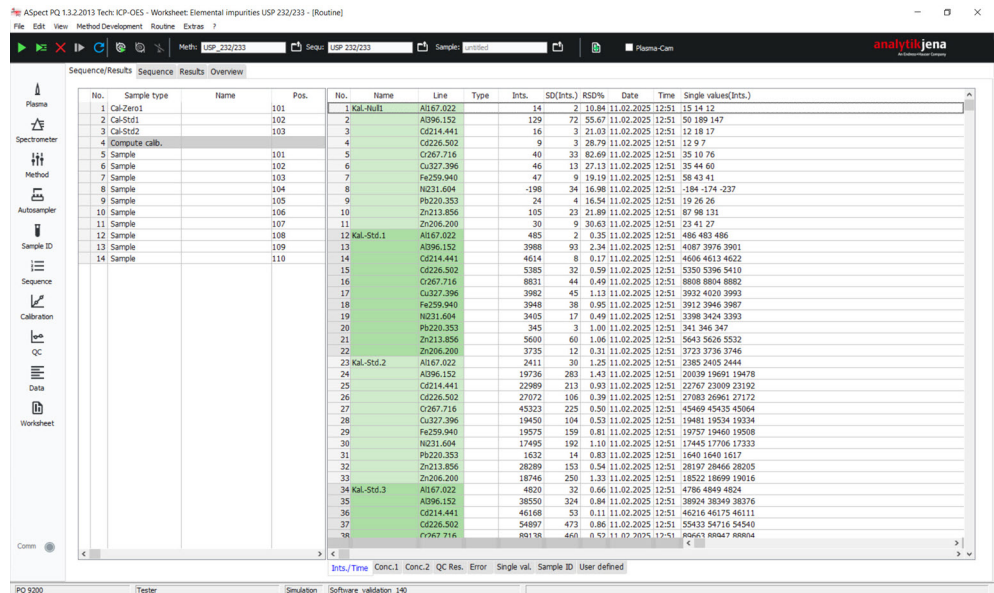
会在工作场所背景的主窗口中详细显示测量结果和序列。主窗口中不同选项卡上的显示方式可以很好地概括测量结果和统计分析。

可选择以下选项卡：

- 序列/结果（一个标签页中 序列 和 结果 标签页的内容）
- 序列（显示当前序列）
- 结果（显示测量结果）
- 综览（测量结果摘要）

结果窗口的状态栏会显示当前结果文件的文件名。

带有结果的 ASpect PQ 主窗口



6.10.1 序列/结果 选项卡

序列/结果 选项卡包含来自序列 和结果 表的数据。

另见

 序列 选项卡 [▶ 65]

 结果 选项卡 [▶ 65]

6.10.2 序列 选项卡

在 序列 选项卡上，将列出活动序列。

在该选项卡上，您可以跟踪运行分析的进度。各种样本和特殊功能在表格第一栏中标注如下：

图标	意义
-	尚未测量/执行。
0	仅在测量。
+	已经测量/执行。

测量  注意！后，您可以重新测量选定的样本。

为此，您必须在序列中标记样本行。然后，点击工具栏上的 。

6.10.3 结果 选项卡

结果 t 选项卡包含所有测量结果和统计评估。为使表述更清晰，这些数值被分割成更多表格。这些表格的索引选项卡位于窗口底部边缘。

数值按样本测量顺序排序。每个样本都列出了分析的元素。

表 强度/时间

根据方法设置（方法 | QCC 窗口），表格包含强度和统计分析。

列	描述
序数	分析序列中的编号
名称	样品、标准或质控样本/标准的名称
分析线	元素谱线
类型	内标或分析物
强度	样品单个强度测量值的平均值
SD(强度)	标准差（平均值统计）
RSD%	相对标准偏差（平均值统计）
日期/时间	测量时间
单个值(强度)	单个强度测量值

浓度1 表格

浓度1 表显示提供给 ICP-OES 设备的样品分析浓度。使用的单位是方法中设置的校准单位。

列	描述
序数	分析序列中的编号
名称	样品、标准或质控样本/标准的名称
分析线	元素谱线
类型	内标或分析物

列	描述
单位	浓度单位
浓度1	样品中的分析物浓度/标准中的分析物浓度
SD1	浓度1 的标准偏差 (平均值统计)
RSD%	浓度1 的相对标准偏差 (平均值统计)
R	浓度1 的范围 (统计中值)
R%	浓度1 的相对范围 (统计中值)
置信度	置信区间
稀释因子	样品预稀释因子 原始样品在放入自动进样器之前或在不使用自动进样器的情况下提供给等离子体之前被稀释的因子。
备注	确定数值时的备注
强度	重复测量的单个强度的平均值
SD(强度)	强度的标准偏差 (平均值统计)
日期/时间	测量时间
单个值 (强度)	重复测量的单个强度值

浓度2 表格

浓度2 表显示了原始样本的浓度。在计算第 2 节时，考虑的是样本信息数据：

- 稀释前
- 固体初始重量和溶液体积
- 其他单位的换算系数

列	描述
序数	分析序列中的编号
名称	样品、标准或质控样本/标准的名称
分析线	元素谱线
类型	内标或分析物
单位	浓度单位
浓度	考虑样本信息数据后的原始样本浓度
SD2	浓度2的标准偏差 (平均值统计量)
RSD%	浓度2的相对标准偏差 (平均值统计)
置信度	浓度2的置信区间
100%回归	浓度2 归一化为总浓度的百分比
强度	确定的单个强度的平均值
SD(强度)	强度的标准偏差 (平均值统计)
R"相关系数(强度)	强度范围 (统计中值)
日期/ 时间	测量时间
单个值 (强度)	单个强度测量值

QC 表

QC表显示质控样本的结果：

- 浓度的目标值和实际值
- 回收率 (所有类型，空白值除外)
- 对任何偏差的反应 (除空白值外的所有类型)。

列	描述
序数	分析序列中的编号
名称	样品、标准或质控样本/标准的名称

列	描述
分析线	元素谱线
类型	内标或分析物
QC样品 (用于校准功能)	R2相关系数 或 R 斜率 BEC 背景等效浓度
QC样品 (用于质控样品, 不用于质控空白样品)	浓度1 额定值 回收率 回收率 对于质控样品和质控标准, 要确定浓度的回收率。 对于 QC-Stock、QC-Trend 和 QC-Matrix, 要确定加标引起浓度增加的恢复率。
QC样品 (用于空白检测限)	SD 空白测量的标准偏差 LOD 检测限 LOQ 定量限
备注	对质量控制事件的评论 (例如, >计算值)
强度	单个强度测量值的平均值
SD	强度的标准偏差 (平均值统计)
日期 / 时间	测量时间
单个值 (强度)	单个强度测量值

错误表

如果在测量过程中出现错误, 相应的测量值将在所有表格中以红色标出。在错误表中, 包括错误编号在内的各测量错误均以书面形式记录。

单个值表

单个值表包含强度的单个测量值和相应的背景强度。

样品ID表

样品ID表包含样本信息数据。

列	描述
序数	分析序列中的编号
名称	样品、标准或质控样本/标准的名称
分析线	元素谱线
位置	样品在自动取样器上的位置
预稀释因子	预稀释因子 原始样品在放入自动进样器之前或在未使用自动进样器的情况下提供给光谱仪之前的稀释系数。计算原始样本浓度时需要使用该因子。
重量	初始重量 (克) 样品制备过程中溶解的原始样品的质量 (单位: 克)。质量是计算原始样品浓度所必需的 (浓度2)。
体积	用于稀释初始重量的溶剂体积 (毫升)。计算原始样品的浓度时需要该值 (浓度2)。
总重量	总称量部分, 包括样品和稀释剂 (仅适用于单位类型 液体, 液体重力)
名称(2)	样本信息表中的附加样本名称
进样器稀释因子	自动进样器的稀释因子。

列	描述
空白扣除	空白校正 关 未进行空白值校正。 开 为了计算原始样品的浓度，将减去序列中最后测量的空白样。

自定义表

在自定义表中，可以直接选择结果输出的参数及其在表中的顺序。

- ▶ 单击表格右下角的 **选择列** 按钮。
- ▶ 在 **选择列** 窗口中，用鼠标单击选择所需的参数。
- ▶ 要更改显示顺序，请选择要更改位置的参数，并用按键 **↓** 和 **↑** 在列表中移动它。
- ▶ 返回主窗口后，将显示结果。将鼠标指针移到表头的表格行上（指针会变成双箭头），然后按住鼠标键移动表格列到所需的宽度，就可以更改表格列的宽度。

备注：

列宽保存在此视图中。退出后，主窗口中其他表格的列宽变化将被重置。

另见

- 📖 分析序列选项 [▶ 119]
- 📖 数值显示标记概览 [▶ 137]
- 📖 样品信息数据（样品 ID） [▶ 53]


6.10.4 概览选项卡

综览 选项卡汇总了分析结果。您可以选择不同的演示选项：


数值	描述
浓度1	浓度 1
浓度(RSD%)	浓度 1（相对标准偏差）
浓度2	浓度 2
浓度2(RSD%)	浓度 2（相对标准偏差）
强度	强度
强度(RSD%)	强度（相对标准偏差）
强度(SD)	强度（标准偏差）
LOD	检测限
LOQ	定量限
回收率(标称值)	恢复率（设定值）
R ² / 重校因子	测定系数/重新校准系数
100%回归	浓度2 归一化为总浓度的百分比

通过激活相应的复选框，可以显示以下样本类型：

- 样品
- QC样品
- 校正标准
- 其他

使用  打开 **打印综览** 窗口，从这里可以开始打印当前概览中显示的数据。

另见

 ASpect PQ 中的打印功能 [▶ 103]

6.11 显示和编辑样本单值

您可以显示样品的单个值，也可以在计算样品浓度时排除单个值。

- ▶ 右键单击结果表中的一行，从右键菜单中选择**样品单个值**项。或者，选择样本行，然后选择**查看 | 样品单个值**菜单命令。

自动取样器调整窗口 样品单个值

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](#)

单值显示 (表格)

单值样本见表。

表列	描述
序数	样本测量中的单值数量
强度	单一数值的强度
浓度1	分析样品中分析物的浓度。
备注	<p>没有 在计算样本平均数时，会包含单个值。</p> <p>#MAN 在计算样本值时手动排除了该值。</p> <p>#KOR 由于进行了格拉布斯离群值检验，在计算样本值时自动排除了该值。</p>

样本数据

字段	描述
序数	结果表中的测量次数
类型	样品类型 (样品、标准样品或质控样本类型)
名称	样品名称
日期 / 时间	表中所选测量的日期和时间
强度(平均值)	所有单值的平均强度

字段	描述
SD	标准偏差（平均值统计）。该参数的显示与为测量选择的统计方法（平均值/中值）无关。
RSD	相对标准偏差（平均值统计） 该参数的显示与为测量选择的统计方法（平均值/中值）无关。

样品单个值 窗口中的其他按钮和选项

选项/按钮	描述
删除 / 重新激活	从平均值计算中移除样本单值，或重新激活样本单值进行计算
编辑谱图	显示随波长变化的线光谱
用输入相应的行数替换	仅用于校准标准 在再处理过程中，当前样品将被结果表中 富集位置上的样品取代
	在结果表中的各个样本行之间以及从一个样本到下一个样本之间切换

剔除样本单值

如果需要，您可以在计算样本平均值时手动排除单个值。

- ▶ 为此，请在表格中标出要排除的单个值。
- ▶ 单击**删除** 从结果再处理的样本平均值计算中排除该值。
- ▶ 单击**重新激活** 将选定的单个值再次纳入计算。

i 注意！通过激活 格拉布斯离群值检验选项，可以在分析过程中自动检测和消除单个数值中的离群值。

另见

显示和编辑强度光谱 [▶ 70]

6.12 显示和编辑强度光谱

编辑谱图窗口中的强度光谱显示用于以下任务：

- 计算分析线的主峰并保存在分析线文件中
- 根据样品基质计算背景校正，并将其转移到方法中
- 创建光谱校正
- 确定与分析线相邻的线路

在结果窗口中可显示和编辑每次测量的强度光谱。

- ▶ 双击结果表中相应的样本行，打开**编辑谱图** 窗口。
或者，右键单击结果表中的行，然后单击右键菜单中的**编辑谱图**。您还可以选择样本行并选择 **查看 | 编辑谱图** 菜单命令。

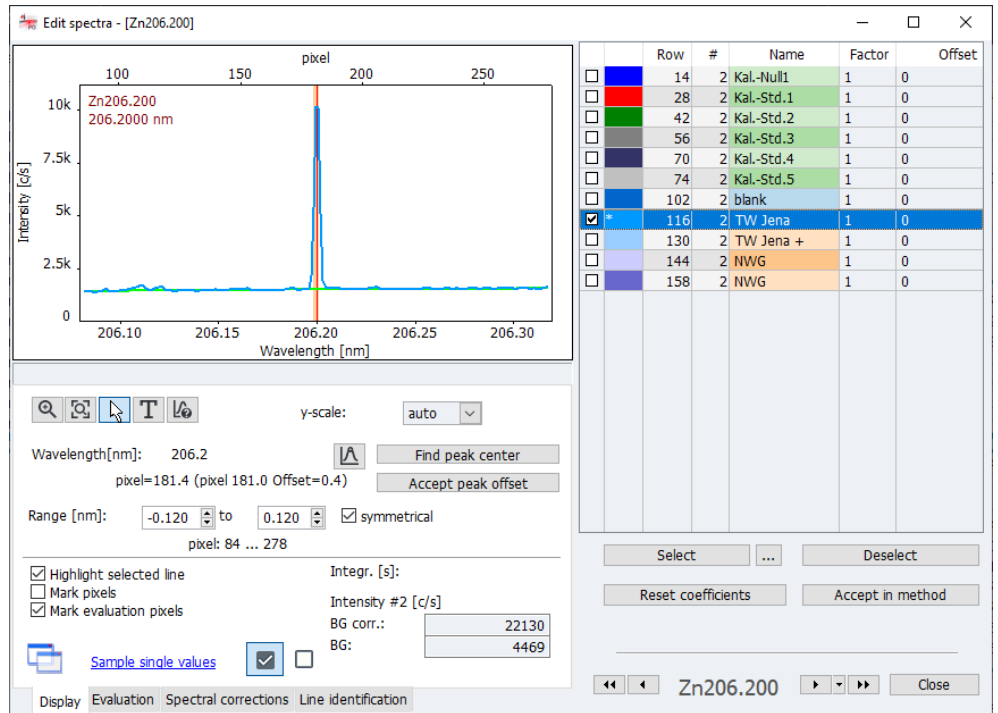
在 **编辑谱图** 窗口中，一次列出一条分析线的所有测量样本和所有单值。可以在各分析线之间进行切换。

编辑谱图 窗口左侧包含所选样品的强度光谱图，以及用于分析和编辑光谱的四个选项卡。右侧是从概览中选择要显示的样本单值。

6.12.1 显示光谱 - 编辑谱图 / 显示 窗口

编辑谱图 | 显示 窗口显示样本光谱概览。您可以确定峰值的位置，并将找到的参数传输到线/波长文件和方法中。

编辑谱图 | 显示 窗口



选择光谱/样本列表

右侧的样本列表列出了分析行的所有样本单值。

- ▶ 启用要在图表中显示的单个值的复选框。
样本单值的光谱以叠加方式显示。表中前部字段的颜色分配给各个光谱。
- ▶ 如果窗口左下角的**点蓝**所选分析线 选项已启用，则用鼠标选择的单个样本（表格中的蓝色条）在图表中将以粗体显示。
- ▶ 您可以使用表格下方的按钮过滤样品列表中样品/重复测量的显示以及光谱图形显示的选择（启用样品列表中的复选框）：
 - 在选择旁单击**...**。
 - 在 **选择** 窗口中进行以下设置：

选项	描述
所有	选择主窗口中结果列表的所有行进行图形显示（启用图形显示复选框）。
从/到	只选择结果列表中从/到设置行之间的光谱。
重复次数	选择样本的单个数值： 所有 选择样本的所有样本单值。 参考编号，如 "2"。 只选择样本中选定的单个值
只显示所选重复	如果启用，样本列表中只显示所选重复测量的条目。 如果禁用，则显示所有单个光谱，并加载上述主窗口所选条目（全部或从/到）。

- 通过点击**选择**，您可以显示并选择带有上述参数的光谱。
- 使用 **取消选择**禁用所有复选框以显示单个值。









输入因数和抵消

- ▶ 对于每个频谱，您都可以在样本表中输入一个因子和/或偏移量。以这种方式处理的频谱会沿 X 轴扩散/压缩和移动。
- ▶ 单击**重置系数**，因数和偏移将再次重置，频谱将以原始状态显示。

显示谱线频谱



所选光谱显示在左侧。以计数/秒为单位的强度与以纳米为单位的波长相对照。图表顶部边缘显示像素分配情况。调整光谱仪，将主峰映射到测量像素，例如 180。必须对每条分析线的主峰偏移进行校正，见下文。

光谱视图的按钮具有以下功能：




选项/按钮	描述
	启用图形缩放。单击后，按住鼠标左键选择要放大的光谱部分。
	缩放后恢复原始坐标。
	在信号图或频谱图中启用选择模式。用鼠标左键选择测量点。所选测量点的数值显示在按钮下方的输出栏中。
	启用文本模式。按下鼠标左键后，可以选择一个窗口区域，用于在图表中添加文字。 双击现有文本可打开编辑或删除文本的窗口。使用 Ctrl 键和鼠标右键可以移动现有文本。
	启用谱线识别模式。通过单击或拖动鼠标，可在谱线数据库中搜索所选波长位置的元素谱线。找到的直线显示在图表下方。
y-轴	选择图形的缩放比例： 自动 自动缩放：频谱以最佳纵向展开方式显示。 数值 手动缩放。必须在列表中选择纵座标上限。
波长	显示分析线的波长。
	手动设置主峰。
寻找峰中心	自动搜索峰值并校正偏移。
接受峰偏离值	将峰值偏移保存在谱线库中。从此时开始，该偏移量将用于该元素线的每次测量。
范围(nm)	选择分析线下方和上方的波长范围。这一波长范围可用于光谱分析，例如背景校正。 如果启用了 对称 复选框，则波长以下和波长以上的波长范围相同。 相应的像素范围显示在输入字段下方。 点击 接受方法 将所选线路波长范围的设置转移到当前测量方法。此范围用于计算动态背景调整（或自动背景校正）。数据也会在评估 标签页的方法窗口中更改。
点蓝所选分析线	右侧概览中选择的单个频谱会在图表中用粗线标出。
标记像数	图形中的像素用圆圈标识。
标记有效像数	主峰的中心分析像素用红线标出。如果分析中使用了多个像素，其范围将以浅红色标出。
强度	未扣除 背景校正强度 BG 背景强度
样品单个值	链接到 样品单个值 窗口
	如果图标以这种方式突出显示，则该行将用于方法中。 在方法开发过程中，您可以在 编辑谱图 窗口中以这种方式选择合适的谱线。
	请勿在方法中使用谱线。

自动设置主峰

在方法开发过程中，您需要校正与设备相关的峰值偏移以及线路干扰（如重复）造成的偏移。

- ▶ 单击**寻找峰中心**。主峰的自动测定非常适合测定大多数峰值。
或者，单击  并手动选择光谱中的主峰。
- ▶ 您可以选择重新计算结果，以评估新的峰值偏移。
切换到结果窗口，单击  开始重新处理。
- ▶ 将使用**接受峰偏离值** 找到的峰值偏移保存到设备的行/波长文件中。
✓ 现在，数据可用于分析线的每次后续分析。

另见

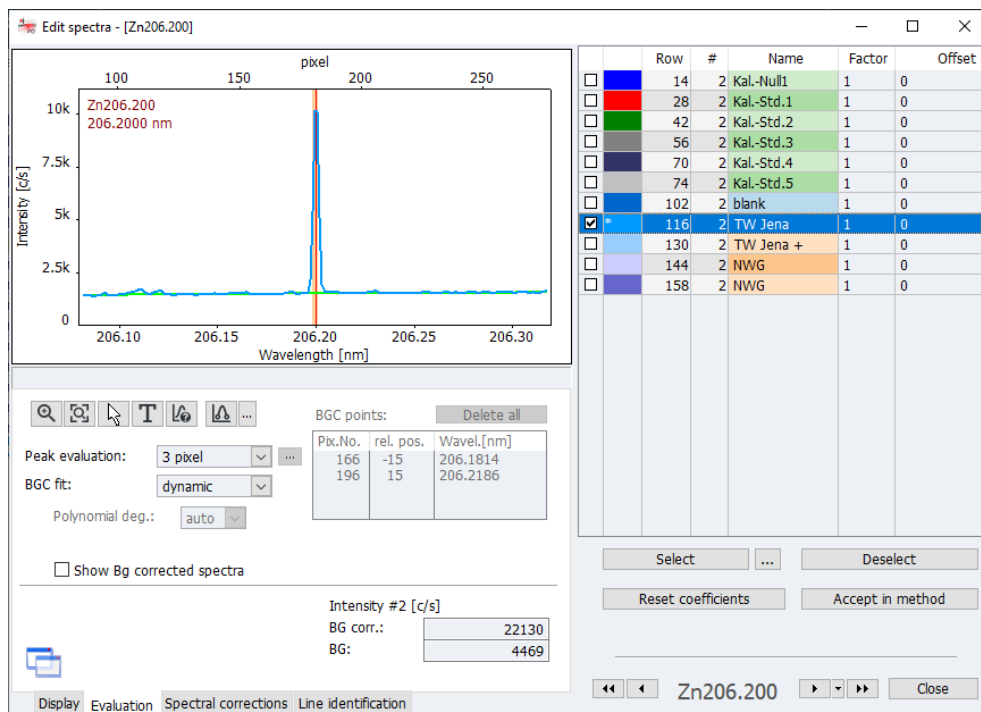
-  指定分析线 (方法 | 谱线 窗口) [▶ 23]
-  后处理分析结果 [▶ 61]
-  查找谱线 - 编辑谱图 | 分析线识别 窗口 [▶ 76]

6.12.2 评估峰值并确定背景校正 -编辑谱图 | 处理 窗口

本底校正法可以补偿连续本底辐射引起的分析线周围宽光谱范围内的强度波动。在分析线两侧选择像素（背景校正点），通过这些点进行回归计算，并将回归图用于背景校正。

在选择背景校正点的静态方法中，点是手动设置的，回归图的多项式系数也是独立确定的。在动态方法中，回归图使用 ABC 算法（ABD = 自动基线校正）自动计算。

不连续的背景干扰，例如由于谱线与矩阵元素重叠造成的干扰，可借助校正光谱将其最小化。



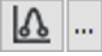
The screenshot shows the 'Edit spectra' window for Zn206.200. The main plot displays Intensity [c/s] vs Wavelength [nm] with a peak at 206.2000 nm. The background is corrected using a dynamic fit. The table on the right lists calibration standards:

Row	#	Name	Factor	Offset
<input type="checkbox"/>	14	2 Kal.-Null1	1	0
<input type="checkbox"/>	28	2 Kal.-Std.1	1	0
<input type="checkbox"/>	42	2 Kal.-Std.2	1	0
<input type="checkbox"/>	56	2 Kal.-Std.3	1	0
<input type="checkbox"/>	70	2 Kal.-Std.4	1	0
<input type="checkbox"/>	74	2 Kal.-Std.5	1	0
<input type="checkbox"/>	102	2 blank	1	0
<input checked="" type="checkbox"/>	116	2 TW Jena	1	0
<input type="checkbox"/>	130	2 TW Jena +	1	0
<input type="checkbox"/>	144	2 NWG	1	0
<input type="checkbox"/>	158	2 NWG	1	0

Below the table, there are buttons for 'Select', 'Deselect', 'Reset coefficients', and 'Accept in method'. The bottom status bar shows 'Zn206.200' and 'Close'.

