

Instrukcja obsługi

ASpect PQ



Producent
Analytik Jena GmbH+Co. KG
Konrad-Zuse-Straße 1
07745 Jena / Niemcy
Telefon: +49 3641 77 70
Faks: +49 3641 77 9279
E-mail: info@analytik-jena.com

Serwis techniczny
Analytik Jena GmbH+Co. KG
Konrad-Zuse-Straße 1
07745 Jena / Niemcy
Telefon: +49 3641 77 7407
Faks: +49 3641 77 9279
E-mail: service@analytik-jena.com



Aby zapewnić prawidłowe i bezpieczne użytkowanie, należy postępować zgodnie z niniejszymi instrukcjami. Zachować do wykorzystania w przyszłości.

Informacje ogólne <http://www.analytik-jena.com>

Numer dokumentacji /

Wydanie C (04/2025)

Dokumentacja techniczna Analytik Jena GmbH+Co. KG

© Copyright 2025, Analytik Jena GmbH+Co. KG

Spis treści

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Oprogramowanie ASpect PQ..... | 7 |
| 1.1 | Uwagi dotyczące ochrony danych | 7 |
| 1.2 | Uruchamianie ASpect PQ | 7 |
| 1.2.1 | Okno Quick Start | 8 |
| 1.2.2 | Rozpoczynanie z arkuszem roboczym | 9 |
| 1.2.3 | Rozpoczynanie bez arkusza roboczego | 10 |
| 1.2.4 | Otwieranie drugiej instancji ASpect PQ..... | 10 |
| 1.2.5 | Blokowanie ASpect PQ | 11 |
| 1.3 | Zamykanie ASpect PQ | 11 |
| 1.4 | Ogólne wskazówki dotyczące obsługi..... | 11 |
| 1.4.1 | Interfejs roboczy | 11 |
| 1.4.2 | Korzystanie z pomocy | 12 |
| 1.4.3 | Przegląd paska menu, paska narzędzi i paska symboli | 13 |
| 1.4.4 | Często używane elementy obsługowe | 15 |
| 2 | Arkusze robocze..... | 18 |
| 2.1 | Tworzenie nowego arkusza roboczego | 19 |
| 2.2 | Edycja arkusza roboczego..... | 21 |
| 2.3 | Ładowanie arkusza roboczego..... | 21 |
| 2.4 | Usuwanie arkusza roboczego..... | 21 |
| 3 | Metody..... | 22 |
| 3.1 | Tworzenie, zapisywanie i ładowanie metod | 22 |
| 3.1.1 | Tworzenie nowej metody..... | 22 |
| 3.1.2 | Zapisywanie metody..... | 23 |
| 3.1.3 | Ładowanie metody | 24 |
| 3.2 | Definiowanie parametrów metody..... | 25 |
| 3.2.1 | Definiowanie linii analizy (okno Method Lines)..... | 25 |
| 3.2.2 | Ustawianie parametrów plazmy i transferowego układu optycznego (okno Method Plasma) | 32 |
| 3.2.3 | Definiowanie doprowadzania próbki (okno Method Sample delivery)..... | 33 |
| 3.2.4 | Ocena pików (okno Method Evaluation) | 35 |
| 3.2.5 | Wprowadzanie parametrów kalibracji (okno Method Calibration)..... | 39 |
| 3.2.6 | Definiowanie ocen statystycznych (okno Method Statistics)..... | 43 |
| 3.2.7 | Definiowanie kontroli jakości (okno Method QCS) | 45 |
| 3.2.8 | Definiowanie kontroli jakości (okno Method QCC) | 49 |
| 3.2.9 | Definiowanie formatów wyjściowych wyników (okno Method Output) | 51 |
| 4 | Sekwencje | 52 |
| 4.1 | Tworzenie, zapisywanie i otwieranie sekwencji | 52 |
| 4.1.1 | Tworzenie nowej sekwencji | 52 |
| 4.1.2 | Zapisywanie sekwencji | 52 |
| 4.1.3 | Ładowanie sekwencji..... | 53 |