用于峰值分析和背景校正的元
素概览



光谱视图的按钮、某些值的输出和样本单值的选择已在 **编辑光谱 | 显示 窗口** 一节中进行了说明。

选项/ 按钮	描述
峰值评估	<p>设置峰值评估的像素数。</p> <p>1 测量信号只在主峰所在的像素上确定。</p> <p>值 > 1 确定测量信号的像素数。 像素的单个信号被累加。因此，结果大于最大峰值。具有主峰的像素位于范围的中心。</p> <p>峰高 峰高用于评估。</p> <p>自定义 评估范围由用户定义。这是评估重复数据的首选方案。 点击...后，启用列表中所有用于评估的像素。</p>
BGC模式	<p>选择背景校正类型：</p> <p>动态 背景校正采用数学算法自动计算。此选项无需其他设置。</p> <p>静态 背景校正点是通过鼠标点击光谱手动设置的。此外，还必须选择校正函数的多项式系数。</p>
	<p>对于静态适应，设置或删除背景校正点</p> <p>将鼠标移至光谱图上时，会显示一个十字。点击...打开功能列表：</p> <p>设置背景校正点 单击鼠标将校正点设置为光谱上所需的波长。如果按住鼠标键在范围上移动，就会选择整个范围。</p> <p>删除背景校正点 单击已选定的点会删除相应的背景修正点。拖动鼠标即可删除范围。</p> <p>删除所有背景校正点 删除所有选定点</p>
BGC点 删除所有	删除所有手动设置的背景校正点
表	显示手动设置的背景校正点
非线性校正	<p>选择背景校正图形回归的多项式系数</p> <p>使用自动选项时，将自动选择回归。</p>
显示背景校正光谱	<p>显示背景校正光谱</p> <p>从样本光谱中减去经过调整的背景（绿线）。背景就相当于零谱线。</p>

将数据传输到方法

单击**接受方法**将所选线路的峰值评估和背景校正设置转移到当前测量方法。数据也会在**处理 标签页**的方法窗口中更改。

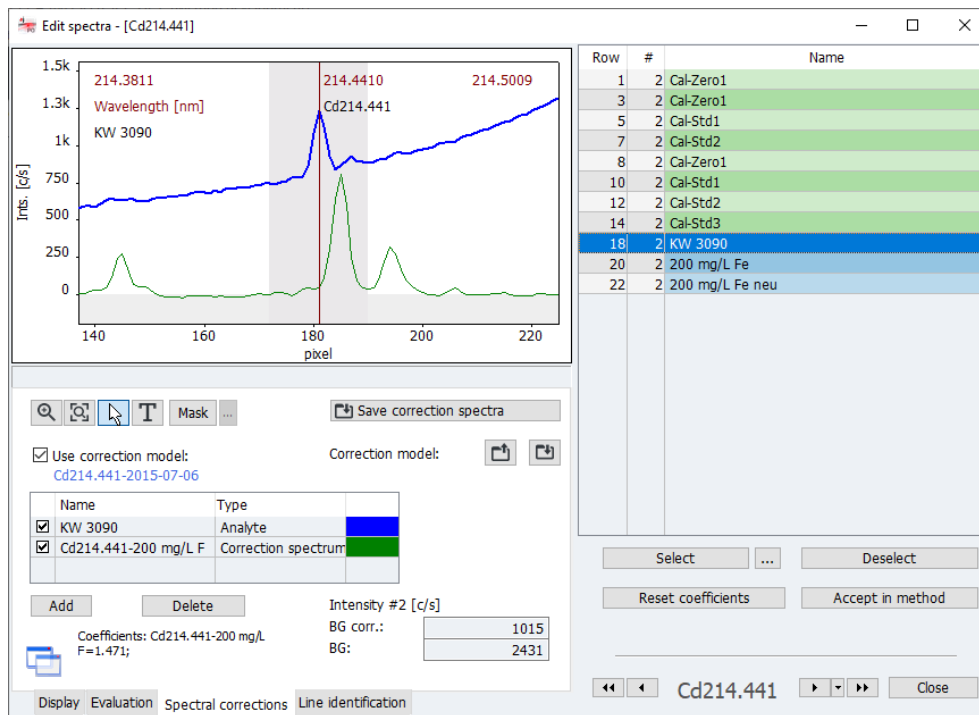
另见



-  消除光谱干扰 - 编辑谱图 | 光谱校正 窗口 [▶ 75]
-  显示光谱 - 编辑谱图 / 显示 窗口 [▶ 70]

6.12.3 消除光谱干扰 – 编辑谱图 | 光谱校正 窗口

在例行程序中，尝试选择无干扰和/或背景易于校正的谱线进行分析。如果无法做到这一点，可以使用校正光谱来消除不连续的干扰，例如，由谱线与一个或多个矩阵元素重叠造成的干扰。矩阵的校正光谱各自组合在一个模型中，然后可以与该方法中的谱线联系起来。

编辑谱图 | 光谱校正 窗口中提供了保存单个校正光谱和组合校正模型的功能。



选项/按钮	描述
保存校正谱图	将矩阵纯成分的光谱保存为校正光谱
用户校正模型	如果启用，校正模型将应用于被分析物
校正模型	 保存当前校正模型  加载现有校正模型

谱线表列出了模型中使用的分析物和校正光谱。启用复选框后，图表中将显示单个光谱。通过添加 将更多光谱添加到修正模型中。使用 删除 会从模型中删除用鼠标选择的频谱。

线表中的 **i** 注意！所有校正光谱都将用于模型计算，与是否启用显示复选框无关。如果要排除校正频谱，则必须将其删除。

6.12.3.1 创建光谱校正模型

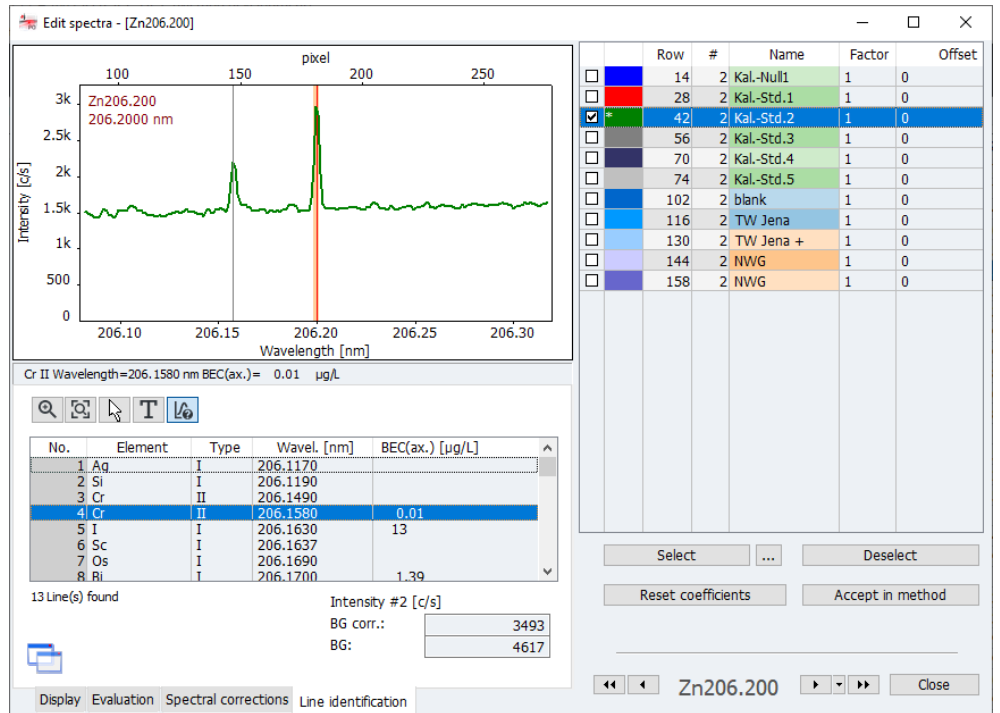
要为分析线创建和使用校正模型，必须执行以下步骤：

1. 确定可能的干扰。
2. 创建并保存校正光谱。
3. 创建校正模型。
4. 将带有校正模型的分析线参数转移到方法中。

- 步骤 1：识别干扰
- ▶ 创建一个分析方法。
 - ▶ 测量基质中的分析物，并将光谱载入 **编辑谱图**窗口（双击主窗口中的样品行）。
 - ▶ 在 **编辑谱图 | 分析线识别** 窗口中识别可能的干扰线。
- 步骤 2：测量和保存校正光谱
- ▶ 在序列中增加对造成光谱重叠的干扰矩阵成分的测量，并在单元素解决方案中测量这些成分。
备注：
基质成分的浓度不必与样品中的浓度相匹配，但必须至少高到足以使光谱具有清晰的强度值。要进行正确的光谱校正，每次只能测量一种纯物质成分。
 - ▶ 将矩阵分量的频谱载入 **编辑谱图 | 光谱校正** 窗口。
 - ▶ 单击**保存校正谱图**。
✓ 用于保存校正光谱的数据库窗口打开。
 - ▶ 使用 **保存发送名称**并完成流程。
 - ▶ 以同样的方式保存其他矩阵成分的光谱。
- 步骤 3：创建校正模型
- ▶ 再次加载基质中分析物的光谱。
 - ▶ 选中 **用户校正模型** 复选框。
 - ▶ 单击**添加**打开已保存校正光谱的选择。
 - ▶ 在列表中选择一个校正频谱，然后单击**载入**。
 - ▶ 以这种方式添加所有校正光谱。
 - ▶ 在光谱视图中检查生成的样本光谱是否没有重叠。
 - ▶ 使用 **标记** 按钮，您可以按住鼠标键屏蔽不包括在修正模型计算中的范围。默认情况下，分析线区域（± 9 像素）已被屏蔽。如果没有纯物质可供记录，而这些污染物可能以不同的比例存在，则可能有必要遮蔽更大的范围。
 - ▶ 要保存修正模型，请单击  并为模型命名。用**保存** 结束进程。
- 步骤 4：将带有校正模型的分析线转移到方法中
- ▶ 使用 **接受方法**将修正模型的分析线参数转移到当前方法。
✓ 在**方法 | 评估** 窗口中，分析线在**校正** 列中用**LSM**（最小平方模型）标识。
- 保存方法后，今后的测量将使用该方法 and 创建的校正模型进行。已完成的测量可使用新方法版本重新处理，无需重复测量。
- 光谱校正模型和校正光谱与结果数据一起保存。如果将结果数据传输到另一台尚未保存校正模型的计算机上，则会在查询后导入模型。

6.12.3.2 查找谱线 - 编辑谱图 | 分析线识别 窗口

在**编辑谱图 | 分析线识别**窗口中，您可以根据谱线数据库识别测量光谱中的谱线。

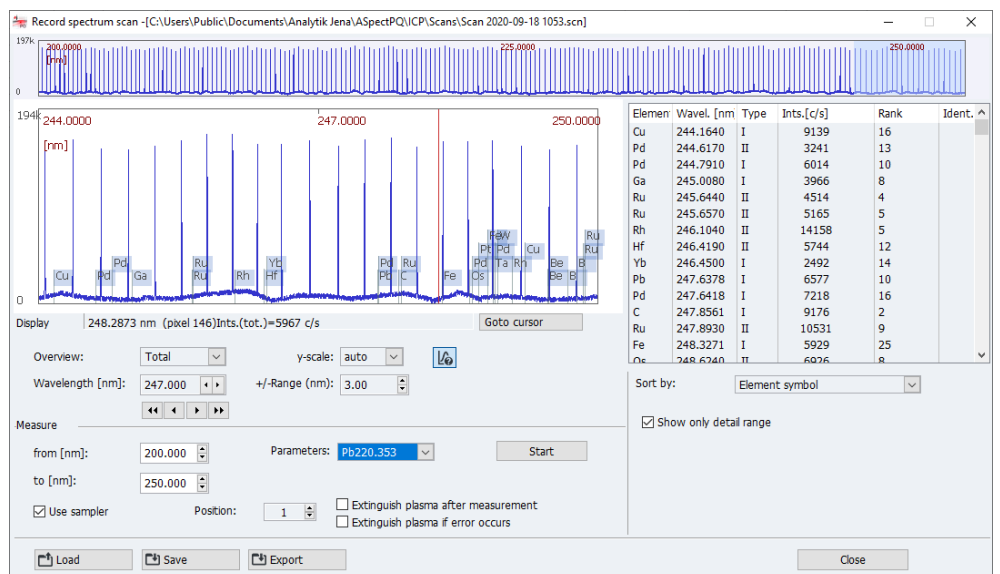


在光谱下方的表格中，显示了光谱部分确定的所有谱线。

- ▶ 启用按钮
- ▶ 单击光谱中感兴趣的峰值。
最近的线显示在光谱下方，并在表格中突出显示。
- ▶ 反之，您也可以在表格中选择一行，然后显示在光谱中。

6.13 记录光谱概览

通过方法开发 | 浏览谱图菜单项，您可以记录指定波长范围内的概览光谱。




- ▶ 选择方法开发 | 浏览谱图 菜单项。
- ▶ 在测量 区域输入所需的波长范围 (从/到)。

- ▶ 如果激活了一种方法，则可以选择该方法中某一行的参数进行频谱扫描。如果没有加载方法，则使用预设参数。
- ▶ 准备样品。如果要使用自动取样器，请激活**启用自动进样器**选项，并选择样品在自动取样器上的位置。
- ▶ 单击 **开始**。
开始扫描。扫描完成后，窗口上部将显示光谱概览。
- ▶ 如果单击概览谱图中的某个部分，图形中就会显示所选谱线的详细区域。您可以在 **+/-范围**中设置细节区域的宽度。
- ▶ 找到的线路显示在右侧的表格中。您可以使用 **仅显示详细的范围**选项将显示范围限制在所显示的光谱范围内。

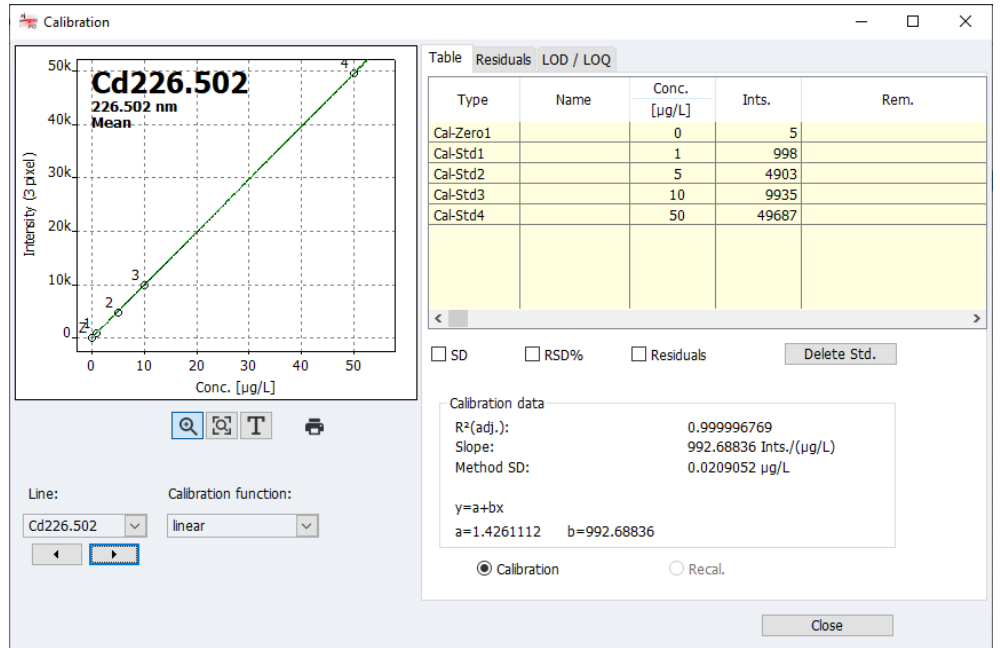
7 校准

校准在测量过程中根据序列中选择的选项进行。测量后可显示和编辑校准曲线和功能。

- ▶ 单击图标栏中的  打开校正窗口。
- 或者，双击计算标准曲线序列行，或选择方法开发|校正菜单项。

校正窗口

校正窗口显示根据图形参数计算得出的校准曲线。



该窗口包含序列中定义的每条分析线：

- 校准曲线图
- 校准表
- 参数
- 余值
- 检测限 (LOD) 和定量限 (LOQ)

选择谱线

在分析线列表框中选择校准视图的分析线。使用列表下方的箭头键在各谱线显示之间切换。

选择校准功能

在校正方程列表中选择校准曲线的可能回归计算：

校准选项	描述
线性	校准函数的线性级数 $y = a + bx$
非线性比例方程	有理函数描述的校准函数的非线性级数 $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$
非线性二次方程	二次函数描述的校准函数的非线性级数 $y = a + bx + cx^2$

校准选项	描述
自动选择	为进行校准，分别计算了线性和非线性函数。然后进行曼德尔检验，比较残差平方和。如果非线性函数的总和明显低于线性函数的总和，则将选择非线性校准曲线。否则，将使用线性校准曲线。在选项 校正 窗口中选择非线性函数。默认设置为断裂比功能。

另见

📖 校准和空白校正的常规设置 [▶ 121]

7.1 校准曲线图

在图表中显示测量点、计算校准曲线和残差。测量点上的数字与校正表标签上使用的数字一致。校准零点已用 Z (零) 标识。

颜色标记

测量点的标记方式如下：

颜色	意义
黑色	正常测量点
浅灰色	删除/离群值 (不包括在计算中)
蓝色	疑似离群值 (纳入计算)

曲线也以彩色突出显示：

图形颜色	意义
黑色	校准曲线在有效校准范围内
蓝色	校准曲线超出有效校准范围
绿色	有效校准范围内预报范围的下限和上限
浅灰色	预报范围的下限和上限超出有效校准范围

关于预后或置信区间的说明


预后范围的位置取决于所选择的统计确定性。它是校准 "质量" 的衡量标准，分析样本测量的统计确定性最终也取决于此。此外，预报范围还可用于识别校准点中的可疑异常值。统计确定性在 方法 | 统计 窗口中选择。在选项 | 校正 窗口中，您可以选择显示预报或置信区间。

放大校准曲线

点击  后，按住鼠标键可放大图形区域。 再次逆转放大。

插入备注

可在图表中插入备注文本字段。

- ▶ 点击 。
- ▶ 按住鼠标左键，将文本字段的边框拖到图形上。
- ▶ 在打开的输入窗口中，点击 **字体** 选择字体。
- ▶ 输入文本并点击 **OK**。
 - ✓ 文字显示在图表上。

打印校准曲线

点击  后，校准曲线和校准数据将输出到打印机。

另见

- 📖 校准和空白校正的常规设置 [▶ 121]
- 📖 指定统计分析 (方法 | 统计 窗口) [▶ 39]
- 📖 打印分析结果 [▶ 103]

7.2 显示校准结果

校准结果显示在**校正**窗口右侧的三个选项卡上。

另见

■ 校准和空白校正的常规设置 [▶ 121]

7.2.1 校准 – 校正表 选项卡

在**校正**窗口中，标准物质的值对（计算浓度/测量值）显示在**校正表**标签上。

如果对标准品进行了多次测量，并在方法中设置了统计分析选项，则可以通过启用相应的复选框，额外输出标准偏差 (SD) 和相对标准偏差 (RSD%) 或范围 (R²相关系数) 和相对范围 (R²相关系数%)。

要从计算中排除单个校准标准，请用鼠标单击表格中的标准，然后单击**删除标准**。

测量仅标记为已删除，可随时重新激活。

在测量值表格下显示校准数据，前提是这些数据可以进行有意义的计算：

参数	意义
R ² 相关系数	测定系数
斜率	校准曲线斜率
方法标准偏差	标准差方法
BEC	BEC 值（本底等效浓度）是分析物产生与本底等效强度的浓度。数值越低，灵敏度越高。

7.2.2 校准 – 残差 选项卡

在**校正**窗口中，**残差**选项卡上的图表将显示校准点与计算校准曲线的偏差以及预测带的极限。

7.2.3 校准 – LOD/ LOQ 选项卡

在**校正**窗口中，ICP-OES 设备的检测限和定量限显示在**LOD/LOQ**标签上。这些限值根据当前校准结果计算得出。在此区域，只有在设备已经校准的情况下，才会显示空白方法和校准曲线方法的值。

参数	意义
检出限	以确定的统计确定性检测出的待分析元素的重量（浓度）。
定量限	在规定的置信度下可确定的待分析元素的最小重量（浓度）。
SD空白(DL)	仅适用于空白值方法 空白 (IDL 样品) 的测量标准差

使用 **计算** 开始计算检出限和定量限。

校准曲线法

根据校准曲线法计算检出限和定量限需要线性校准曲线。校准应在较低浓度范围内进行。对计算结果至关重要的校准参数包括以下内容：

- 校准点的数量和位置
- 每个标准的重复测量次数
- 回归的质量
- 校准曲线斜率
- 相对统计确定性（概率水平）

只有在较低浓度范围内进行校准时，校准曲线法获得的值才有用。

空白法

在样品测量中确定空白样的标准差。为此，空白测量 (QC空白DL)被纳入序列。

空白法的计算规则如下：

- 测量空白 11 次。
- 根据获得的值，确定空白的绝对标准偏差SD。
- 以下公式适用于检测和定量限：

检测限 (LOD)

$$LOD = 3 * SD(\text{校准曲线斜率})$$

定量限 (LOQ)

$$LOQ = 9 * SD / (\text{校准曲线斜率})$$

另见

☰ 按顺序指定测量和操作 [▶ 50]

7.2.4 校准 – LOD/ LOQ 选项卡

在校正窗口中，ICP-OES 设备的检测限和定量限显示在LOD/LOQ 标签上。这些限值根据当前校准结果计算得出。在此区域，只有在设备已经校准的情况下，才会显示空白方法和校准曲线方法的值。

参数	意义
检出限	以确定的统计确定性检测出的待分析元素的重量（浓度）。
定量限	在规定的置信度下可确定的待分析元素的最小重量（浓度）。
SD空白 (DL)	仅适用于空白值方法 空白 (IDL 样品) 的测量标准差

使用 **计算** 开始计算检出限和定量限。

校准曲线法

根据校准曲线法计算检出限和定量限需要线性校准曲线。校准应在较低浓度范围内进行。对计算结果至关重要的校准参数包括以下内容：

- 校准点的数量和位置
- 每个标准的重复测量次数
- 回归的质量
- 校准曲线斜率
- 相对统计确定性（概率水平）

只有在较低浓度范围内进行校准时，校准曲线法获得的值才有用。

空白法

在样品测量中确定空白样的标准差。为此，空白测量 (QC空白DL)被纳入序列。

空白法的计算规则如下：

- 测量空白 11 次。
- 根据获得的值，确定空白的绝对标准偏差SD。
- 以下公式适用于检测和定量限：

检测限 (LOD)

$$LOD = 3 * SD(\text{校准曲线斜率})$$

定量限 (LOQ)

$$LOQ = 9 * SD / (\text{校准曲线斜率})$$

另见

☰ 按顺序指定测量和操作 [▶ 50]

7.3 编辑校准曲线

您可以在**校正**窗口中编辑现有校准曲线，方法如下：

- 更改使用的校准功能
- 启用/禁用标准
- 更换测量标准

要更改校准功能，请从**校正方程**列表框中选择一个新型号。

要从计算中排除某个标准，请在**校正表**选项卡上选择该标准，然后点击**删除标准**。测量仅标记为已删除，可随时重新激活。

当您重新处理结果时，修改后的校准参数将应用于结果。为此，请选择**常规分析 | 重新处理结果**菜单项或单击工具栏中的。

还可以再次测量标准，并对结果进行再处理。

另见

- 📖 后处理分析结果 [▶ 61]


8 质量控制

质量控制功能用于在较长时间内监测方法的测量结果。为此，为一种方法定义了不同类型的特定质控样本，并将其纳入序列中。

评估结果以质量控制图（QC 图表）的形式呈现，并与方法一起保存。每次加载方法后，都会提供质量控制图，并在下一次开始测量时更新。

质控样本的类型及其参数在 **方法 | QCS** 窗口和质控样本积分序列中定义。

您可以在**质控QC**窗口中查看已加载（活动）方法的 QC 图表。在这里，您还可以定义 QC 图表的参数和配置。

- ▶ 单击图标栏中的  打开**质控QC**窗口，或选择**方法开发 | 质控QC**菜单项。

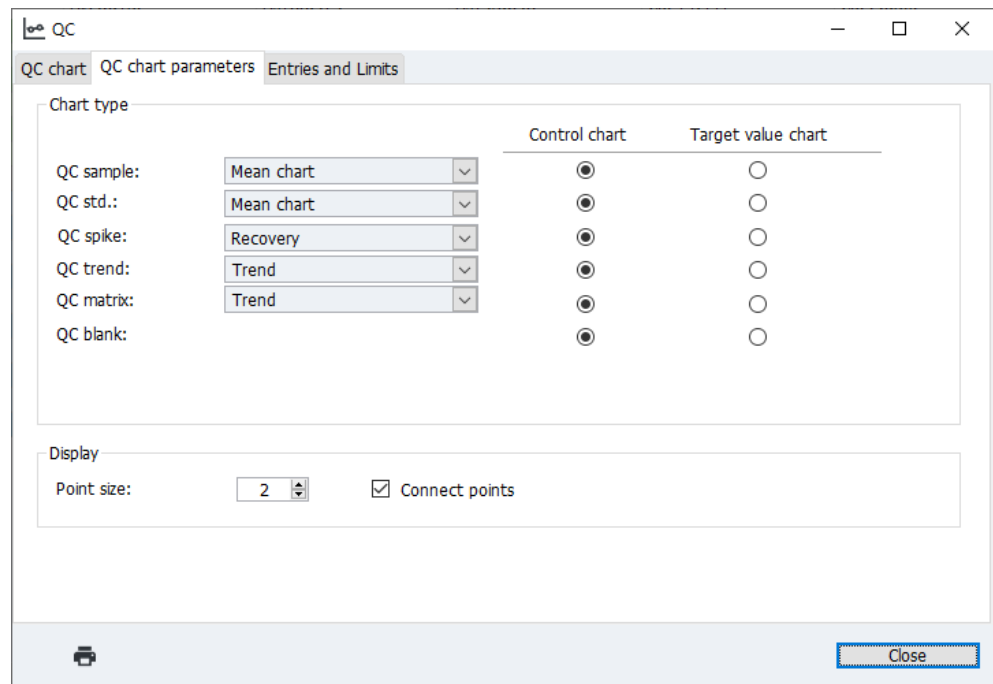
另见

- 📖 指定质量控制 (方法 | QCS 窗口) [▶ 40]
- 📖 按顺序指定测量和操作 [▶ 50]

8.1 质量控制图的参数

QC 图表的类型和显示方式在**质控QC | QC图表参数**窗口中定义。

质控QC | QC图表参数 窗口



质控样本类型和评估

针对不同的质控样本类型，可选择以下评估方法：

质控样本类型	质量控制评估类型
QC样品	平均值图表
QC标准	平均值图表(标称值) – 不用于目标值图表 回收率
QC加标	回收率
QC趋势	趋势
QC基体	范围 – 不用于目标值图表

质控样本类型	质量控制评估类型
	精度 - 不用于目标值图表
QC空白	未提供选择。显示空白的强度。

对于 **控制图表** 图表类型（过程控制图），目标参数以及控制 (K) 和警告 (W) 限值是根据前一时期的平均值和散点值确定的。对于 **目标值图表** 图表类型，目标值和排除限值是根据质量控制样本的预期值和限值确定的。

显示器

在该字段中，您可以选择图形使用的点的大小，以及各点之间是否需要用线连接。

选项	描述
输入点数量	单个点显示为圆形。选择较大的圆点尺寸。
输入点	用一条线将图形上的点相互连接起来。

8.2 质量控制图的条目和界限

QC 图表的内容在 **质控QC|输入 和 限值** 窗口，并可根据实验室对输入频率的要求进行调整。

The screenshot shows a software window titled "QC" with three tabs: "QC chart", "QC chart parameters", and "Entries and Limits". The "Entries and Limits" tab is active. It contains the following settings:

- Entry scheme:** A dropdown menu set to "all values".
- Control and warning limits for process control charts:** A section with a "Number prep. period" spinner set to 30.
- Exclusion limits for target value charts:** A section with a "Factor" spinner set to 1.00. A note states: "Exclusion limits are calculated from QC limits entered under Method/QCS and the factor."
- Update chart display:** A section with a dropdown menu set to "Accept prep. period, delete remain" and a "Process" button.

At the bottom right of the window is a "Close" button.

选项	描述
输入计划	<p>所有值 输入每次执行的 QC 检查。</p> <p>1值/天 只输入当天的最后一次 QC 检查。</p> <p>2值/天 只输入当天的第一次和最后一次 QC 检查。</p> <p>注意 根据 PC 时钟，一个 "日" 对应一天，即在一天中，QC 图表上的任何先前条目都将被新的 QC 值覆盖；但是，当新的一天开始时，将生成新的条目。</p>

选项	描述
预备期数	仅限控制图表： 准备期是用于计算控制 (C) 和误差 (E) 限值的质量控制图条目数。准备期总是包含较早的图表条目。如果设置为 0 (无准备期)，则所有输入的质量控制数据都将包含在控制和误差限值的计算中。
目标值图表不包括限值	仅限目标值图表： 排除限值由质量控制样本的指定限值乘以因子 (默认为 1) 计算得出。

更新图表

确定 (几乎) 完整图表的程序。为此，请从列表中选择一个选项：


选项	描述
接受预备期数值, 删除剩余	仅限控制图表： 接受旧图表的准备期，将其应用于新图表，并删除剩余的值。
上一个值 -> 新预备期	仅限控制图表： 最后测量的旧图表值代表新图表的准备期，其他所有值都将从图表中删除。新的测量值将根据新创建的准备期进行评估。
删除所有, 新预备期	所有值都将被删除。 控制图表 仅限：新的测量值将首先填满准备期。

点击 **处理** 即可根据上述选项替换 QC 图表。

8.3 显示质量控制图

QC 图表显示在 **质控QC|QC图表** window 窗口中。方法中定义的每种质控样本类型和指定的每种元素项目都会生成单独的图表。

选项/视图

选项/视图	描述
质控样	在此，选择要显示的质控样本类型。
分析线	在此，选择要显示的元素谱线。
显示值	显示值的个数以及第一个和最后一个显示值的日期。
保存值	当前质量控制图上的条目总数，以及第一个和最后一个值的日期。
X轴(min) / X轴(max)	选择要显示在图表上的起始条目和条目数。
y-轴	输入 Y轴的最大值按最高值缩放。 控制限值 Y轴的最大值被缩放到控制限值或排除限值的范围内。
	打印包含字母数字数据和测量值的质量控制图。

图表区域

颜色/标记	意义
黄色字段	仅控制图：准备期
浅灰色水平线	仅控制图：仅根据准备期 目标值图表计算的平均值：目标值
红色水平线	仅控制图：根据制备期 (3 西格玛) 计算出的控制上限和下限 (C) 仅限目标值图表：上限和下限 (EU、EL) 取决于质控样本的限值
绿色水平线	仅控制图：计算出的警告限 (W；2 西格玛)。
小圆圈	测量点 (黑色：活动入口；灰色：非活动入口)

如果单击图表中的测量值，就会打开一个窗口，显示该测量值的以下信息。

选项	描述
数量	质控系列中测量值的编号
数值	测量值（根据质量控制图的显示类型进行转换）
日期 / 时间	测量时间
操作者	测量时登录的用户
版本	所用方法的版本
删除输入 / 激活输入	选择已删除或重新激活的测量值
添加注释	输入测量点的注释，例如删除的原因

9 控制和监测光谱仪及附件

9.1 光谱仪

仪器 窗口用于测试光谱仪功能和设置光谱仪参数。

可以调整或查看以下数据，并执行以下操作：

- 设备数据
- 显示探测器的读数参数
- 开始测量以优化设备

单击  或使用方法开发 | 仪器 菜单项打开仪器 窗口。

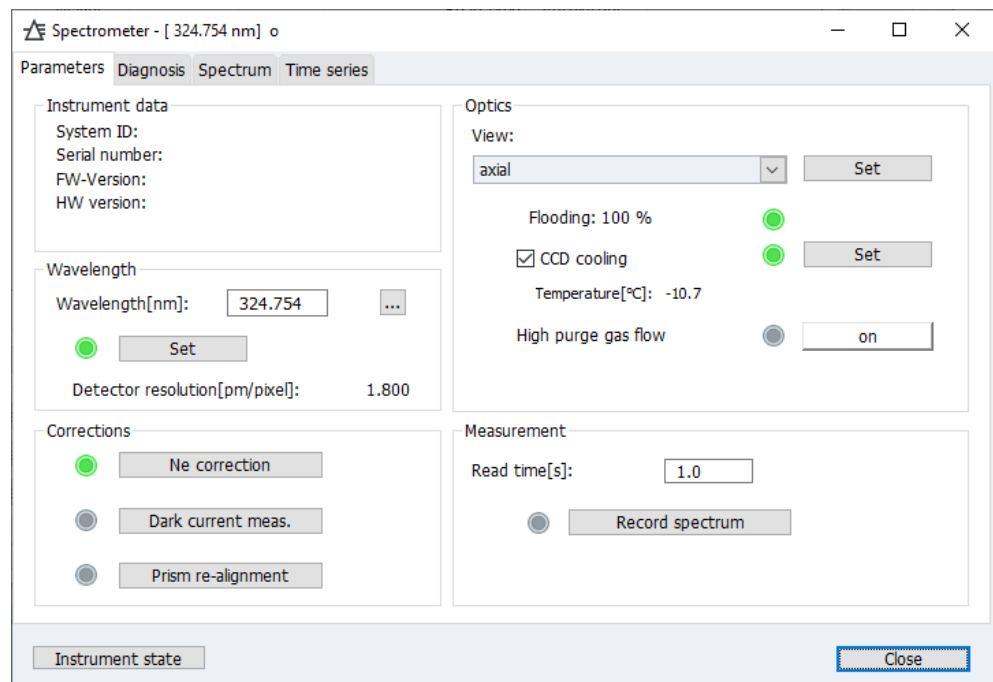
单击仪器状态，显示安全传感器的信息输出图。如果等离子体出现问题，您可以在[这里查看传感器的错误信息](#)。

9.1.1 配置光谱仪参数和测试功能

仪器 | 参数 窗口包含以下功能：

- 检查设备的基本功能
- 开始自动校正光学系统
- 在选定波长处开始测试测量

仪器 | 参数 窗口中的元素




参数	描述
仪器信息	在仪器信息 组中，会显示设备服务所需的各种服务和版本号。
波长	在波长 字段中显示所选波长。 点击选择元素/分析线 窗口中的 ...后，即可调整波长。 点击 设置将光谱仪移动到所选波长。
氖灯校正	对探测器进行波长校准
暗电流测量	校正暗信号
棱镜重校	通过棱镜调整（能量最大值调整）优化探测器上的色散顺序映射。



参数	描述
观测方向	在列表框中选择等离子体的监测方向（轴向 - 从上方，侧向 - 从侧面）
CCD制冷	如果启用复选框，则可通过设置启动 CCD 检测器的冷却。如果禁用复选框，则停止冷却。 等离子体点火时，CCD 冷却系统自动启动。只有在特殊情况下，如自动运行时出现错误信息后，才需要进行手动控制。 在操作温度字段中，将显示 CCD 检测器的当前温度。
高吹扫流量	用增加的氦气流量冲洗光谱仪
测量	要开始对所选波长进行测量，必须在测量中输入总测量周期。 点击记录光谱开始测量。测量时使用等离子体的主要设置。 样品必须手动进样。不使用自动取样器。

测量选定分析线的光谱峰值

在仪器 | 参数 窗口中选定的分析线处开始测试测量。

- ▶ 点燃等离子体
- ▶ 在 波长 区域使用  打开 选择元素/分析线 窗口并设置所需的行。或者，直接在 波长 输入字段中输入数值。
- ▶ 使用设置 将光谱仪移动到所需波长处。设置成功后，设置旁边的标记会变成绿色。
- ▶ 使用暗电流测量 开始暗电流测量。
- ▶ 对于下列测量，请选择视图方向 轴向 或者 侧向。
- ▶ Set the 读数时间。
- ▶ 提供样品并将进气管浸入样品中。
- ▶ 等待一段时间，以实现样品的稳定雾化。使用 记录光谱开始测量。
 - ✓ 测量开始，测量结果显示在编辑谱图 窗口中。

另见

-  在谱线表中插入分析线 [▶ 24]
-  显示和编辑强度光谱 [▶ 70]

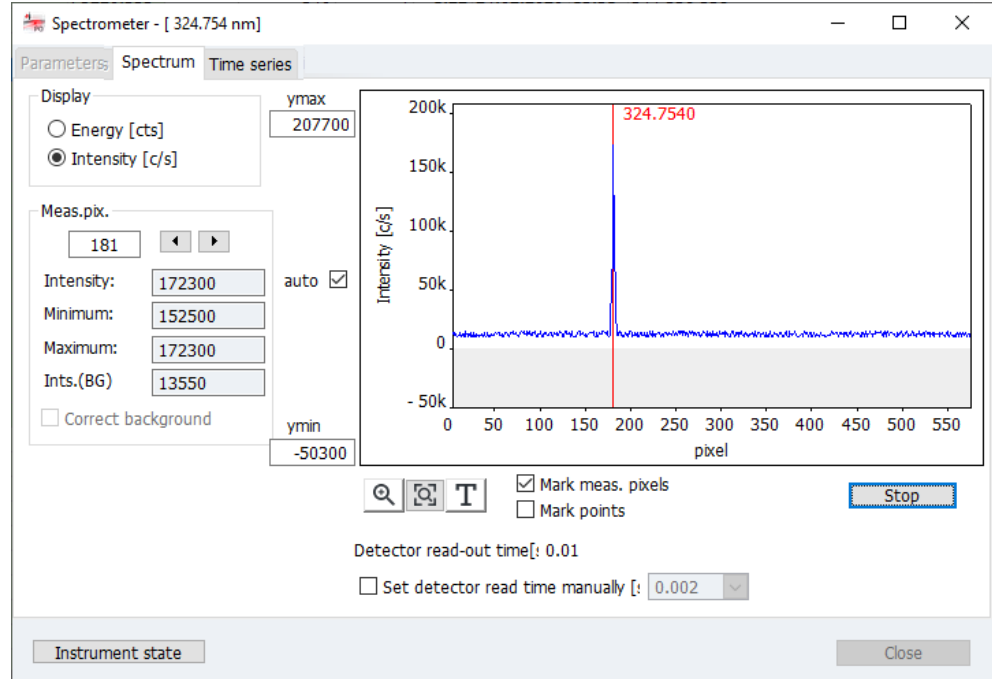
9.1.2 设备参数诊断



服务相关参数显示在 仪器 | 诊断 窗口中。

9.1.3 进行连续峰值测量

在 仪器 | 光谱 窗口，开始对指定波长进行连续测量。连续测量结果用于设备运行期间的优化。

图形显示和数字分析



选项	描述
显示	显示频谱的选项。 能量 显示能谱，测量单位：cts（计数） 为了获得噪声尽可能小的测量结果，探测器的积分时间选择在能量最大值约为 30000 cts 时。 强度 以时间单位表示能量，测量单位：cts/s（每秒计数） 无论积分时间长短，都可以根据强度比较不同的峰值。
测量像素	选择其值持续显示在 能量 或 强度 字段中的像素 最大 和 最小 字段显示连续测量的相应结果。
标记测量像素	在图表中用垂直红线标出一组测量像素
标记点	用点标记图中每个像素的测量值
手动设定探测器读数时间	从列表框中选择 CCD 探测器的读出时间 读出时间越长，能量值越高。 CCD 探测器的读出时间默认为 0.01 秒。
图形缩放	直接在坐标轴的输入框中输入起点和终点的值。 或者，在启用缩放模式  后，按住鼠标左键选择要显示的范围。 启用 自动 选项或单击  反向缩放。