| 4.2 | Okno Sequence | 54 |
| 4.3 | Definiowanie pomiarów i działań w sekwencji | 55 |
| 4.4 | Wybór pierwiastków/linii do analizy próbki/działania..... | 58 |
| 5 | Pliki informacji o próbkach (identyfikator próbki) | 59 |
| 5.1 | Tworzenie, zapisywanie i otwieranie plików informacji o próbkach | 59 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 5.2 | Okno Sample ID Sample information..... | 59 |
| 5.3 | Definiowanie informacji o próbkach..... | 61 |
| 6 | Przeprowadzanie analiz i obliczanie wyników..... | 63 |
| 6.1 | Przegląd poleceń menu i przycisków do uruchamiania analiz w oknie głównym..... | 63 |
| 6.2 | Włączanie spektrometru i zapalanie plazmy..... | 63 |
| 6.3 | Gaszenie plazmy i wyłączenie spektrometru..... | 65 |
| 6.4 | Uruchamianie procedury pomiaru | 66 |
| 6.5 | Wskazania i zapisywanie wyników podczas procesu analizy | 67 |
| 6.6 | Przerywanie i kontynuowanie procesu analizy | 68 |
| 6.7 | Powtarzanie działań sekwencji | 69 |
| 6.8 | Ponowne obliczenie wyników analizy | 69 |
| 6.9 | Ocena pomiarów równoległe do trwającej analizy (tryb offline) | 72 |
| 6.10 | Wyświetlanie wyników i postępu analizy w oknie głównym..... | 72 |
| 6.10.1 | Karta Sequence/Results | 73 |
| 6.10.2 | Karta Sequence | 73 |
| 6.10.3 | Karta Results | 73 |
| 6.10.4 | Karta Przegląd..... | 77 |
| 6.11 | Wyświetlanie i edytowanie poszczególnych wartości próbek | 77 |
| 6.12 | Wyświetlanie i edycja widm intensywności..... | 79 |
| 6.12.1 | Wyświetlanie widm - okno Edit spectra / Display | 80 |
| 6.12.2 | Ocena piku i wyznaczanie korekty tła - okno Edit spectra Processing | 83 |
| 6.12.3 | Usuwanie zakłóceń widmowych - okno Edit spectra Spectral corrections | 84 |
| 6.13 | Rejestrowanie widma przeglądowego | 87 |
| 7 | Kalibracja..... | 89 |
| 7.1 | Widok krzywej kalibracji..... | 90 |
| 7.2 | Wyświetlanie wyników kalibracji | 91 |
| 7.2.1 | Kalibracja - karta Table | 91 |
| 7.2.2 | Kalibracja - karta Residuals..... | 91 |
| 7.2.3 | Kalibracja - karta LOD/ LOQ | 91 |
| 7.2.4 | Kalibracja - karta LOD/ LOQ | 92 |
| 7.3 | Edycja krzywej kalibracji..... | 93 |
| 8 | Kontrola jakości | 94 |
| 8.1 | Parametry kart QC | 94 |
| 8.2 | Wpisy i granice kart QC..... | 95 |
| 8.3 | Wyświetlanie kart QC | 96 |
| 9 | Sterowanie urządzeniem i akcesoriami i monitorowanie ich | 98 |
| 9.1 | Spektrometr | 98 |
| 9.1.1 | Ustawianie parametrów spektrometru i testowanie funkcji | 98 |
| 9.1.2 | Diagnostyka parametrów urządzenia | 100 |
| 9.1.3 | Wykonywanie ciągłego pomiaru piku..... | 100 |
| 9.1.4 | Rejestrowanie krzywej sygnału | 101 |
| 9.2 | Plazma..... | 102 |
| 9.2.1 | Zapłon plazmy i ustawienie warunków plazmy | 102 |
| 9.2.2 | Kontrola doprowadzania próbki przez pompę | 104 |
| 9.2.3 | Regulacja i optymalizacja plazmy | 105 |