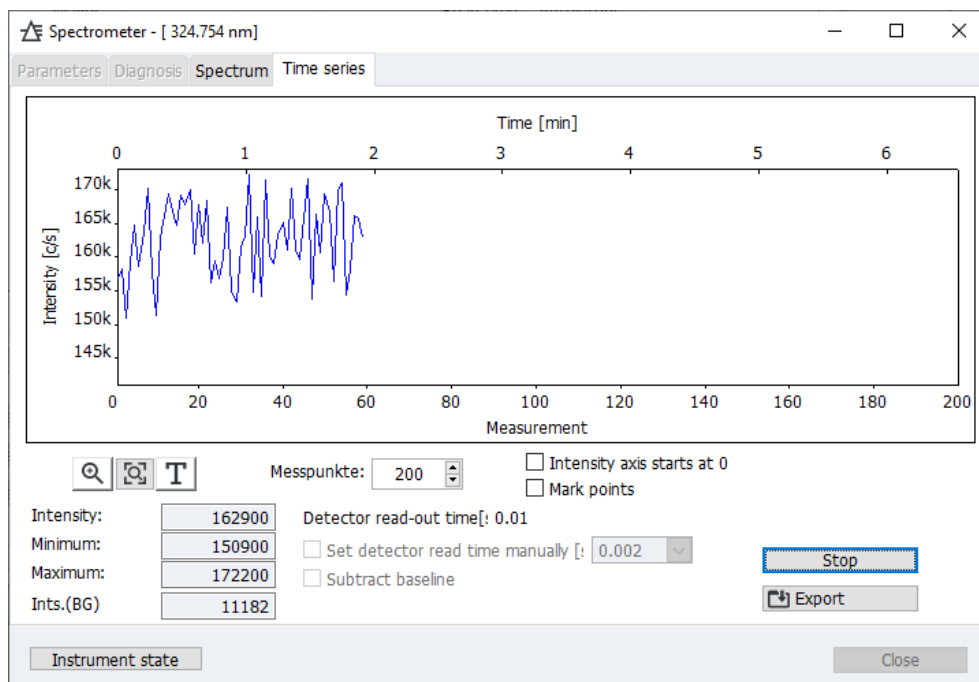
开始峰值测量

- ▶ 在 **仪器 | 参数** 窗口中设置波长和观察方向。
- ▶ 切换到**光谱**选项卡。
- ▶ 点击 **开始**开始连续测量。

测量值与设置的参数一起记录，并不断重复，直至按下**停止**键。

9.1.4 记录信号进程

在仪器 | 时间序列 窗口中记录当前在光谱仪中设置的波长在选定测量点数量上的强度信号变化。



除图形显示外，还输出当前强度的数字值、达到的最大和最小强度值以及背景强度。

您可以设置以下参数来记录信号进程：

选项	描述
标尺	启用缩放模式 后，按住鼠标左键选择要显示的范围 点击 扭转缩放比例
强度轴从0开始	不要自动设置 Y 轴的缩放比例，而是让它从 "0" 开始
测量点	从列表中选择测量点数量
标记点	在图表中用点标记测量点
手动设定检测器读数时间	从列表框中选择 CCD 检测器的读出时间
扣除基线	显示背景校正后的强度值

9.2 等离子体

等离子体 窗口包含以下功能：

- 点燃等离子体/熄灭等离子体
- 控制高频发生器
- 设置气体流量
- 分析仪泵的控制
- 调整传输光学器件
- 自动优化雾化器气体流量和等离子体功率

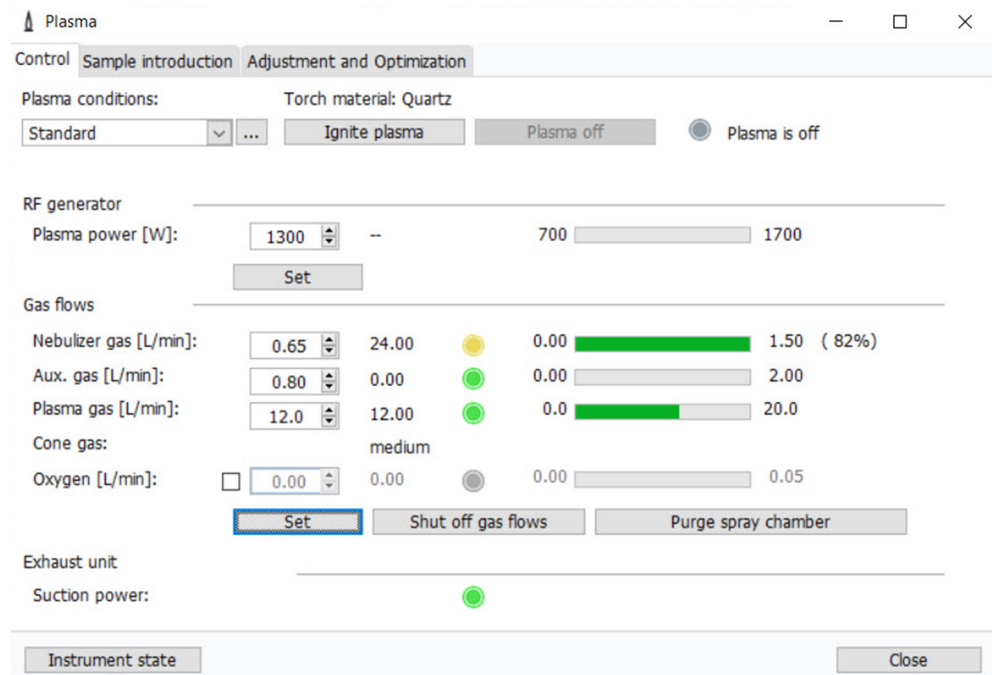
▶ 单击图标栏中的 打开等离子体 窗口，或选择方法开发 | 等离子体 菜单项。

通过 仪器状态 可以显示 ICP-OES 设备安全传感器的信息输出图。如果等离子体出现问题，您可以在这里查看传感器的错误信息。

9.2.1 点燃等离子体并设置等离子体条件

在等离子体|控制 窗口中，您可以点燃/熄灭等离子体，并调整设备中的气体流量。

等离子体|控制 窗口中的功能



选项	描述
等离子体条件	选择等离子体条件（等离子体功率和气体流量）。
点火/熄火	点燃等离子体，并在 ICP-OES 设备准备就绪时熄灭。
RF发生器	设置有效等离子功率。 等离子体功率决定了等离子体温度。发生器电流由固件控制，以达到有效的等离子功率。
气体流量	打开并调节气体流量。 等离子体气 等离子体气沿外管流动，用于产生等离子体。 雾化气 雾化器气体雾化样品，并将样品气溶胶输送到等离子体中。它与雾化器相连。 雾化器气体行中的百分比值表示雾化器的渗透性/清洁度（见下文）。 辅助气 辅助气体将等离子体推离喷射器，并在内管和喷射器之间流动。 尾锥气 锥形气体消除了 "冷" 等离子体尾部，从而消除了等离子体在观测轴向的重组干扰。与此同时，锥体气体还支持锥体冷却。 氧气 氧气可添加到雾化器气体中，作为特定应用的附加气体。在更改氧气流量之前，必须先用气体设置前的复选框激活氧气流量。
关闭气体	关闭所有气体阀门。
吹扫雾化室	启动雾化器气体 1 分钟，以清除喷腔中的空气。这有助于在操作中断后点燃等离子体。 在此期间会显示倒计时。
风量	安全电路会检查所连接的提取电源是否足以保证 ICP-OES 设备的运行。在这种情况下，指示灯亮绿色。

通过 **设置** 按钮，您可以配置 ICP-OES 设备的修改参数（等离子功率和气体流量）。

评估雾化器功能

如果样品颗粒或样品中的高浓度盐堵塞了雾化器，则必须进行清洗。雾化器气体压力增加是雾化器堵塞的一个指标。

将雾化气参数的当前百分比（压力）与安装新的或清洁的雾化器后达到的值进行比较。

如果百分比显著增加（超过原始值的一半），请按照 ICP-OES 设备操作说明书中的说明清洁雾化器，但最迟也要清洁到 75%。

选择等离子条件

等离子体条件 列表包含已保存的不同样品基质的血浆参数，如果已加载方法，则包含方法的特定行参数。

点击 **...** 会打开一个上下文菜单，其中包含管理列表中所选参数的功能：

功能	描述
保存当前等离子体参数	保存配置的等离子条件（等离子功率和气体流量）并将其添加到列表中
删除输入	删除所选条目 标准, 煤油和氢化物技术默认值无法删除。
设置等离子体条件	在 ICP-OES 设备上配置所选项目的等离子参数
拷贝到方法分析线	如果在列表中选择了方法行，则可用 将等离子条件转换为所选谱线的方法参数。
拷贝到所有分析线	如果在列表中选择了方法行，则可用 将等离子体条件转换为所有谱线的方法参数。
以方法默认值设置	将当前等离子体条件保存为新插入方法谱线的默认值（不适用于谱线收藏夹）

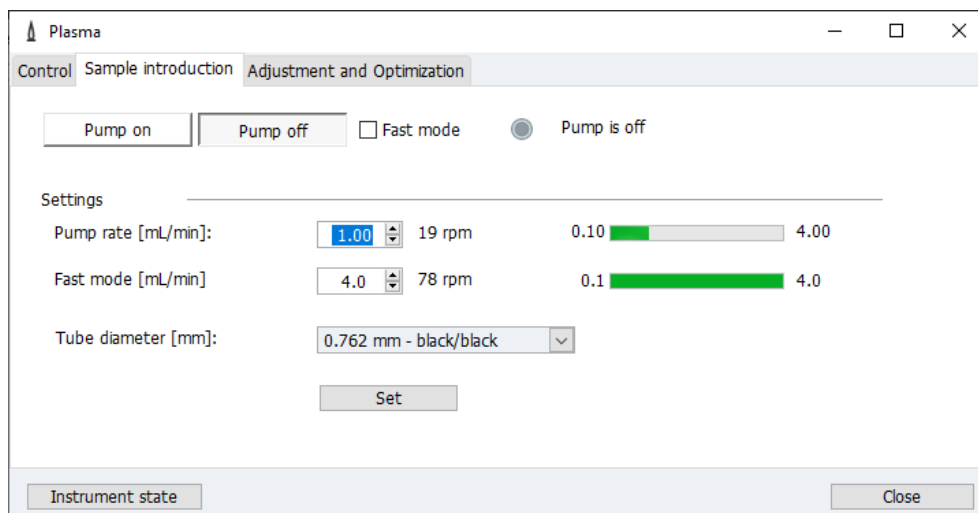
另见

 打开光谱仪并点燃等离子体 [▶ 56]

9.2.2 检查样品入口和泵

在 **等离子体 | 样品传输** 窗口检查 ICP-OES 设备的管泵功能。

等离子体 | 样品传输 窗口中的功能

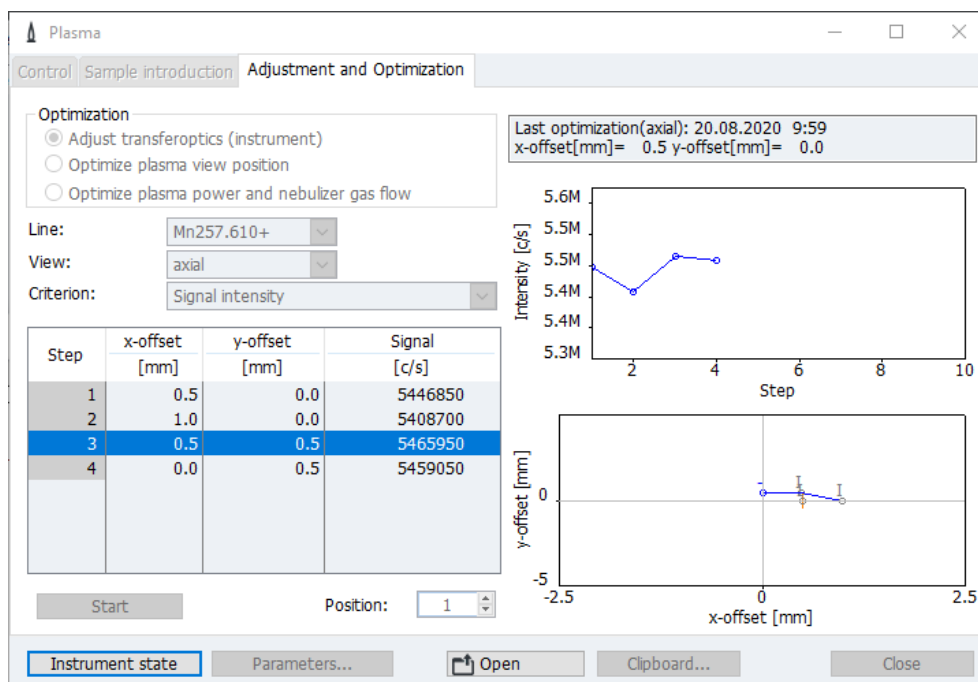


功能/参数	描述
泵开/ 泵关	开关泵。在 ICP-OES 设备启动后的原始状态下，泵处于开启状态。
快泵	手动将泵转入快速模式 该功能可用于手动清洗样品导入系统。 成功吹扫后，必须禁用复选框，以便将泵转回样品输送。
蠕动泵在运行中/泵 停止	泵状态 当前泵速以 RPM（每分钟转数）为单位显示。
泵速	设置测量过程中样品输送的泵速
快泵	为快速模式设置泵速 在快速模式下，更换样品时的传输时间或清洗液到雾化器的传输时间都得到了优化。
管径	选择使用的试管类型 根据泵速和管径信息计算出输送的样品量（泵速）。试管用彩色塞子编码。从列表中选择所用软管的塞子组合。
设置	应用设置

9.2.3 调整和优化等离子体

在等离子体|调整和优化窗口中进行以下调整：

- 将传输光学器件与光谱仪的光轴对准
- 根据该方法计算分析线路的传输光学偏移值
- 优化等离子功率和雾化器气体流量



有两种不同的调整和优化方法，可通过点击 参数进行选择：

方法	描述
详细优化	扫描范围以网格为基础。根据测量点的数量确定强度最高的测量点。 调整是精确的，但由于需要确定大量的测量点，因此需要很长时间。

方法	描述
简单优化	<p>能量最大值是通过迭代确定的。从起始测量点出发，确定附近数值最高的测量点。从这个测量点开始，再次确定能量最高的测量点。这个过程一直持续到找到能量最大值为止。</p> <p>这种方法比网格搜索快，但确定性较低。在等离子体的不同热区，可能会出现多个能量最大值，因此，如果起始点不利，就会发现不正确的能量最大值。</p> <p>对于单工方法 停止规则 必须定义为百分比值。如果连续 3 个值相差不超过该百分比值，则调整结束。</p> <p>如果启用 用优化数值开始，则上次调整/优化的优化参数将用作当前优化的启动值。</p>

在调整传输光学元件（装置）时，以信号强度为标准。

优化标准根据分析线的波长自动配置，但也可手动修改：

条件	分析线的波长范围
信号强度	< 200 纳米
信号/背景	200 至 350 纳米
信号/背景平方根	> 350 纳米

调整光轴（等离子体中心）上的传输光学元件

使用锰溶液对光轴上的传输光学元件进行调整。配制浓度如下的锰溶液用于调整：

监测方向	锰溶液
轴向	1 毫克/升
侧向	10 毫克/升

- ▶ 启用 **调整光路方向 (仪器)** 选项。
 - ✓ Mn 分析线会自动设置在 **分析线** 列表中。
- ▶ 选择 **参数** 下的调整方法（见上文）。
- ▶ 选择监测方向：

选项	描述
轴向	从上方进行监测
侧向	从侧面监测
衰减 轴向	从上方监测衰减能量
衰减 侧向	监测来自侧面的衰减能量
关闭	在快门关闭的情况下进行监测（用于维修）

- ▶ 将进气管浸入样品中。使用自动进样器时，设置样品架上的位置。
- ▶ 单击 **开始**。
 - ✓ 传输光学元件的调整是自动进行的。调整结束后，将显示新数据。
- ▶ 单击 **OK** 接受新的调整值。

优化主动法分析线的监测位置

等离子体有不同的热量区。在优化过程中，等离子体中的监测点会在分析物信号强度最大的地方进行检测。这些值以 **偏差** 的形式保存在方法中。

- ▶ 在 **分析线** 列表中选择方法中的分析线。
- ▶ 启用 **优化等离子体观测位置** 选项。
 - 有关监测方向的信息会自动从方法中传输，并为优化设置标准（见上文）。
- ▶ 单击 **参数** 后，选择调整方法（见上文）。
- ▶ 将进气管浸入样品中。使用自动进样器时，设置样品架上的位置。

- ▶ 单击**开始**。
 - ✓ 监测位置的调整是自动进行的。最后显示优化后的偏移值。
 - ▶ 单击**OK**将新偏移值传送到方法中。
- 优化样品的等离子条件
- 确定样品中分析物的监测位置后，就可以优化等离子条件（等离子功率和雾化器气体流量）。
- ▶ 启用**优化等离子体功率和雾化器气体流量**选项。
 - ▶ 在**分析线**列表中选择方法中的分析线。
 - ✓ 有关现有等离子条件的信息将自动从该方法中传输，并为优化设置标准（见上文）。
 - ▶ 选择**设置**下的调整方法（见上文）。
 - ▶ 将进气管浸入样品中。使用自动进样器时，设置样品架上的位置。
 - ▶ 单击**开始**。
 - ✓ 等离子体功率和雾化器气体流量的优化是自动进行的。最后显示优化值。
 - ▶ 通过单击将新值转移到方法中 **OK**

9.3 自动进样器

自动进样器为可选附件。启动 ASpect PQ 程序后，在**快速启动**窗口的初始化过程中会检测到自动取样器。

自动进样器窗口包含以下功能：

- 显示连接的自动取样器类型
- 配置自动取样器
- 调整自动进样器
- 另外冲洗样品通道
- 重新初始化自动取样器
- 进行自检

与分析直接相关的参数（样品架上的装载和清洗步骤）应在方法、序列和样品识别数据（样品 ID）中明确规定。

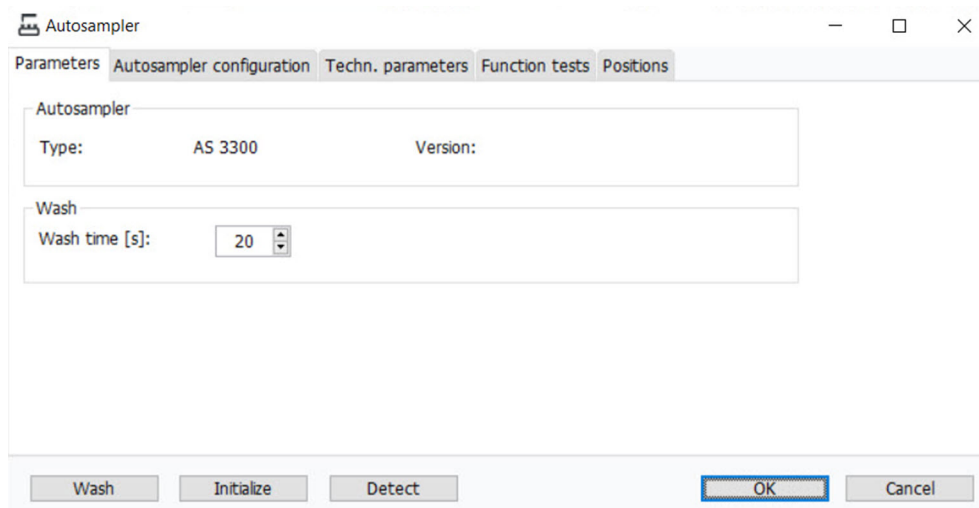
单击工具栏中的或使用**方法开发 | 自动进样器**菜单项，打开**自动进样器**窗口。

- 初始化自动取样器
- 自动取样器通常在电源开关启动时初始化。如果自动取样器因机械撞击等原因导致方向偏离，可能需要重新初始化。这将重新建立自动取样器、ICP-OES 设备和 PC 之间的连接。
- ▶ 单击**初始化**可以在必要时重新初始化自动取样器，而无需重新启动 ASpect PQ 程序。
- 检测自动取样器
- 如果自动取样器在启动 ASpect PQ 后才打开，则必须在程序中登记自动取样器的使用。
- ▶ 为此，请单击**检测**然后单击**初始化**。
- 备注：使用带稀释系统的 Cetac ASX-560 时，**检测**按钮将被隐藏。
- 冲洗样品通道
- ▶ 在**自动进样器 | 参数**窗口中设置**清洗时间**。
洗涤时间的默认值转移自当前方法。
 - ▶ 单击**清洗**。
或者，选择**常规分析 | 清洗**菜单项。
 - ✓ 样品路径（试管-雾化器-喷雾室-转炉）在泵的快速模式下进行指定时间的清洗。

9.3.1 显示连接的自动取样器

在 **自动进样器 | 参数** 窗口中将显示或配置以下参数：

- 自动进样器类型
- 洗涤参数



自动进样器类型

自动进样器 | 参数 窗口显示初始化期间检测到的自动取样器类型和自动取样器固件版本。

洗涤参数

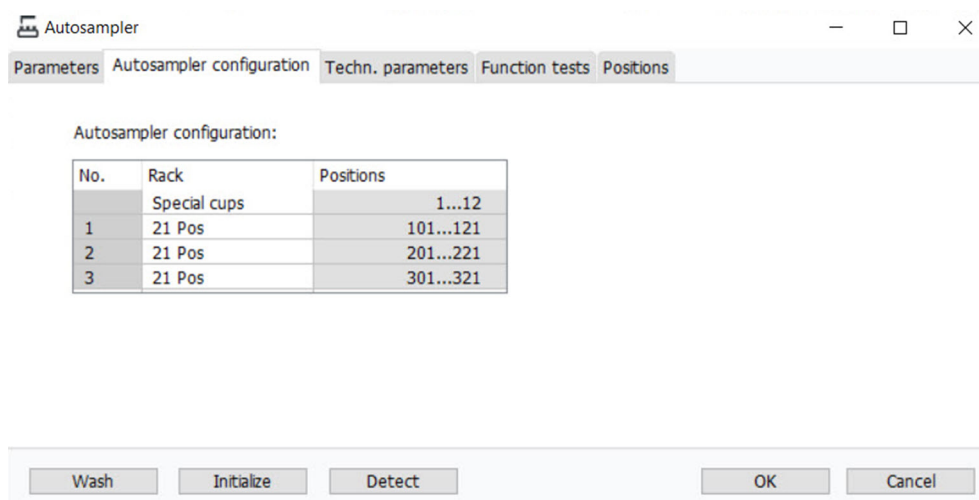
从样品杯到焰炬的样品路径的系统清洗时间从当前方法转移过来。相反，**自动进样器 | 参数** 窗口中的更改不会影响方法中的条目。在使用自动进样器进行系统清洗时，从自动进样器的清洗杯中取出清洗液。