| | | |
|-----------|---|------------|
| 9.3 | Autosampler..... | 107 |
| 9.3.1 | Wyświetlanie podłączonego autosamplera..... | 108 |
| 9.3.2 | Konfiguracja statywu autosamplera..... | 109 |
| 9.3.3 | Parametry techniczne autosamplera..... | 109 |
| 9.3.4 | Testowanie funkcji autosamplera..... | 110 |
| 9.3.5 | Wyświetlanie pozycji próbki na autosamplerze..... | 111 |
| 9.3.6 | Funkcja rozcieńczania..... | 112 |
| 9.4 | Chłodnica obiegowa..... | 113 |
| 10 | Zarządzanie danymi..... | 114 |
| 10.1 | Funkcje drukowania w ASpect PQ..... | 114 |
| 10.1.1 | Drukowanie wyników analiz..... | 114 |
| 10.1.2 | Drukowanie dalszych parametrów analizy i ustawień..... | 117 |
| 10.1.3 | Szablony protokołów..... | 117 |
| 10.2 | Zarządzanie danymi dla wszystkich typów danych w ASpect PQ..... | 119 |
| 10.2.1 | Zarządzanie metodami i sekwencjami..... | 119 |
| 10.2.2 | Zarządzanie plikami wyników..... | 122 |
| 10.2.3 | Eksportowanie plików linii/długości fali..... | 123 |
| 10.2.4 | Zarządzanie modelami korekcji..... | 123 |
| 10.2.5 | Usuwanie widm korekcyjnych..... | 124 |
| 10.2.6 | Importowanie szablonów protokołów..... | 124 |
| 10.2.7 | Zarządzanie ulubionymi liniami..... | 125 |
| 10.2.8 | Importowanie, eksportowanie i usuwanie arkuszy roboczych..... | 125 |
| 10.3 | Zapisywanie wyników w formacie ASCII/CSV..... | 126 |
| 10.4 | Definiowanie jednostek..... | 127 |
| 10.5 | Zarządzanie bazami danych wzorców podstawowych zapasów i próbek QC..... | 127 |
| 10.6 | Tworzenie predefiniowanych uwag..... | 128 |
| 10.7 | Korzystanie ze schowka systemu Windows..... | 128 |
| 11 | Dostosowywanie ASpect PQ..... | 130 |
| 11.1 | Opcje widoku..... | 130 |
| 11.2 | Ścieżki zapisu..... | 131 |
| 11.3 | Opcje eksportu..... | 132 |
| 11.4 | Opcje ciągłego eksportu ASCII..... | 132 |
| 11.5 | Opcje przebiegu analizy..... | 133 |
| 11.6 | Ustawienia ogólne kalibracji i korekty o wartość ślepej próby..... | 134 |
| 12 | Konfiguracja wymiany danych z zewnętrznym systemem zarządzania zleceniami..... | 137 |
| 12.1 | Eksportowanie wyników pomiarów..... | 137 |
| 12.2 | Importowanie plików z informacjami o próbkach..... | 139 |
| 12.3 | Pola eksportu wyników..... | 139 |
| 12.4 | Pola plików z informacjami o próbkach..... | 142 |
| 13 | Opcjonalny moduł zgodności z przepisami FDA 21 CFR Part 11..... | 144 |
| 13.1 | Zarządzanie użytkownikami..... | 144 |
| 13.1.1 | Zarządzanie użytkownikami – widoki i ustawienia..... | 144 |
| 13.1.2 | Konfiguracja poziomów użytkowników..... | 145 |
| 13.1.3 | Konfiguracja ogólnych ustawień Zarządzania użytkownikami..... | 146 |
| 13.1.4 | Tworzenie nowego konta użytkownika..... | 149 |
| 13.1.5 | Zmiana istniejącego konta użytkownika..... | 150 |

| | | |
|-----------|---|------------|
| 13.2 | Zmiana hasła..... | 150 |
| 13.3 | Wyświetlanie, drukowanie i eksportowanie ścieżki audytu | 150 |
| 13.4 | Podpisy elektroniczne..... | 152 |
| 13.4.1 | Podpisywanie wyników pomiarów | 152 |
| 13.4.2 | Wyświetlanie podpisu..... | 153 |
| 13.5 | AJ File Protection | 153 |
| 14 | Konserwacja i pielęgnacja spektrometru emisyjnego..... | 155 |
| 14.1 | Przegląd konserwacji..... | 156 |
| 14.2 | Czyszczenie palnika z możliwością rozmontowania | 157 |
| 14.3 | Wymiana szklanego korpusu | 160 |
| 14.4 | Konserwacja palnika jednoczęściowego..... | 163 |
| 14.5 | Czyszczenie rozpylacza | 166 |
| 14.6 | Czyszczenie i odfekowanie komory próbki i komory plazmy | 167 |
| 14.7 | Czyszczenie i wymiana okien komory plazmy | 168 |
| 14.8 | Kontrola szczelności instalacji gazowej..... | 171 |
| 14.9 | Wymiana węża argonu..... | 172 |
| 14.10 | Wymiana filtra powietrza..... | 172 |
| 14.11 | Wymiana filtra wody | 173 |
| 14.12 | Konserwacja autosamplera ASPO 3300 | 174 |
| 14.12.1 | Wymiana kaniuli i wężyka próbki | 174 |
| 14.12.2 | Wymiana węża pompy płuczającej | 175 |
| 14.12.3 | Wymiana bezpieczników | 176 |
| 14.13 | Konserwacja chłodnicy obiegowej: wymiana wody chłodzącej..... | 177 |
| 15 | Załącznik..... | 179 |
| 15.1 | Przegląd oznaczeń na wskazaniu wartości | 179 |

1 Oprogramowanie ASpect PQ

ASpect PQ to oprogramowanie do sterowania i analizy dla następujących urządzeń ICP-OES:

- PlasmaQuant PQ 9000
- PlasmaQuant 9100
- PlasmaQuant 9200

Na potrzeby procesów pomiaru można zoptymalizować parametry metod zgodnie z wymaganiami dotyczącymi próbki. Dane wynikowe można przeliczyć, wyeksportować w różnych formatach plików i wydrukować.

Oprócz opisu oprogramowania niniejsza instrukcja zawiera informacje na temat konserwacji i pielęgnacji urządzenia ICP-OES. Wiele instrukcji konserwacji jest wzbogaconych o animacje i filmy.

Opisana wersja oprogramowania

Niniejszy dokument jest oparty na wersji ASpect PQ 1.4.

Zastosowanie zgodnie z przeznaczeniem

Oprogramowanie ASpect PQ służy wyłącznie do sterowania wyżej wymienionymi urządzeniami i oceny danych zarejestrowanych przez te urządzenia.

Producent nie ponosi odpowiedzialności za problemy lub szkody spowodowane użytkowaniem ASpect PQ niezgodnie z przeznaczeniem.

ASpect PQ i urządzenie, które ma być sterowane za jego pomocą, mogą być obsługiwane wyłącznie przez przeszkolony i poinstruowany personel. Użytkownik musi zapoznać się z treścią niniejszej instrukcji oraz instrukcji obsługi urządzenia.

1.1 Uwagi dotyczące ochrony danych

To oprogramowanie używa nazw próbek i umożliwia dodanie opcjonalnych informacji o próbce (notatek). Nazwa próbki służy jako identyfikator w wynikach testu określonej próbki. W szczególności w środowisku klinicznym nazwa próbki może być używana do przypisania wyników testu do osoby fizycznej, na której testy zostały przeprowadzone. Dane osobowe powinny być ograniczone do minimum, aby nikt nie mógł ich odtworzyć na podstawie nazwy próbki lub opcjonalnych notatek. Nie należy używać żadnych bezpośrednich identyfikatorów, takich jak imiona i nazwiska, numery ubezpieczenia, krajowe numery identyfikacyjne, daty urodzenia lub inne atrybuty osobiste. Obowiązkiem osób odpowiedzialnych za przetwarzanie danych w laboratoriach jest przestrzeganie obowiązujących przepisów i obowiązków w zakresie ochrony danych.

Firma Analytik Jena może poprosić o udostępnienie plików zawierających wyniki pomiarów, które zawierają także nazwy próbek lub notatki, w ramach działań związanych z usługami takimi jak obsługa klienta, rozwiązywanie problemów i rozpatrywanie reklamacji.

1.2 Uruchamianie ASpect PQ

- ▶ Włącz urządzenie i autosampler.
- ▶ Kliknij ikonę ASpect PQ na pulpicie systemu Windows.
 - ✓ ASpect PQ zostaje uruchomiony.

- ▶ Jeśli zainstalowany jest opcjonalny moduł Zarządzanie użytkownikami, użytkownik jest proszony o podanie nazwy użytkownika i hasła. Program ASpect PQ jest udostępniany dopiero po pomyślnym wprowadzeniu tych danych.

Po uruchomieniu oprogramowania otwiera się okno Quickstart. Można w nim wybrać arkusze robocze ze wstępnie ustawionymi metodami i sekwencjami w celu szybkiego rozpoczęcia pomiaru lub przełączyć się bezpośrednio na interfejs ASpect PQ.

1.2.1 Okno Quick Start

Po uruchomieniu oprogramowania i zalogowaniu użytkownika (tylko jeśli zainstalowane jest Zarządzanie użytkownikami) pojawia się okno **Quick Start**. Można w nim załadować arkusz roboczy lub przejść do ASpect PQ bez wprowadzania dalszych ustawień. Można również otworzyć okno **Quick Start** w ASpect PQ za pomocą polecenia menu **File | Quick Start**.