另见

■ 样本引入的配置 (方法 | 样品传输 窗口) [▶ 30]

9.3.2 配置自动取样器架

在 **自动进样器 | 进样器配置** 窗口中配置自动取样器上使用的样品架。

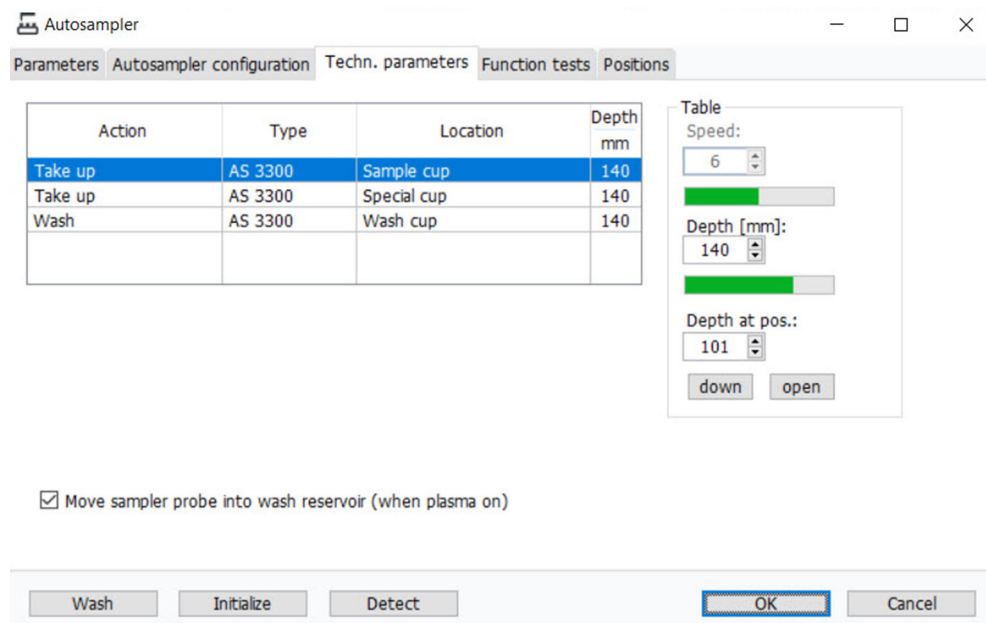


根据所使用的自动取样器，可以放置不同的样品架和特殊样品架。

选择表格中的样品架。对于可变采样架，提供三位数字作为位置编号。第一个数字表示自动取样器上样品架的位置，另外两个数字表示样品架上的位置。例如，数字 113 表示样品架 1 上的 13 号位置。可变样品架 1 位于自动进样器上洗杯的前面，其后是样品架 2 和 3。

9.3.3 自动取样器的技术参数

在自动进样器 | 技术参数 窗口中指定插管浸入各种杯子的深度。



对于不同类型的杯子，需要考虑以下操作：

杯子	动作
样品杯	通过管泵吸取样品。
特殊杯	通过管泵吸取特殊样本。
清洗杯	冲洗插管和进气道。

行动表的要素

选项	描述
动作	可用的操作选项： 吸取 从杯子中取出样品，送往火炬。 清洗 取洗涤液。
类型	连接的自动取样器类型
位数	给定行动所指的杯子
深度	插管浸没深度（毫米

表格分区

使用校正表 区域中的控件更改所选表格行的参数。

选项	描述
深度	设置插管的浸入深度 浸入深度是从自动进样器臂的最高位置开始测量的。
位置深度	测量浸入深度的特制或样品杯的位置。

选项	描述
设置	如果激活，自动取样器臂将移动到需要调整定位的杯子上。有样品杯和特殊杯时，这是在以下情况下选择的位置 位置深度 如果不激活，则在自动进样器臂不移动到杯子上方的情况下改变浸入深度和速度。

附加选项

如果启用**移动进样针到清洗槽(等离子体点着)**选项，插管将在窗口关闭后自动浸入清洗槽。

仅限 ASX-560：设置清洗泵的速度（级别：0..99）。使用 **设置** 将此值永久保存在自动取样器中。

9.3.4 测试自动取样器功能

在**自动进样器 | 功能测试**窗口中，您可以检查自动取样器是否准备就绪。

自动进样器 | 功能测试 窗口

测试自动取样器的以下功能：

功能	描述
系统状态	检查运行准备状态。 通过 更新 再次检查运行就绪状态。
位置	点击 设置 后，自动取样器将移动到选定位置。 杯号 自动取样器移动到列表中选定的位置。 清洗位 自动取样器移至清洗杯。
进样臂	将自动取样器臂降低到列表框中设置的 深度 位置。
清洗泵	开关清洗泵。

将自动取样器套管移入清洗池 如果启用 **移动进样针到清洗槽(等离子体点着)** 复选框, 则插管将在**自动进样器** 窗口关闭后浸入清洗槽。

9.3.5 在自动取样器上显示样品位置

自动进样器 | 位置 窗口显示当前序列中使用的样本托盘位置。

在显示方面, 可以选择**所有位置**, **只有样品位置** 和**只有特殊位置**。

表格旁边显示了当前所选样品位置的样品架示意图。可以在图表和表格中选择采样位置。

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 稀释功能

将 Cetac ASX 560 自动进样器与 Cetac SDX_{HPLD} 一起使用时, 样品稀释的参数显示在**自动进样器/稀释** 窗口中。

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

配置

设置部分中的参数是预设设置，可为样品稀释提供良好的结果。在方法优化过程中，您可以在设置范围内更改参数。

计算内标时考虑稀释

如果启用该复选框，软件在计算内标时将考虑稀释度。

- 如果在原始样品中加入内标，样品中的内标也会被稀释。启用该复选框可在计算中考虑稀释。
- 如果您还将内标物添加到稀释液中，或通过内标物试剂盒将其添加到样品溶液中，则内标物不会被稀释。在这种情况下，请勿启用该复选框。
- 即使使用氩作为内标，也不要启用此复选框。

服务

在维修列表中，您可以选择 SDX_{HPLD} 上的服务功能，并使用开始执行这些功能：

选项	功能
主注射器和旋转	用注射泵将稀释液泵入系统并分配到涡流器中。这样可以清除系统中的气泡并调节涡流器。
移动注射器到拆卸位	如果需要拆卸注射泵进行维护，则必须首先使用此功能将注射器柱塞移到正确位置。
拆卸清洗后 ASXpress+ 重新复位	仅当安装了 ASXpress+ 时： 安装或维护后初始化 ASXpress+。

9.4 循环冷却器

在冷却回路中，ICP-OES 设备中的一个阀门用于打开和关闭回路。因此，更换冷却水需要一个向导。



注意

请遵守 ICP-OES 设备操作说明书中有关维护循环冷却器和准备冷却水的说明。

- ▶ 选择**其他 | 维护**菜单项。
- ▶ 在**维护**窗口中，单击**更换**按照向导的指示操作。开始更换冷却液。
- ▶ 按照向导的指示操作。

10 数据管理

本节包含以下信息

- 打印选项
- 方法和序列管理
- 成果数据管理
- 浓度和含量单位的定义
- 管理常用储备溶液和质控样本的数据

10.1 ASpect PQ 中的打印功能

在数据输出方面，ASpect PQ 有多种输出格式可供选择。除输出到打印机外，还可将数据导出为 Excel、PDF、HTML、XML 或文本格式，或保存为位图或可缩放图形。

分析结果的输出和窗口内容（如方法或序列窗口）均使用报告模板。默认安装了一套报告模板。如有需要，可使用报告设计器“报告-/打印模块列表和标签”对这些表单进行单独调整


10.1.1 打印分析结果

ASpect PQ 提供多种打印结果数据的选项：

- 打印完整记录。完整的分析记录包括方法参数、校准和分析结果以及单个样本值（统计运行）。可以在主窗口中打印当前结果和保存数据的报告。
- 打印当前结果。在该打印输出中，只打印主窗口的数据。您可以在完整打印输出和紧凑打印输出之间进行选择。
- 打印 **综述**选项卡中的选定数据。对于这种打印输出，您可以在对话框中选择分析线和结果。

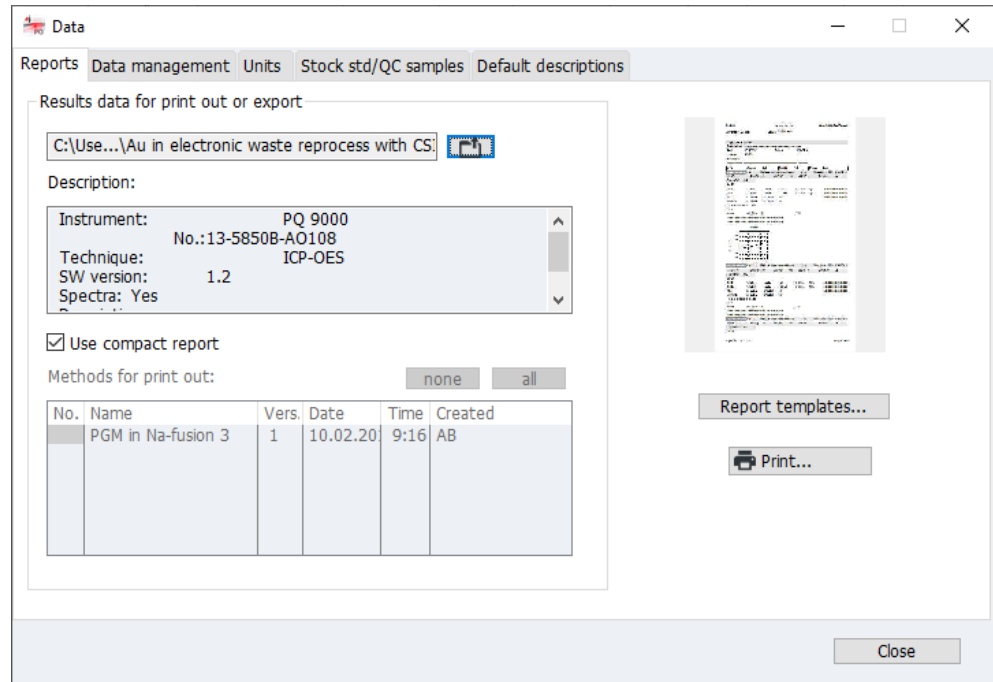
打印完整记录

完整的分析记录包括方法参数、校准和分析结果以及单个样本值（统计运行）。可以在主窗口或保存的文件中打印完整的结果记录。

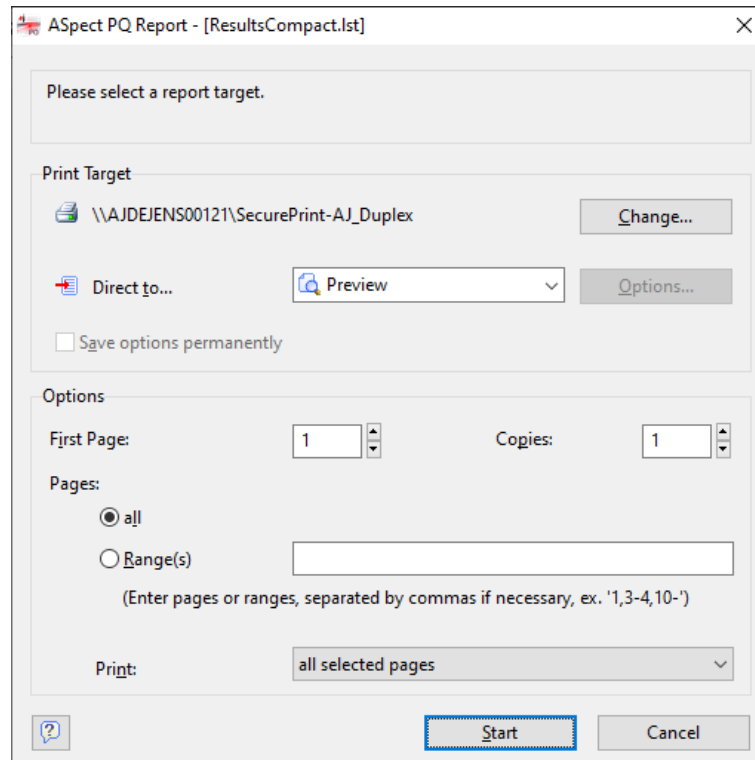
- ▶ 使用  图标打开**数据 | 报告**窗口。
- ▶ 或者，使用**其他 | 数据** 或者 **文件 | 打印 | 报告** 菜单项打开窗口。

显示当前文件的名称、文件信息（**描述**列表）以及创建当前结果文件时使用的所有方法版本。

数据 | 报告 窗口，可选择要打印的结果数据



- ▶ 如果要打印保存的文件，请使用 打开 Open默认窗口，然后选择所需的文件。
- ▶ 如果要打印缩短的精简报告，请启用使用紧凑报告 选项。
- ▶ 选择要在表格中打印的所有方法版本。
按住 shift 或 Ctrl 键，单击要选择的方法版本。使用 所有 按钮选择所有版本，使用 (无) 按钮删除所有选择。
- ▶ 单击打印 打开 ASpect PQ 报告 窗口，选择输出格式。



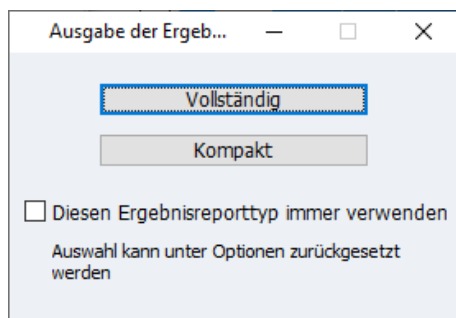
- ▶ 如有必要，请更改 Direct to列表中的输出格式，并使用 选项设置输出格式的特殊参数。
- ▶ 用 Start 开始打印。

i 注意！使用 **直接到 | 预览** 设置进行打印输出。点击 **Start**，要打印的页面会首先显示在打印预览中。这样，您就可以在将数据发送到打印机之前，检查是否输出了所有所需的数据或是否输出了不必要的数据。

打印当前结果

可以打印主窗口中显示的结果：


- ▶ 激活主窗口中的 "结果" 选项卡，您希望打印其中的内容。
- ▶ 使用 **文件 | 打印 | 激活窗口** 菜单项开始打印。
- ✓ 出现 **结果报告格式** 窗口。

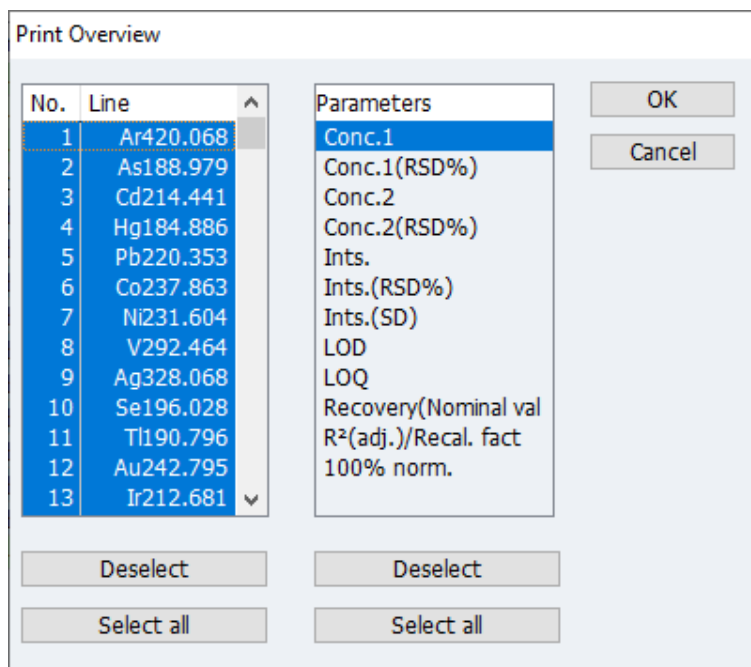


- ▶ 如果要打印带有信号图的结果，请单击 **监控所有**。选择 **紧凑** 以紧凑的概览方式打印结果。
- ▶ 继续上述 "打印完整记录" 的操作。

i 注意！如果您在 **结果报告格式** 窗口中启用 **总是使用这个结果报告格式** 复选框，然后单击 **监控所有** 或 **紧凑**，下一次结果打印输出时将不再打开此窗口，而是自动使用上次的结果报告类型。您可以在 **选项 | 查看** 窗口中重置此设置。

打印所选数据

- ▶ 切换到主窗口中的 **综览** 选项卡。
- ▶ 单击该选项卡底部区域的  或选择 **文件 | 打印 | 激活窗口** 菜单项。出现 **打印 综览** 窗口。




- ▶ 选择所有需要打印的行和参数，并用 **OK** 确认选择。出现 **ASpect PQ 报告** 窗口。
- ▶ 继续上述 "打印完整记录" 的操作。

另见

 查看选项 [▶ 117]

10.1.2 打印进一步的分析参数和设置


可以从相应窗口打印以下分析参数和设置：

- 方法
- 序列
- 主窗口选项卡**综览**上的结果数据
- 样本 ID
- QC (质量控制图)
- 校准
- 自动取样器位置
- ▶ 在 Aspect PQ 工作区启用要打印内容的窗口。
- ▶ 点击窗口中的  开始打印参数。
- ▶ 或者，打开文件 | 打印 | 激活窗口菜单命令。
 - ✓ 出现ASpect PQ 报告 窗口。
- ▶ 如有必要，请在**Direct to** 列表中更改输出格式，并使用选项 设置输出格式的特殊参数。
- ▶ 用 **Start** 开始打印。

10.1.3 报告模板

使用报告设计模式

默认安装的报告模板可以单独调整。为了更好地概览报告视图，可以使用真实值进行编辑。

- ▶ 激活文件 | 报告设计模式 菜单项。
- ▶ 打开要更改报告模板的窗口。
- ▶ 如果存在，请单击此处的 。否则，请选择文件 | 打印 | 激活窗口 菜单项。
- ▶ 用是 确认有关编辑报告模板的查询。打开报告设计器。
- ▶ 进行所需的更改并保存更改后的报告模板。
- ▶ 将报告模板链接到相应的打印内容（见下文“更改分配”）。

报告设计器简介

报告模板的各个组件称为对象。例如，一个表格可以由标题、列表值和图表各一个对象组成。

这些对象同样包含要打印的信息，并带有相关的布局属性，如字体、对齐方式、分隔符、颜色等。

报告设计器可提供各种类型的对象，如文本对象、图形和条形码。这些设备可以在工作区自由放置，尺寸也可以改变。根据类型的不同，对象可以呈现不同的信息或具有不同的特征。


通常情况下，可以用鼠标将所需对象拉到工作区，然后提供相关内容和布局特征。或者，你也可以通过“拖放”的方式将变量从变量列表中拖放到工作区。如果目标位置仍然没有对象，则会自动创建一个对象，并将变量赋值给该对象。

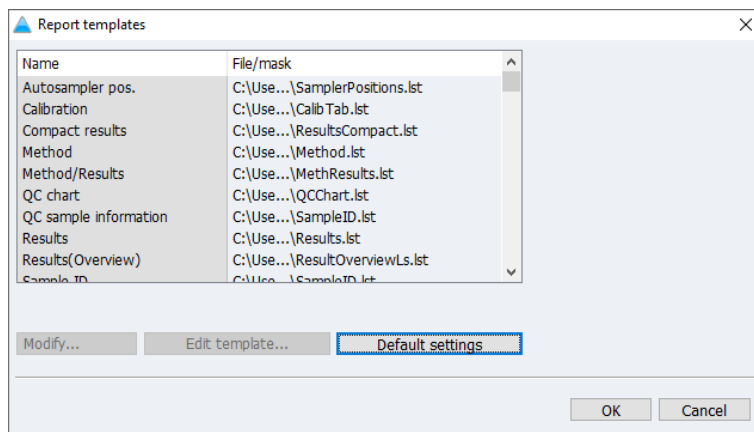
要处理现有对象，首先必须选中该对象。为此，用鼠标左键单击对象。您可以通过高亮显示的边框识别出所选对象。如果您创建了一个新对象，它会自动被选中，并可直接更改其大小和位置。双击即可启动一个对话框，在该窗口中可以更改更多设置。

有关报告设计器操作和功能的更多信息，请参阅软件安装光盘上的手册 "designer_deu.pdf" / "designer_eng.pdf"。

报告模板 窗口

在**报告模板**窗口中编辑模板并将其分配给 ASpect PQ 窗口。使用文件掩码可将多个页面分配到一个窗口，打印开始时可从中选择所需的报告。


- ▶ 使用  图标打开 **数据 | 报告**窗口。
- ▶ 单击**报告模板**。



以下窗口必须有报告模板：

名称	描述
结果	主窗口中标签 结果 的内容
紧凑结果	结果概览
结果 (综览)	主窗口中标签 综览 的内容
校正	分析校准：窗口 校正
方法	方法参数：窗口 方法
方法/结果	报告全文
自动进样器位置	自动取样器分配：窗口 自动进样器 位置
样品ID	信息数据样本： 样品ID 样品信息
QC图表	质量控制图的数据：窗口 质控QC
QC样品信息	质控样本的信息数据：窗口 样品ID QC样品信息
序列	顺序：窗口 序列

更改任务

- ▶ 在 **报告模板** 窗口中选择要更改报告模板的窗口。
- ▶ 使用**修改** 打开分配文件的对话框。
- ▶ 如果只分配一个报告模板，请启用 **使用报告模板文件 (*.lst)** 选项，然后单击  选择所需的文件。
- ▶ 如果要在打印开始时同时提供多个模板，请启用**允许文件选择(路径, e.g. c:\报告\结果*)** 选项。在输入框中使用通配符输入掩码名称。
- ▶ 使用**OK**确认设置。

编辑报告模板

- ▶ 在 **报告模板** 窗口中选择要编辑报告模板的窗口。
- ▶ 单击**编辑模板** 打开**报告设计者** 窗口。

恢复默认设置


您可以根据程序安装恢复设置。

- ▶ 单击**默认设置**。

10.2 ASpect PQ 中所有数据类型的数据管理

以下数据由 ASpect PQ 生成：

- 方法
- 序列
- 结果文件
- 谱线/波长文件
- 校正模型
- 校正光谱
- 报告模板
- 收藏的谱线
- 工作表

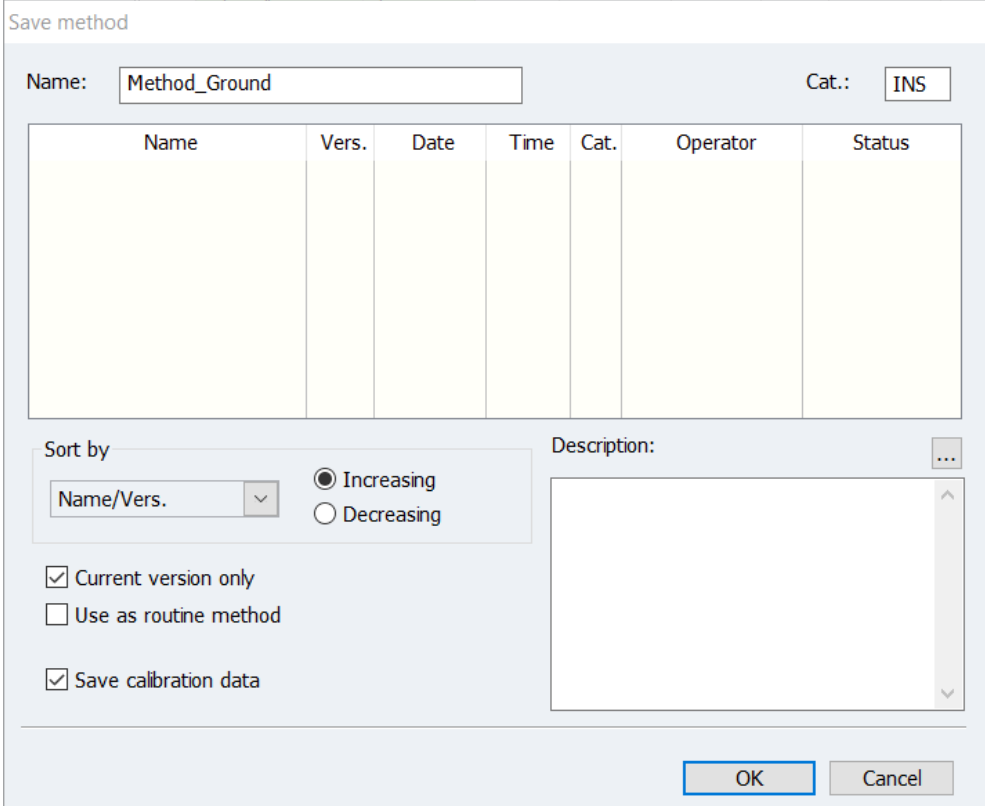
上述数据类型组织在数据 | 数据管理 窗口中。单击  或选择其他 | 数据 菜单命令后，将出现该窗口。

10.2.1 管理方法和序列

方法、序列和校正模型分别保存在数据库中。方法数据库保存为 "method.tps"。包含序列的数据库名为 "sequ.tps"。在本节正文中，方法和序列在下文中称为 "数据记录"。

数据库窗口中的元素

在保存、打开、删除、导入和导出方法和序列时，会打开具有相同元素的数据库窗口。



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:


选项/显示	描述
名称	输入或显示所选方法或序列的名称
分类	用于在数据库中搜索方法/序列的附加属性 类别名称最多可输入三位数字。您可以通过在 分类 字段中输入类别名称来限制列表的显示。如果要显示所有类别的数据记录，请清除 分类 字段中的条目。
记录清单	显示存储的方法/序列名称、版本、日期、时间、类别和操作员
分类	根据各种属性对列表进行排序 排序可按升序或降序进行，具体取决于所选选项。
描述	输入或显示附加说明，例如记录的用途 您可以在 数据 默认描述 窗口中创建预定义注释。
只有当前版本	如果同名数据记录存在多个版本，则只显示版本号最高的数据记录。
预定义方法	保存方法的校准曲线 校准曲线可用于进一步分析。

在软件中，同名的数据记录不会被覆盖，但会创建另一个版本，版本号增加 1。数据库还提供从各自数据库中导入、导出或删除单个方法或序列的功能。

注意

要在数据库窗口中选择多个数据记录，请在使用鼠标选择时按住 Ctrl 或 Shift 键。

打开数据管理

- ▶ 单击  打开 **数据 | 数据管理** 窗口。
- ▶ 在 **类型** 列表中选择要编辑的数据记录类型：**方法** 或 **序列**。

导出数据记录

使用导出功能，您可以将记录提供给其他设备/计算机。您可以将多个数据记录导出到一个共同文件中。导出文件的扩展名如下：方法数据记录".met"，序列数据记录".seq"。

- ▶ 用 **输出** 打开数据库窗口。
- ▶ 选择数据记录并点击 **输出**。
- ▶ 在 **另存为默认** 窗口中输入文件名，并用 **保存** <确认。
- ✓ 显示带有导出文件的数据库窗口。
- ▶ 单击 **关闭** 关闭数据库窗口。

导入数据记录

使用导入功能，您可以将数据记录从其他设备/计算机载入数据库。导入的文件可以包含多个数据记录，您可以从中选择要加载的数据记录。

- ▶ 使用 **输入** 打开具有默认文件打开功能的 **选择要输入的方法文件** 或 **选择要输入的序列文件** 窗口。
- ▶ 选择要导入的文件。
 - ✓ 这将弹出数据库窗口，显示文件中数据记录的名称、创建日期和类别。窗口标题栏中将显示导入文件的名称。
- ▶ 在数据库窗口中，选择要导入的数据记录，然后点击 **输入**。数据记录将导入数据库。如果同名的数据记录已经存在，则会创建新版本的数据记录。在数据库窗口中，会显示可用数据记录的当前版本。
- ▶ 使用 **关闭** 退出数据库窗口，返回 **数据** 窗口。

删除数据记录


使用删除功能，可以永久删除数据库中的数据记录。

- ▶ 用 **删除** 打开数据库窗口。
- ▶ 选择要删除的数据记录。

- ▶ 单击删除。
 - ✓ 更新数据库窗口，只显示剩余的数据记录。对于同名的数据记录，版本号减 1。
- 通过 文件菜单删除记录
- ▶ 或者，您也可以使用 文件 | 删除 | 方法 或 文件 | 删除 | 序列 菜单命令，打开 删除方法 或 删除序列 数据库窗口。
 - ▶ 然后，按上述步骤进行。

10.2.2 管理结果文件

在测量过程中将结果数据保存到数据库中。可以复制或删除包含结果数据的数据库。

- ▶ 使用其他 | 数据 菜单项或单击  打开窗口数据 | 数据管理。
- ▶ 在类型 列表中选择结果 选项。

导入结果数据

您可以将结果数据导入软件。在此过程中，数据会被放入软件文件结构中的结果文件夹。

- ▶ 单击输入。
 - ✓ 出现选择结果文件 窗口。
- ▶ 选择 TPS 文件并点击打开。
- ▶ 为结果存储器选择一个子文件夹，然后单击OK。
 - ✓ TPS 文件和相关 SPK 文件（如有）将被复制到选定的结果文件夹。

导出结果数据

使用该命令可将一个或多个数据库以及现有频谱文件导出到另一个文件夹。

- ▶ 单击输出。
 - 出现输出 窗口，其中显示可用结果数据库概览。
- ▶ 单击鼠标选择要复制的结果数据库。按住 Ctrl 或 Shift 键可以选择多个数据库。
- ▶ 点击输出 以打开查找文件夹窗口。
- ▶ 选择目标文件夹并点击OK。
 - ✓ TPS 文件和 SPK 文件被复制到目标文件夹。

删除结果文件

您可以永久删除结果数据。

- ▶ 单击删除。
- ▶ 在删除结果文件 窗口中单击鼠标选择要删除的结果数据库。
- ▶ 点击删除并用 OK 确认删除查询。
 - ✓ 数据将被永久删除。

搜索单个样本的结果

您可以使用数据库中已知的样本名称搜索单个样本。

- ▶ 在数据 | 数据管理 窗口中，单击搜索样品。或者，选择其他 | 搜索样品 菜单项。

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

- ▶ 在 **样品** 输入字段中输入样品名称。
- ▶ 要搜索输入字符串是名称一部分的样本，请启用子字符串搜索复选框。
- ▶ 启用日期在...之间复选框，限制测量时间。
- ▶ 用**开始** 开始搜索。
 - ✓ 表格中会显示所有包含输入了样本名称的样本的结果。
- ▶ 要打开显示的结果数据库之一，请在列表中选择该数据库，然后点击**打开**。
 - ✓ 结果显示在主窗口中。


10.2.3 导出谱线/波长文件

带有分析线和保存的主峰的谱线/波长文件是针对特定设备的。它已被保存到控制 ICP-OES 设备的计算机中。要在另一台计算机上使用谱线/波长文件，请按照以下步骤操作：

- ▶ 使用**其他 | 数据管理** 菜单命令或单击  图标。打开**数据 | 数据管理** 窗口。
- ▶ 在**类型** 列表中，选择**分析线/波长文件** 选项，然后单击**输出**。
- ▶ 选择要保存文件的文件夹，然后点击**OK**。
 - ✓ 名称为 "line.dat" 的文件将保存在所选文件夹中。

10.2.4 管理校正模型

校正模型用于光谱校正。它们可以从一个设备传输到另一个设备。校正模型文件的扩展名为 MOD。

- ▶ 使用**其他 | 数据管理** 菜单命令或单击  图标。打开**数据 | 数据管理** 窗口。
- ▶ 在**类型** 列表中选择**校正模型** 选项。

导入校正模型

使用该命令可以将校正模型导入 ASpect PQ。

- ▶ 单击**输入**。
- ▶ 选择要导入的修正模型文件，然后单击**打开**。
出现**输入 校正模型** 数据库窗口。
- ▶ 单击**输入**。
 - ✓ 校正模型被传输到数据库中。

导出校正模型

使用该命令可以导出校正模型，以便在另一台计算机上使用。

- ▶ 单击**输出**。
- ▶ 在**输出 校正模型** 数据库窗口中选择所需的模型。可选择多个。
- ▶ 单击**输出**。
- ▶ 在**另存为**窗口中输入名称和存储路径，然后单击**保存**。
 - ✓ 包含校正模型的文件已保存。

删除校正模型

使用该命令可以删除不再需要的校正模型。

- ▶ 单击**删除**。
- ▶ 在**校正模型** 数据库窗口中选择所需的模型。
- ▶ 单击**删除**。
 - ✓ 校正模型将从数据库中删除。



注意

删除校正模型会使方法无法使用

需要注意的是，不需要检查方法中是否使用了校正模型。

另见

☰ 消除光谱干扰 - 编辑谱图 | 光谱校正 窗口 [▶ 75]

10.2.5 删除校正光谱

不再需要的校正光谱可从数据库中删除。

- ▶ 单击☰图标，打开**数据 | 数据管理** 窗口。
- ▶ 在**类型** 列表中，选择**校正谱图**选项，然后单击**删除**。
- ▶ 在**校正谱图** 数据库窗口中选择要删除的频谱，然后单击**删除**。
 - ✓ 检查频谱是否用于校正模型。否则，校正频谱将被删除。

10.2.6 导入报告模板

外部创建的打印报告模板必须通过数据管理导入 ASpect PQ :

- ▶ 单击☰打开**数据 | 数据管理**窗口。
- ▶ 在**类型** 列表中，选择**报告模板**选项，然后单击**输入**。
- ▶ 在**打开** 窗口中选择文件，然后单击**打开**。

报告文件的扩展名为".lst"。


 - ✓ 报告模板已导入 ASpect PQ。现在将报告模板分配给打印内容。

另见

☰ 报告模板 [▶ 106]

10.2.7 管理谱线收藏夹

行收藏夹可在**方法**窗口中定义。它们包含用于特定应用的分析线以及与分析线相关的方法参数。谱线收藏夹文件的扩展名为".fav"。

- ▶ 单击  打开**数据 | 数据管理**窗口。
- ▶ 在**类型**列表中选择**推荐方法**选项。

导入谱线收藏夹

使用该命令可将收藏记录导入 ASpect PQ。

- ▶ 单击**输入**。
- ▶ 在**推荐方法详述**数据库窗口中单击**输入**。
- ▶ 选择要导入的行收藏夹文件，然后单击**打开**。
 - ✓ 查询后，收藏记录将添加到您的谱线收藏夹中。

导出谱线收藏夹

- ▶ 单击**输出**。
- ▶ 在**推荐方法详述**数据库窗口中选择所需的数据记录。可选择多个。
- ▶ 单击**输出**。
- ▶ 在**目标文件 (创建或已存在的文件)**窗口中输入名称和存储路径，然后单击**保存**。也可以使用现有文件作为目标文件。在这种情况下，数据记录将被整合到这里。
 - ✓ 保存包含谱线收藏夹记录的文件。

删除谱线收藏夹

使用该命令可以删除不再需要的谱线收藏夹。


- ▶ 单击**删除**。
- ▶ 在**推荐方法详述**数据库窗口中选择数据记录。
- ▶ 单击**删除**。
 - ✓ 所选记录将从数据库中删除。

另见

- [定义自己收藏的谱线 \[▶ 27\]](#)

10.2.8 导入、导出和删除工作表

您可以在**数据 | 数据管理**窗口中导入、导出和删除工作表。您还可以在导出过程中指定存储的方法和序列。工作表的扩展名为 WST。

- ▶ 使用**其他 | 数据管理**菜单命令或单击  图标。打开**数据 | 数据管理**窗口。
- ▶ 在**类型**列表中选择**工作表**选项。

导出工作表

- ▶ 单击**输出**。
- ▶ 在**输出工作表**窗口中选择相关工作表。要导出工作表中包含的方法和序列，请启用**包含序列和方法**选项。
- ▶ 单击**输出**，输入导出文件的文件夹和名称。
- ▶ 使用**保存**确认输入。
 - ✓ 工作表的导出扩展名为 WST。

导入工作表

- ▶ 单击**输入**。
- ▶ 在**输入工作表**窗口中选择工作表，然后单击**输入**。要同时导入工作表中包含的方法和序列，请启用**包含序列和方法**选项。
- ▶ 在默认窗口中选择工作表，然后单击**打开**。

✓ 工作表已导入。

删除工作表

- ▶ 单击删除。
- ▶ 在删除窗口中选择工作表，然后单击删除。

10.3 以 ASCII/CSV 格式保存结果

测量和分析结果既可自动保存，也可手动保存为 ASCII/CSV 格式。对于这两种导出格式，小数分隔符和列分隔符的参数都在选项 | ASCII/CSV 输出 窗口中定义。

自动连续导出数据

启用自动连续数据导出选项后，结果表中的每个条目都会立即导出到定义的 ASCII 文件中。您可以在选项 | 连续 ASCII 输出 窗口中指定该 ASCII 文件的名称。

手动导出数据

如果打算手动导出数据，可以选择要导出的结果表行。

- ▶ 在结果表中选择样本。
按住 Ctrl 或 Shift 键，单击样本行选择样本。使用编辑 | 选择所有 菜单命令选择所有样本行。
- ▶ 使用编辑 | 保存选择 菜单项打开另存为 默认窗口。
或者，您也可以右键单击所选定，然后从上下文菜单中选择相应的菜单项。
- ▶ 输入文件名，并用 OK 确认。
数据保存为电子表格程序可读取的格式，扩展名为 ".csv"。

另见

- ▣ 导出选项 [▶ 118]
- ▣ 连续 ASCII 输出的选项 [▶ 119]

10.4 指定测量单位

您可以在数据 | 单位 窗口中定义整个程序中可用的度量单位。

- ▶ 单击 ☰ 图标，打开 数据 | 单位 窗口。

提供 3 种首选版本（溶液：毫克/升、微克/升、纳克/升、毫克/千克（液）；固体样品：毫克/千克、微克/千克、纳克/千克、毫克-%）。操作员无法更改这些单位。偏离这些规定的单位可以自由定义。对于自由定义的单位，有必要在“因数”下输入转换因数：


选项	描述
单位	单位名称（最多 10 个字符）
注释	对单位的说明（最多 20 个字符）
因子	因子 1 相当于 1 微克/升或微克/千克，因子 1000 相当于 1 纳克/升或纳克/千克
类型	固体 与固体样本有关的单位 液体 与液体样品（溶液）有关的单位 液体重力 与要称量的液体样品（如油）有关的单位

使用按钮管理自己的条目。

按钮	描述
添加	在列表末尾添加新行
插入	在当前选择行的上方插入新行
删除	只能使用用户定义的单位，首选单位不能删除
保存	保存更改和条目

10.5 管理储备和质控样本数据库

包含常用标准库存和质控样品的数据库在 **数据 | 标准储备液/QC样品** 窗口中进行管理。您可以添加、删除或编辑这些数据库中的条目。在方法开发过程中可使用标准储备样品和质控样本。

- ▶ 单击  图标打开 **数据 | 标准储备液/QC样品** 窗口。
- ▶ 选择 **储备液标准** 打开 **QC样品** 选项。
- ▶ 输入或编辑表中标准的参数：

表列	意义
名称	在此输入标准名称（最多 20 个字符）。
单位	为标准选择单位名称（最多 10 个字符）。
元素和浓度	元素浓度的输入格式为“元素符号浓度”，单位为所选单位，如 Fe 0.5；Cu 10；Co 0.005。或者，使用 浓度 打开 浓度输入 输入字段，在这里可以为每个元素指定浓度。


使用按钮管理条目：

按钮	功能
添加	在列表末尾添加新行。
插入	在当前选定行的上方插入一行。
删除	删除标记行。
保存	保存标准样品/质控样本清单。
浓度	打开输入窗口，输入所选标准物质的元素和浓度。


10.6 创建预定义注释

可以为以下操作定义用户自定义注释：

- 保存方法
- 保存序列
- 开始后处理
- 开始测量

点击相应窗口中 **描述** 字段旁边的 ，即可插入用户定义的注释。

创建评论

- ▶ 单击  图标，打开 **数据 | 默认描述** 窗口。
- ▶ 从 **选择类别** 列表中选择进程。
- ▶ 单击 **编辑模板** 打开评论列表。
- ▶ 点击 **新建** 创建新评论。在 **名称** 下输入可选择注释的描述。在 **文本** 字段中，输入实际注释。
- ▶ 可通过 **修改编辑注释**，或通过 **删除** 从选择列表中删除注释。

10.7 使用 Windows 剪贴板

将结果数据复制到剪贴板

该程序可让您将所选样本的结果直接复制到 Windows 剪贴板，从而使其他 Windows 应用程序也能访问这些结果。

相应的命令可在**编辑**菜单中找到：

编辑... 菜单	描述
拷贝仅可见的列	复制当前表格的可见样本结果。
拷贝所有列	复制所有表格的抽样结果。
列标题	如果激活（复选标记），复制操作将包括列标题。

- ▶ 从结果列表的所需表格中选择样本。
 - 按住 Ctrl 或 Shift 键，单击样本行选择样本。
 - 使用 **编辑 | 拷贝所有列** 菜单命令选择所有样本行。
- ▶ 如有必要，请激活**编辑 | 列标题** 菜单命令，以便在复制操作中包含列标题。
- ▶ 激活所需的菜单命令，将结果复制到 Windows 剪贴板。

将图形复制为屏幕截图

您还可以将校准曲线、强度信号或发射信号的图形窗口和图表作为屏幕截图复制到 Windows 剪贴板。

- ▶ 单击图形上的鼠标右键。打开包含两个复制命令的上下文菜单。
- ▶ 选择复制命令复制所需的对象：只复制图形或复制整个显示窗口。
 - ✓ 所选对象会被复制到剪贴板上，供其他 Windows 应用程序使用。

11 自定义 ASpect PQ

在选项窗口中，您可以进行以下设置，这些设置适用于 ASpect PQ 中的所有操作：

- 查看选项
- 保存文件路径
- 数据导出参数
- 一般适用于分析序列、校准和空白校正的设置

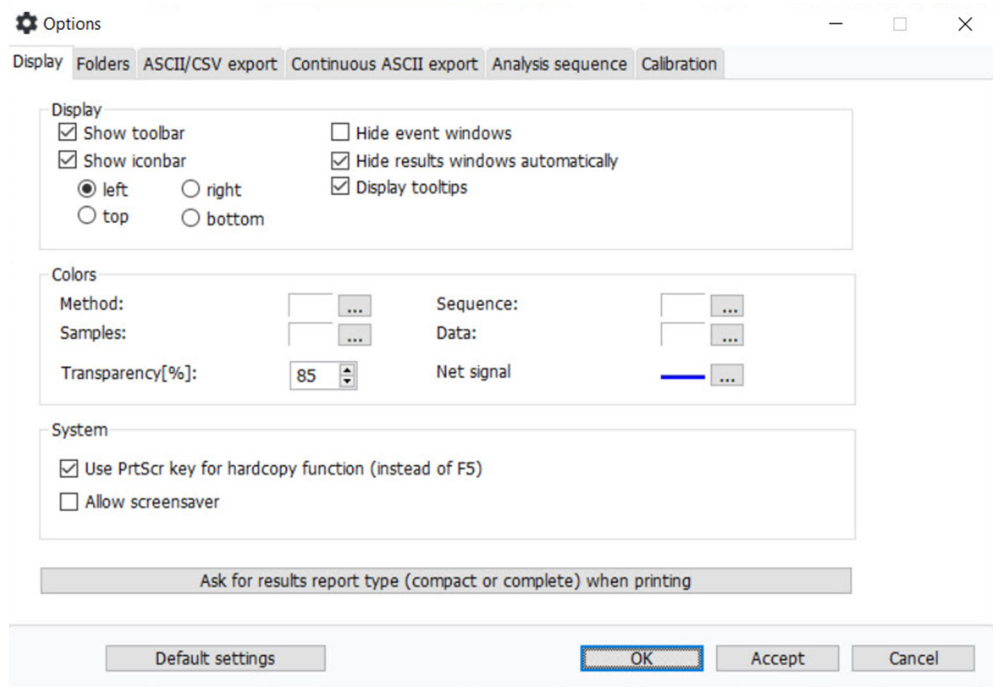
退出并重新启动 ASpect PQ 后，所做的设置仍然有效。默认设置按钮会将所有选项重置为默认值。

使用其他 | 选项 菜单项打开选项窗口。

11.1 查看选项

在选项 | 显示 窗口中，可以定义工作区中可见的功能。截图

选项 | 显示 窗口



选项	描述
显示工具栏	显示带有测量程序按钮的工具栏
显示图标栏	用大按钮显示图标栏，以便快速访问，并选择图标栏位置 图标栏的位置也可以通过鼠标拖动来更改，但设置不会保存，直到下次程序启动。
隐藏事件窗口	隐藏事件窗口（例如，延迟时间） 消息将显示在主窗口的状态栏中。
自动隐藏结果窗口	如果打开了子窗口（例如，方法窗口），则会隐藏结果窗口。关闭子窗口后，结果窗口将再次显示。
显示提示框	在所有图标按钮和方法、序列和样品ID窗口中的列标题上显示鼠标悬停时的简短帮助文本（工具提示）。
颜色	... 按钮可打开颜色选择对话框。在这里，您可以选择预定义或新定义的颜色作为列表背景。

选项	描述
用拷屏键 PrtScr 作为硬拷贝功能(代替 F5)	默认情况下, 使用 F5 启动屏幕截图打印。在这种情况下, 键盘上的打印键用于 Windows 剪贴板功能。如果启用了该复选框, 打印按钮将开始打印屏幕截图。该选项只有在重启 ASpect PQ 后才会激活。
允许屏幕保护	如果启用, Windows 屏幕保护程序会在输入暂停时启动。
当打印时询问结果报告类型 (紧凑或详细)	通过文件 打印 激活窗口 菜单项打印结果窗口时, 可以选择完整报告或紧凑报告。单击此按钮可重置总是使用这个结果报告格式选择, 以便再次选择报告类型。

11.2 存储路径

安装过程中会定义数据的存储路径。这些路径显示在选项|文件夹 窗口中, 可以在此进行部分编辑。

文件夹	描述
程序	可执行程序文件的安装路径
工作目录	用户数据目录 工作文件夹包含更多的子文件夹。它在安装过程中或通过可选的用户管理进行定义。
暂时数据	临时应用程序文件目录。
样品信息	打开和保存样本信息文件的默认路径 该路径可以更改。单击 ... 选择新的文件夹。打开和保存样本信息数据时, 可以选择偏离路径。
输出/输入	导出和导入方法和序列数据以及导出结果数据为 CSV 文件的默认路径 该路径可以更改。单击 ... 选择新的文件夹。在导出和导入过程中, 还可以选择不同的路径。
结果	结果文件文件夹 该默认文件夹可包含用于存储结果的其他子文件夹。这些文件夹可用于在测量开始时保存结果文件。
应用数据	ASpect PQ 存储必要数据的数据目录

11.3 导出选项

在选项|ASCII/CSV输出 窗口中, 可以定义 ASCII 输出结果数据的参数。这些参数既适用于自动连续数据导出, 也适用于手动数据导出。

配置

选项	描述
数字分隔符	定义小数的分隔符
列表分隔符	定义分隔列表中各个元素的字符

要导出结果列表, 请选择**数字分隔符**和**列表分隔符**。

在**结果区域**输出字段中, 可以定义将结果表中的哪些列导出到 ASCII 文件。**所有选项**可导出结果列表的所有列 (包括所有子选项卡)。**只选择区域**选项打开一个列表, 可在其中选择要导出的列。

另见

 以 ASCII/CSV 格式保存结果 [▶ 114]

11.4 连续 ASCII 输出的选项

在选项 | 连续ASCII输出窗口中，分析序列中的结果数据自动导出功能已启用。在过程和结果窗口中输出新行后，导出文件将分别更新。结果数据将附加到现有文件中。

其他导出选项在选项 | ASCII/CSV输出 窗口中定义。

导出结果数据

连续ASCII 输出结果数据 复选框可激活导出功能。接下来必须选择文件名选项：

选项	描述
方法名.csv	文件名与方法名相对应。文件名扩展名为".csv"。文件将保存到默认导出/导入路径(选项 文件夹 窗口)。
结果文件名.csv	文件名与结果文件名一致。文件名扩展名为".csv"。文件将保存到默认导出/导入路径 (选项 文件夹 窗口)。
其它	您可以自由定义文件名和保存路径。 ... 按钮可打开另存为 默认窗口，发出存储路径和文件名。 数据将持续写入该文件，直到给出新名称或选择其他命名选项。
对每个样品创建单独文件(结果行数和样品名称附在文件名后面)	文件名后面会加上结果列表的行号和样本名称。不允许使用的字符用下划线代替 (如 Testmethod-001 QC 1 mg_L.csv) 。

光谱输出

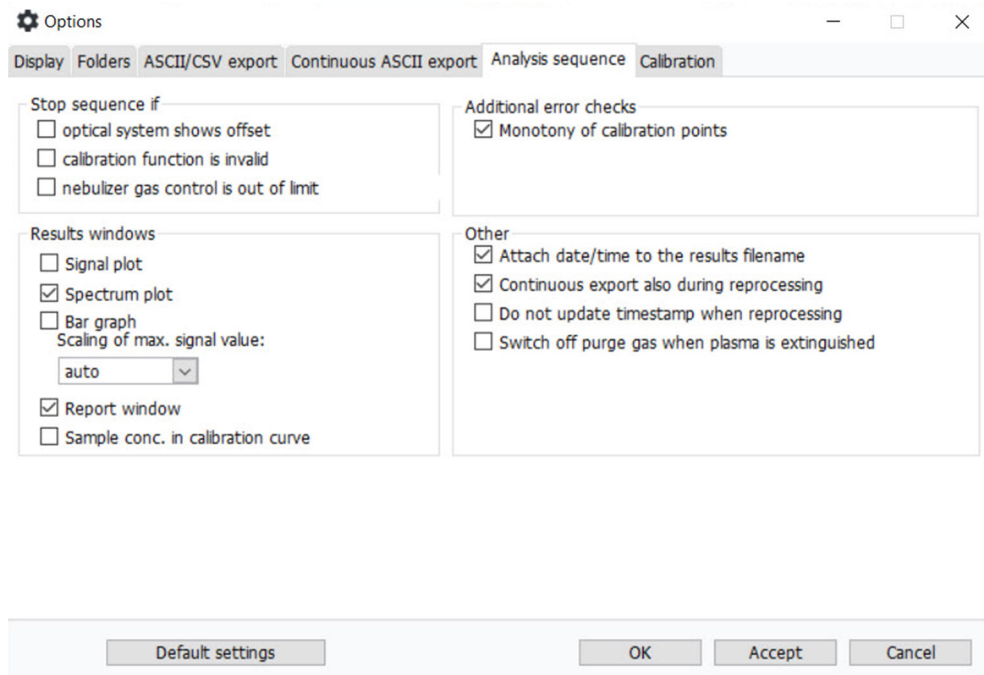
对于频谱导出，请启用连续输出谱图(CSV) 选项并选择存储路径。

此外，还可将光谱以 CSV 文件形式导出到特定的导出路径。文件名根据 "ListRow-SampleName-LineName-RepeatMeasurement" 模式生成，如 0007-sample-AI309-02.csv。

11.5 分析序列选项

在选项 | 分析序列 窗口中，您可以定义分析序列的常规选项。截图

选项 | 分析序列 窗口



在出现以下错误后终止序列

监控分析是否出现以下错误，如果出现这些错误，可以取消分析：

选项	描述
光路系统显示偏差	如果波长配置（Ne 校正）有问题，则停止运行
校正方程是无效的	如果无法计算校准函数，则停止计算
雾化器气体控制超出范围	超过雾化器控制值时停止运行 在校准过程中，将确定雾化器流量控制值。如果控制值在随后的分析过程中发生变化，则表明微粒堵塞了雾化器。

其它错误检查

选项	描述
标准点无梯度	校准点将进行单调性测试。 单调性测试用于确定较高的标准浓度是否也会导致较高的测量值。

结果显示

选项	描述
信号图	在分析过程中会显示一个窗口，显示测量信号随时间变化的曲线图。
光谱图	在分析过程中会显示一个窗口，显示所记录光谱范围的图表。
棒柱图	以条形图显示测量强度
最大信号标尺	定义用于显示信号曲线的测量值轴的最大值 自动：自动轴缩放。 此外，也可以使用查看 标尺 菜单功能进行此设置。
报告窗口	在分析过程中会显示一个窗口，显示等离子体的状态信息。
样品浓度显示在标准曲线上	显示带有当前校准曲线的样品浓度显示在标准曲线上窗口，如果已经测量过，则显示重新校准曲线。测量样品后，用红色辅助线突出显示根据发射计算出的未校正浓度。如果使用了加法校准，则会显示转换后的校准曲线。

杂项

选项	描述
在结果文件名中附上日期/时间	测量开始时的当前 PC/时间会自动附加到结果文件名中。
在再处理期间也连续输出	重新处理后，结果将自动导出。
再处理是不改变做样时间	重新处理结果后，将保留原始测量时间。
熄火后关闭吹扫气	为了节省气体，如果等离子体熄灭，清洗气体将被关闭。

另见

▣ 校准 [▶ 79]

▣ 输入校准参数 (方法 | 校正 窗口) [▶ 35]

11.6 校准和空白校正的常规设置

在选项 | 分析序列 窗口中，您可以对校准进行基本设置并选择空白校正程序。

校准

在该组中，您可以配置校准的基本设置。所有复选框默认为禁用。

选项	描述
相关系数	选择校准曲线拟合度的比率 R ² 相关系数：相关系数 R ² !：测定系数 R ² 相关系数：调整后的决定系数
显示预测值而不是置信区间	如果启用，则显示校准的预报带。置信区间为默认值。
自动比较二次方程和比例方程	“自动”表示自动选择校准功能。如果启用，将使用二次函数进行比较。默认设置为破碎有理函数。
用平均浓度代替 0 计算斜率	如果启用，则根据校准范围的平均浓度计算校准曲线的斜率。默认情况下浓度为 0。



注意

必须启用上述所有选项，以便根据 DIN 38402 和 ISO 8466-2 标准计算二次校准函数。

空白校正

对于空白校正，您可以选择两种不同的计算方法：基于浓度 1 或基于浓度 2。

在基于浓度 2 的计算中，首先根据空白样品 ID 计算空白样品的原始浓度 (Conc2_{BV})。在确定样品的浓度 2 时，要考虑 Conc2_{BV0}。

在基于浓度 1 的计算中，使用直接从样品中确定的空白浓度 (Conc1_{空白}) 来计算样品浓度。如果样品 ID 数据（如稀释）对空白溶液的浓度影响不大，因此无需输入空白样品 ID 数据，则可使用此方法。

带预稀释的液体原样计算示例：

- 基于浓度 1：Conc2_{样品} = (Conc1_{样品} - Conc1_{空白}) * DF_{样品}
- 基于浓度 2：Conc2_{样品} = (Conc1_{样品} * DF_{样品}) - Conc2_{空白}

Conc1_{样品} 不考虑样品 ID 信息的样品浓度

Conc2 _{样品}	样品的原始浓度
Conc1 _{空白}	空白样品的浓度，不考虑样品 ID 中的信息
Conc2 _{空白}	原始空白
DF _{样品}	样品稀释因子

空白校正的默认设置是基于浓度 2 的方法。如果想恢复到基于 conc.1 的较短方法，而不考虑空白的样本 ID，请启用**基于Conc1的空白校正**选项。

检测限 (LOD) 和定量限 (LOQ)

您可以编辑检测/定量限的系数和重复测量次数。计算出的检测/定量限显示在**校正**窗口中。如果要设置应用于现有结果，则必须重新处理结果。使用的因子和重复测量次数将在**校正**窗口以及校准和结果/空白测量的打印输出中输出。

要编辑因子和测量重复次数，请单击**LOD**和**BG**。默认设置如下：

参数	数值
因子 LOD	3
因子 LOQ	9
重复	11

12 建立与外部工作管理系统的数据库交换

您可以通过数据接口将 ASpect PQ 的测量结果以 ASCII/CSV 格式导出到实验室信息管理系统 (LIMS) 或其他外部程序。

此外，您还可以从 LIMS 或 Microsoft Office 应用程序等外部程序导入 ASCII/CSV 格式的样品信息数据（样品 ID）。

12.1 导出测量结果

您可以自动或手动以 ASCII/CSV 文本格式导出测量结果，以便在 LIMS 等其他应用程序中进一步处理。

定义导出选项

- ▶ 使用**其他 | 选项**菜单项打开**选项**窗口。
- ▶ 在**输出/输入**标签下的**文件夹**中定义导出结果数据的存储路径。
- ▶ 在**ASCII/CSV输出**选项卡上定义分隔符：
 - **数字分隔符**：为十进制数字选择分隔符。
 - **列表分隔符**：选择分隔列表元素的字符。
- ▶ 定义结果导出的字段：
 - **所有**：导出结果列表的所有列，以及所有子选项卡。
 - **只选择区域**：单击 **...**，打开一个列表，您可以在其中选择要导出的列。
- ▶ 点击**接受**按钮，接受导出设置。
 - ✓ 您已定义了导出选项。这些设置适用于自动和手动导出。

配置自动导出

配置在分析过程中自动导出结果数据。在过程和结果窗口中输出新行后，软件会立即更新导出文件。软件会将新数据追加到现有导出文件中。

- ▶ 在**选项**窗口中，转到**连续ASCII输出**选项卡。
- ▶ 选中**连续ASCII输出结果数据**复选框。
- ▶ 定义导出文件的文件名：
 - **方法名.csv**：文件名与方法名称一致，文件扩展名为".csv"。
 - **结果文件名.csv**：文件名与结果文件的名称一致，文件扩展名为".csv"。
 - **其它**：单击 **...**按钮打开**另存为默认窗口**。问题 存储路径和文件名。
 - ✓ 软件将持续向文件写入数据，直到您给出新名称或选择其他文件命名选项。
- ▶ 如果要为每个样本创建一个文件，请启用**对每个样品创建单独文件(结果行数和样品名称附在文件名后面)**复选框。
 - ✓ 软件会将结果列表的行号和样本名称添加到文件名中。不允许使用的字符用下划线代替（如 Testmethod-001 QC 1 mg_L.csv）。
- ▶ 如果还想自动导出光谱，请启用**连续输出谱图(CSV)**复选框。在**输出路径**下选择存储路径。
- ▶ 点击**接受**按钮，接受导出设置。
- ▶ 切换到**分析序列**选项卡。
- ▶ 如果想在重新处理后也自动导出结果，请启用**在再处理期间也连续输出**复选框。
- ▶ 点击**OK**关闭窗口。
 - ✓ 您已配置自动数据导出。

手动导出结果

您也可以手动导出测量结果。

- ▶ 切换到主窗口中的**结果**选项卡。
- ▶ 在结果列表中选择样本。
按住 Ctrl 或 Shift 键，单击相应的样本行，选择要导出的数据。
使用**编辑 | 选择所有**菜单项选择所有样本行。
- ▶ 选择**编辑 | 保存选择**菜单项。
- ▶ 在**另存为**默认窗口中输入文件名。点击**OK**确认输入。
✓ 软件以 ASCII/CSV 格式导出结果，文件扩展名为".csv"。
- ▶ 如果选择**编辑 | 拷贝仅可见的列**或**拷贝所有列**菜单项，软件会将数据复制到剪贴板。您可以使用 Ctrl+V 组合键将数据传输到打开的 Excel 文件中。

数据格式

- 软件使用指定的列表分隔符分隔文本文件中的条目。每行以换行符 (CR/LF) 结束。
- 导出文件以包含设备信息、所用软件版本以及文件创建日期和时间的标题数据开始。
 - 日期是根据 Windows 控制面板中的设置格式化的。使用 (短) 日期格式。
 - 空行后是要导出的字段列表。
 - 标题数据只生成一次。标题数据之后是测量值。

导出文件示例：

```
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;
```

图 1 CSV 导出

12.2 导入样本信息文件

您可以使用 LIMS 或 Microsoft Office 应用程序生成 ASCII/CSV 格式的样品信息文件 (样品 ID)，然后手动导入。


为了成功导入，请确保样本信息文件中的每一行都以换行符 (CR/LF) 结束。

有效样本信息文件示例：

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

图 2 CSV 导入

手动导入样本 ID

- ▶ 您可以使用以下方法之一打开样本 ID：
 - 在工具栏中，单击**样品** 字段旁边的  图标。
 - 选择 **文件 | 打开样品信息文件** 菜单项。
 - 在**样品ID** 窗口中，单击**打开**。
- ▶ 在打开默认窗口中，选择文件。
 - ✓ 样本 ID 显示在 **样品ID**窗口中，可用于下一次分析。

12.3 结果导出字段

字段名称	描述	数据类型
序数	序列表中的编号	整数
名称	样品、标准或质控样本/标准的名称	字符串，最多 20 个字符
分析线	元素谱线	字符串，最多 10 个字符
类型	分析物或内标 0 = 分析物 IS1 ... x = 内标	整数
单位1	浓度单位 1（分析样品的浓度）	字符串，最多 10 个字符
浓度1	样品/标准中分析物的浓度	十进制数
SD1	浓度 1 的标准偏差（平均值统计）	十进制数
RSD%	浓度 1 的相对标准偏差（平均值统计）	十进制数
置信度	浓度的置信区间1	十进制数
稀释因子	用于自动稀释样品的稀释因子（计算浓度时已考虑）	十进制数
单位2	浓度单位 2（原始样品的浓度）	字符串，最多 10 个字符
浓度2	原始样品的浓度	十进制数
SD2	浓度 2 的标准偏差（平均值统计）	十进制数
RSD%	浓度 2 的相对标准偏差（平均值统计）	十进制数
置信度	浓度的置信区间2	十进制数
100%回归	浓度2 归一化为总浓度的百分比	十进制数
QC样品	质量控制和校准信息	字符串，最多 30 个字符
QC样品	质量控制和校准信息	字符串，最多 30 个字符
QC样品	质量控制和校准信息	字符串，最多 30 个字符
备注	备注	字符串，最多 40 个字符
强度	单个强度测量值的平均值	十进制数
SD (强度)	标准差（平均值统计）	十进制数
RSD%	相对标准偏差（平均值统计）	十进制数
日期	测量日期	窗口设置短日期格式，例如 2024-01-30
时间	测量时间	hh:mm, 例如：14:29
强度回归	(不用于 ASpect PQ)	/

字段名称	描述	数据类型
SD	(不用于 ASpect PQ)	/
RSD%	(不用于 ASpect PQ)	/
质量	(不用于 ASpect PQ)	/
单位	(不用于 ASpect PQ)	/
湿度[%]	(不用于 ASpect PQ)	/
RHF[%]	(不用于 ASpect PQ)	/
重量 [mg]	(不用于 ASpect PQ)	/
错误	测量过程中出现错误时的错误信息	字符串
位置	样品在自动取样器上的位置	整数
预稀释因子	预稀释因子。原始样品在放入自动进样器之前或在未使用自动进样器的情况下提供给光谱仪之前的稀释系数。计算原始样本的浓度(浓度 2)时需要使用该系数。	十进制数
重量 [mg]	初始重量 (毫克)。在样品制备过程中溶解的原始样品的质量 (用于计算浓度 2)	十进制数
体积 [mL]	稀释已称重样品部分所用溶剂的体积 (毫升) (用于计算浓度 2)	整数
总重量 [g]	样品和稀释剂的总重量 (克)	十进制数
名称(2)	附加样本名称	字符串, 最多 20 个字符
进样器稀释因子	自动进样器或稀释系统的稀释因子	十进制数
空白扣除	空白校正 关 不执行空白校正。 开 在计算原始样品的浓度时, 要减去序列中最后测得的空白值。	0 1
因子	(不用于 ASpect PQ)	/
单个值(强度)	单个强度测量值	用空格分隔的十进制数字字符串, 最多 1000 个字符
背景(强度)	元素谱线的背景强度	用空格分隔的十进制数字字符串, 最多 1000 个字符

12.4 样本信息文件的字段

字段名称	描述	数据类型
位置	样品在自动取样器上的位置	整数
名称	样品、标准或质控样本/标准的名称	字符串, 最多 20 个字符

字段名称	描述	数据类型
预稀释因子	预稀释因子。原始样品在放入自动进样器之前或在未使用自动进样器的情况下提供给光谱仪之前的稀释系数。计算原始样本的浓度(浓度 2)时需要使用该系数。	十进制数
单位	样品的浓度单位。	字符串, 最多 10 个字符
因子	单位因数 因子 1 相当于 1 微克/升或微克/千克, 因子 1000 相当于 1 纳克/升或纳克/千克	字符串, 最多 10 个字符
类型	单位类型 0 = 液体 1 = 固态 2 = 液体重量	整数
重量 [mg]	初始重量 (毫克)。在样品制备过程中溶解的原始样品的质量 (用于计算浓度 2)	十进制数
体积 [mL]	稀释已称重样品部分所用溶剂的体积 (毫升) (用于计算浓度 2)	整数
总重量 [g]	样品和稀释剂的总重量 (克)	十进制数
名称(2)	附加样本名称	字符串, 最多 20 个字符
进样器稀释因子	自动进样器或稀释系统的稀释因子	十进制数
空白扣除	空白校正 关 不执行空白校正。 开 在计算原始样品的浓度时, 要减去序列中最后测得的空白值。	0 1
样品类型	样品或空白 0 = 样本 1 = 试剂 - 空白	整数
元素	样品中要分析的元素或品系 所有 = 方法的所有元素 用逗号分隔的元素符号, 如 Fe、Co、Ni	字符串, 最多 10 个字符

13 可选 FDA 21 CFR 第 11 部分合规性模块

根据 FDA 对电子记录和电子签名的要求（21 CFR Part 11），ASpect PQ 的可选 FDA 21 CFR Part 11 合规性模块包括以下功能：

- 用户管理
- 电子签名
- 审计追踪
- AJ 文件保护，防止有意和无意的数据篡改

默认情况下，用户管理中创建了 6 个用户级别。用户级别可自由配置，并可补充其他用户级别。

如果安装并配置了用户管理功能，ASpect PQ 中的 **System** 菜单项将被激活，通过该菜单项可以访问用户管理功能。

退出相关窗口后，用户数据的任何更改都将永久保存在编码数据库中。

13.1 用户管理

13.1.1 用户管理 - 显示和设置

用户管理设置可由具有管理员权限的用户在初始安装用户管理软件包时或之后的任何时间进行。

为每个用户创建一个账户。一个账户包含一个给定的用户配置文件。如果不再需要用户账户，则可将其禁用或禁止使用。不能删除用户账户。

- ▶ 在 ASpect PQ 中，打开菜单项 **System | User Management**。
- ▶ 或者，也可以通过 Windows 菜单 **ASpect PQ | User Management**，在 ASpect PQ 之外打开用户管理。
- ▶ 输入具有用户管理权限的用户的登录数据。
 - ✓ 出现 **User Management** 窗口。

User Management窗口

该窗口包含一个列表，其中有已注册的用户名和相应的全名。窗口右侧显示所选用户配置文件的详细信息。

用户配置文件的详细信息

显示列表中所选用户的以下数据：

选项	描述
User ID	用户登录名
User level	指定的用户级别和用户权限
Full name	用户全名
E-signature	Yes ：用户有权对结果数据进行电子签名。 No ：用户没有电子签名授权。
Status	Active ：允许使用的用户名（绿色圆圈）。 Disabled ：用户名已禁用，无法使用（红圈）。
Passwd. protect.	Active ：用户登录需要密码。 Not active ：用户登录无需密码。 点击挂锁图标，打开 Modify user data 窗口。挂锁关闭时，密码保护将被激活。

选项	描述
Valid until:	Indefinitely : 密码永不过期。 Date/days : 用户必须在规定期限内更改密码。 通过 Active Directory 登录时不显示该选项。

按钮

按钮	描述
New ...	创建一个新用户 出现 Add user data 窗口。
Modify ...	更改选定表格行的用户数据 显示选定用户的 Modify user data 窗口。双击用户也可打开该窗口。
Active users only	仅显示活跃用户
Audit trail	开放活动报告
Permissions	在软件中分配用户授权
Exit	退出应用程序

13.1.1.2 配置用户级别

从 FDA 21 CFR 第 11 部分合规模块版本 2.0 开始，用户管理新增了设置用户级别的功能。在以前的软件版本中，用户级别的可用授权是固定的，而现在您可以自由配置用户级别。在软件功能列表中，激活或禁用用户级别可访问的功能。

可用用户级别数

默认情况下，用户管理中创建了 6 个用户级别。用户级别可自由配置，并可补充其他用户级别。

- 管理员级别 (0 级)
管理员拥有用户管理的全部权限，可以配置用户管理、配置用户级别中的权限、创建或阻止用户。默认情况下，管理员对 ASpect PQ 没有授权，无法登录软件。
- 1 级
该级别用户拥有 ASpect PQ 用于方法开发和例行工作的所有授权，并可配置软件。
- 2 至 4 级
这些级别的用户对分析操作有分级授权，适用于以下情况：2 级 > 3 级 > 4 级。他们没有配置 ASpect PQ 的权限。
- 用户级别 5
该级别的用户拥有登录用户管理的授权和 ASpect PQ 最小授权，例如用于审计的授权。

此外，还可以为特殊配置创建最多 4 个级别 (6 至 9 级)。

配置用户级别

- ▶ 在 **User Management** 窗口中，单击 **Permissions**。
 - ✓ 出现 **Change user permissions** 窗口。
- ▶ 在 "授权/级别" 矩阵中，您可以通过勾选复选框在级别中启用某项功能。如果右键单击复选框，可以使用上下文菜单设置或删除层级中的所有复选标记，或应用其他层级的授权。
- ▶ 如果要在矩阵中添加其他层，请单击 **Configure**。启用 **Additional user levels (max.4)**: 选项，并在列表中设置所需的编号。
- ▶ 如果要将权限分配重置为默认设置，请单击 **Configure**。启用 **Reset permissions and levels to default** 选项。如果已经为用户分配了额外的用户级别，系统将提示您更改相应的用户配置文件。

- ▶ 每个功能授权都有一个 ID。如果用户要执行一项没有授权的操作，警告/错误信息中会显示该 ID。您可以使用 ID 来清楚地识别丢失的授权。如有需要，请激活 **Show column "ID"** 选项。

关于用户权限的说明

个人用户权限与用户管理中的常规设置相关联。您可以在 **User Management** 窗口中通过 **Extras | Preferences** 菜单项访问这些设置。

许可	描述
Skip calibration interval (ME003)	在用户管理设置中，可以选择定义校准的有效期。如果激活了该时间段，而用户没有该权限，则无法开始测量。
Measurement with unreleased methods (categories) (ME004)	保存时，您可以将 Cat. (类别) 特性分配给方法，从而确定使用的方法。在用户管理中，您最多可以为标记为已批准的方法指定 5 个类别名称。 如果用户有此权限，就可以使用未经批准的方法开始测量。

更新信息

如果已经设置了用户管理，则会为用户分配新的用户级别 Admin 和级别 1 至级别 4。检查所设置的授权是否符合您的要求，并更改级别中的权限。请特别注意，在新安装中，默认情况下管理员只能访问用户管理，而不再拥有使用 ASpect PQ 的权限。

13.1.3 配置用户管理的一般设置

在 **Preferences** 窗口中，您可以使用以下选项对用户管理进行常规配置：

- 注册和密码指南
- 使用数据目录
- 使用校准和方法的设置
- 签名

这些设置适用于新创建的用户账户，因此应在安装后创建用户账户之前进行设置。

- ▶ 在 **ASpect PQ User Management** 窗口中，选择 **Extras | Settings...** 菜单项。显示 **Preferences** 窗口。
- ▶ 在左侧选择要更改的操作组。
- ▶ 执行配置。
单击 **Default settings** 恢复所选操作组的默认设置。其他组的设置不受影响。
- ▶ 单击 **OK** 应用设置。

User access

您可以在本地通过用户管理或通过 Active Directory 登录服务器配置登录。

对于本地登录，请选择 **User access** 页上的 **Local (with user management)** 选项，并配置新登录和密码的一般准则：

选项	描述
Number of login attempts:	显示无效登录尝试的次数（最多 10 次）。 如果超过此值，ASpect PQ 会在等待一段时间后终止，必须重新启动才能再次登录。在审计跟踪文件中添加一个条目（警告）。
Disable account after failed login attempts	超过登录尝试次数后阻止用户登录
Minium user name length:	新建用户名的最少字符数（最多 10 个字符）
Enforce login with password	必须为新创建的用户名分配密码。

选项	描述
Password with letters and numbers:	只能发出包含字母和数字的密码。本政策同样适用于密码的更改。
Password and user ID must be different	只接受与相应用户名不同的密码。本政策同样适用于密码的更改。
User must change password at next login is active	默认情况下，新用户必须在首次登录时更改密码。
Password expires in	时限到期后，用户登录时会被提示更改密码。然后，密码将按“政策”中设定的期限（最长 999 天）延长。然后，该值被确认为默认值。
Minium password length:	新创建密码的最少字符数 字符数：3 至 10

对于基于服务器的登录，请启用**Server-based (with Active Directory)** 选项并配置以下内容：

选项	描述
Domain name(s)	登录服务器的域名 您可以指定两个服务器。
Allow local login if login server not reached	如果通过服务器登录失败，具有相应权限的用户可以通过 Windows 开始菜单在本地的用户管理中登录。为此，还必须为用户分配一个本地密码。 在用户管理中，授权用户可以激活 Local (with user management) 选项，以便在本地登录 ASpect PQ。
Allow local login for AJService account	激活该选项后，AJ 服务人员就可以对设备进行维护，而无需管理员的额外支持。

Folders

可以指定控制和评估软件的工作目录以及审计跟踪文件的目录。

选项	描述
ASpect working directory	设置工作目录 工作目录包含方法和序列数据库以及结果文件。工作目录是在安装 ASpect PQ 时定义的，可以在此处更改。
Audit trail	设置审计跟踪文件的路径 该路径可以更改。
Folder with user database	显示用户数据库路径 只有在安装程序的帮助下才能更改该路径。
AJ 文件保护	可选的 AJ 文件保护软件可提供额外的保护。这可以保护文件免受有意或无意的数据篡改，如删除或修改数据。 如果安装了 AJ 文件保护，该按钮将处于激活状态，并通过标记显示保护状态。绿色 - 文件保护已激活；红色 - 文件保护驱动程序未激活。单击该按钮后，会出现一个窗口，显示受保护目录列表。

Permissions (Details)

在该组中，对方法和校准进行一般设置，这些设置会影响用户级别中的授权。

选项	描述
Calibration validity period [h:mm]:	<p>可选择指定校准的有效期</p> <p>如果停用了用户的Skip calibration interval 授权（请参阅用户级别），用户就不能在有效期过期后启动序列。</p> <p>如果Skip calibration interval 授权已激活，用户就可以启动序列。屏幕上将显示校准有效期已过的消息。</p>
Method categories for released methods	<p>您最多可在此处输入 5 个类别，以确定批准的方法。保存方法时，在Cat. 字段中输入类别。</p> <p>如果某个用户的Measurement with unreleased methods (categories) 授权被停用，则如果相关方法未标记为指定类别之一，则该用户无法启动序列。</p>

Signatures

列表显示签名含义和签名时可选择的相应用户级别。

按钮	描述
Add	<p>添加新的签名含义</p> <p>单击按钮后，将出现Edit list of signature meanings 窗口，您可以在其中选择新的签名含义和有效的用户级别。</p>
Modify	编辑选定的签名含义
Delete	删除选定签名的含义

13.1.4 创建新用户账户

只有具有相应用户权限的用户才有权创建新用户账户。在用户级别的默认设置中，用户管理权限分配给管理员级别。在**Add user data** 窗口中为新用户配置了相应的权限。

Add user data 窗口中的选项

选项	描述
User ID	<p>用户以此名称登录。</p> <p>不区分大小写。最短长度取决于用户管理的一般配置。</p>
Full name	<p>用户全名</p> <p>该名称将作为电子签名的组成部分。</p> <p>最大字符数：32</p>
Description	<p>注释字段</p> <p>该条目是可选的。</p>
User level	选择具有相应权限的用户级别
Password	<p>设置密码</p> <p>密码有大写字母和小写字母之分。如果在未输入密码的情况下确认密码对话框，密码保护将被取消。最小长度和其他密码策略在用户管理的常规配置中指定。</p> <p>最大密码长度：20 个字符</p>
挂锁图标	<p>关闭：密码保护通过指定密码激活。</p> <p>打开：密码保护尚未激活。</p>
Password never expires	<p>如果此框处于激活状态，密码将无限期有效。</p> <p>如果禁用，给定密码将在预设期限内失效。</p> <p>指定值来自密码策略。用户也可以提前延长密码。</p> <p>通过登录服务器和 Active Directory 登录时，此设置将被隐藏。</p>

选项	描述
User-specific working directory	根据以下模式为用户设置一个单独的工作目录：\ASpect-Working directory\User name。目录结构在用户首次登录时创建。
Use e-signature	允许用户对测量结果进行电子签名。其用户级别的签名含义可用。
Disable user ID	停用用户账户 可以暂时禁用用户名。禁用用户账户可防止为新创建的用户重新分配用户名。
User must change password at next login	用户下次登录时，系统会提示他们更改密码。

指定用户数据

- ▶ 在**User Management** 窗口中，单击**New ...**。出现**Add user data** 窗口。
- ▶ 配置字段和选项中的设置，点击**OK** 确认。
 - ✓ 新用户帐户将出现在**ASpect PQ User Management** 窗口中。

另见

📖 配置用户管理的一般设置 [▶ 130]

13.1.5 更改现有用户账户

您可以更改用户账户的属性。

- ▶ 在**User Management** 窗口中，选择用户帐户并单击**Modify ...**。出现包含帐户设置的**Modify user data** 窗口。
- ▶ 配置设置并点击**OK**。
 - ✓ 更改会应用，并在用户下次登录时生效。

另见

📖 创建新用户账户 [▶ 132]

13.2 更改密码

此功能仅适用于本地登录 ASpect PQ 或用户管理。通过登录服务器登录时，密码及其有效性由该服务器管理。

用户在本地登录时，必须定期更改分配的密码，具体取决于用户账户中的说明。

- ▶ 在**ASpect PQ**中，选择**System | Change password** 菜单项。出现**Change password** 窗口。
- ▶ 输入两次旧密码和新密码，点击**OK** 确认。
 - ✓ 如果输入正确，则会出现**Password was changed** 消息。

13.3 查看、打印和导出审计线索

审计跟踪文件记录系统事件以及来自 ASpect PQ 和用户管理的所有警告和错误信息。要查看审计跟踪，必须授予用户账户权限。

您可以通过菜单项 **System | Audit Trail** 在 ASpect PQ 中打开审计跟踪 或在用户管理中点击 **Audit Trail** 打开。

审计跟踪可使用以下功能：

- 显示器
- 过滤器
- 刷新
- 打印
- 导出为 CSV 文件（仅当审计跟踪从用户管理窗口调用时）

以下参数记录在审计跟踪文件中：

表列	描述
Type	表示事件类型 审计跟踪记录以下类型的事件，并用符号加以标记：信息、警告、错误、登录和注销
Date/Time	事件发生的日期和时间（电脑时钟） 两列表头的 [+] 和 [-] 按钮用于按时间或日期升序和降序对条目进行排序。
Time zone	表示事件时间所参考的时区（Windows 系统控制）
User	指定事件发生时处于登录状态的用户。
Source	根据用户管理或 ASpect PQ 中的事件进行区分
Description	所选事件的详细信息

选择视图

如果您在 **User Management** 窗口中打开了审计跟踪，您将看到 ASpect PQ 和用户管理中的事件。在 View 列表中，可以限制显示 ASpect PQ 中的事件或管理事件。
如果使用菜单项 **System | Audit Trail** 打开了 ASpect PQ 中的审计跟踪，则只显示 ASpect PQ 中的事件。

过滤审计线索

单击 **Filter** 可以搜索注册用户、条目类型或时间段。您还可以将搜索限制在与方法、序列、结果或工作表有关的操作上。单击 **Deactivate filter** 删除已设置过滤器的限制。

更新审计跟踪

单击 **Refresh** 刷新审计跟踪条目列表。如果在以前创建的审计跟踪显示中添加了更多条目，则可能需要这样做。

打印审计跟踪

您可以打印审计跟踪。如果对条目进行了过滤，则只打印过滤后的条目。

- ▶ 单击 **Print** 开始打印当前审计跟踪视图。
打印窗口将打开。
- ▶ 从 **Direct to** 列表中选择打印格式。
- ▶ 点击 **Start** 开始打印。
✓ 审计跟踪以选定的输出格式输出。

导出审计跟踪

您可以将审计跟踪条目导出为 CSV 文件。只有在用户管理中打开了审计跟踪，才可使用导出功能。如果激活了筛选器，则只导出筛选过的条目。

- ▶ 单击 **Export** 打开另存为窗口。
- ▶ 输入路径和名称，点击 **OK** 确认。
✓ 导出审计跟踪文件。

13.4 电子签名

结果数据可在 ASpect PQ 中进行电子签名。签名将关闭对特定文件的工作，因此稍后对该文件的更改将导致签名状态失效。签名含义及其与授权级别的分配在用户管理的常规设置中创建。用户可以签署文档的设置为用户账户中配置。因此，如果在用户账户中激活了该功能，并为其授权级别提供了签名，用户就可以在文件上签名。

签名过程将对给定文件进行编码，并为该文件分配签名状态和签名用户的数据。此外，还会创建一个加密签名文件，文件名与结果文件相同，但文件扩展名为".sig"。它包含相关结果文件的校验和，包括频谱文件（如果包含）的校验和。

一个文件可由多个用户签名。

另见

- 配置用户管理的一般设置 [▶ 130]
- 配置用户级别 [▶ 129]

13.4.1 测量结果签名

测量结果文件可在测量后或稍后由具有适当权限的用户加载文件后，在 **签字结束** 窗口中提供电子签名。

签字结束 窗口中的选项

选项	描述
用户ID	当前用户的登录名 用户名可以更改。这样，其他用户就可以进行签名。
密码	用户密码
含义	签名的意义 签名含义列表由用户管理的管理员定义。
注释	可选注释（最多 256 个字符）
签字结束	按上述设置签名文件

签名结果

- ▶ 在软件主窗口中显示测量结果以供签名。
- ▶ 选择系统 | 结果签名确认 菜单项。
- ▶ 输入用户名和密码。
- ▶ 选择签名含义。
- ▶ 单击**签字结束**。
 - ✓ 您将被问及是否应批准签名或取消程序。成功授予签名将得到确认。

另见

- 创建新用户账户 [▶ 132]
- 配置用户管理的一般设置 [▶ 130]

13.4.2 显示签名

预览或打印签名结果数据时，报告末尾会附加**Signatures** 部分。其中包含相应文件的所有电子签名：

选项	描述
Issued by	签署文件的用户的全名和登录名
Signed on	签字批准日期/时间
Status	签名状态可有以下含义之一： Valid 签名和结果数据完整、正确。计算出的文件支票金额与签字时签名文件中的支票金额没有差异。 Invalid (missing or invalid signature file) 未找到与记录相关的签名文件或签名文件已损坏。 Invalid (TPS data) 结果文件在签名后被更改。将新计算的支票金额与之前保存的支票金额进行比较，即可发现差异。 Invalid (SPK data) 包含原始光谱数据的文件在签名后被更改。将新计算的支票金额与之前保存的支票金额进行比较，即可发现差异。
Meaning	签名的意义
Comment	签名中的可选注释

13.5 AJ 文件保护

可选的 AJ 文件保护软件可防止有意或无意的数据篡改，例如删除或修改数据。过滤驱动程序允许授权应用程序访问目录，其他应用程序的访问则被阻止。如果符合微软标准，病毒扫描仪和专业复制、同步或数据备份软件的功能不会受到影响。

AJ 文件保护必须由系统管理员安装和配置。安装需要管理员权限。

有关软件安装和配置的详细说明，请参阅安装数据介质。

结合自动保存和导出的独立权限，AJ 文件保护软件可确保方法创建、数据采集和评估过程中数据的完全私密性。

14 附件

14.1 数值显示标记概览

备注	意义	数值	版本
> 计算	平均值大于校准曲线的工作范围。	平均值	过程和结果窗口
< 计算	平均值小于校准曲线的工作范围。	平均值	过程和结果窗口
< LOD	该值小于检测限。	平均值	过程和结果窗口
< LOQ	样品值小于定量限，大于检测限	平均值	过程和结果窗口
RSD !	样本平均数或标准平均数超出规定的相对标准偏差范围	平均值	过程和结果窗口
RR !	样本平均数或标准平均数超出指定的相对范围	平均值	过程和结果窗口
因子 !	超出校准曲线重新校准因子的限值	校准曲线	过程和结果窗口
R_2 (adj.) 或 R	校准曲线的回归决定系数 R_2 (adj.) 或 R (取决于选项 分析序列 窗口中的选择) 低于指定值	校准曲线	过程和结果窗口 自动取样器调整窗口 校正
#MAN.	在计算样本平均数时，人工排除了样本单值或标准单值	单一数值样本	自动取样器调整窗口 样品单个值
#KOR.	通过格拉布斯离群值检验，在计算样本平均值时自动剔除单个样本值或单个标准值	单一数值样本	自动取样器调整窗口 样品单个值