Ustawienia w oknie Quick Start W oknie **Quick Start** dostępne są następujące opcje i przyciski.

| Opcja / przycisk | Opis |
|---------------------------|---|
| Operator | W przypadku korzystania z opcjonalnie instalowanej funkcji Zarządzanie użytkownikami wyświetlany jest zalogowany użytkownik. Jeśli nie jest używane Zarządzanie uprawnieniami, użytkownik może zostać wprowadzony ręcznie. |
| Lab. | Można wprowadzić do 30 znaków. Ostatnia wprowadzona nazwa jest zapisywana i wyświetlana jako informacja w dziennikach wyników. |
| Routine | Uruchom program dla trybu rutynowego. W trybie rutynowym wyświetlane są tylko metody aktywowane dla trybu rutynowego. Jeśli zainstalowany jest opcjonalny „Moduł 21 CFR Part 11 Compliance Aspect PQ”, opcja Routine jest wstępnie ustawiona. Nie ma możliwości wyboru między Routine i Method development . |
| Method development | Całkowicie uruchomić program. Wszystkie ustawienia w rozwoju metody są aktywowane. |

| Opcja / przycisk | Opis |
|------------------------------------|---|
| Torch material | Wybierz używany materiał palnika (kwarc lub materiał ceramiczny), aby dostosować czułość optycznego czujnika plazmy. |
| Simulation | Do celów szkoleniowych i demonstracyjnych możliwe jest korzystanie z ASpect PQ bez podłączonego analizatora. Przy aktywacji wszystkie funkcje urządzenia (w tym rejestracja i ocena zmierzonych wartości) są przetwarzane w trybie symulacji. |
| Skip Quick Start | Przejdź do interfejsu ASpect PQ bez wybierania arkusza roboczego. |
| Konfiguracja portów: AX/SDX | Tylko w przypadku podłączenia układu rozcieńczania Teledyne Cetac SDXHPLD z autosamplerem ASX-560. Po kliknięciu przycisku porty USB używane przez autosampler i układ rozcieńczania są konfigurowane automatycznie. Jeśli zainstalowany jest opcjonalny „Moduł 21 CFR Part 11 Compliance Aspect PQ” (Zarządzanie użytkownikami), funkcja ta może być wykonywana tylko przez użytkownika z uprawnieniami administratora. |
| Quit | Zamknij okno Quick Start i zakończ ASpect PQ. |
| OK | Po wybraniu arkusza roboczego przejdź do interfejsu ASpect PQ. |

Tabela arkuszy roboczych

Tabela arkuszy roboczych zawiera aktualnie dostępne arkusze robocze. 4 zakładki ułatwiają znalezienie arkusza roboczego:

| Zakładka | Treść |
|---|---|
| Favorites | Arkusze robocze z oznaczeniem Favorite |
| Recent | Ostatnio używane arkusze robocze |
| Predefined | Arkusze robocze Analytik Jena, które są instalowane podczas instalacji ASpect PQ. |
| All | Wszystkie arkusze robocze |
|  | Za pomocą ikony lupy można filtrować arkusze robocze według pierwiastków. Po kliknięciu ikony wyświetlana jest lista pierwiastków, z której można wybrać pierwiastek. Aby wyszukać więcej pierwiastków, możesz powtórzyć wybór. W przypadku zaznaczenia kilku pierwiastków wyświetlane są wszystkie arkusze robocze, które zawierają co najmniej jeden z pierwiastków w zapisanej metodzie (logika LUB). Przeszukiwane są zarówno metody, które są bezpośrednio powiązane z arkuszem roboczym, jak i metody ładowane w ramach powiązanej sekwencji. |

1.2.2 Rozpoczynanie z arkuszem roboczym

Arkusze robocze to folder zawierający metodę i sekwencję. Opcjonalnie arkusze robocze mogą również zawierać ustawienia identyfikatora próbki i zapisywania pliku wyników. Za pomocą wybranego arkusza roboczego można od razu rozpocząć pomiar. Jeśli istnieje kilka wersji metody i sekwencji, do pomiaru używane są zawsze najnowsze (aktualne) wersje.

- ▶ Zainstaluj akcesoria na analizatorze, a następnie włącz akcesoria i urządzenie.
- ▶ Uruchom oprogramowanie.
 - ✓ Zostanie wyświetlone okno **Quick Start**.
- ▶ Wprowadź niezbędne dane w polach **Operator** i **Lab.**
- ▶ Wybierz szkło kwarcowe lub ceramikę w punkcie **Torch material**.

- ▶ Wybierz arkusz roboczy w tabeli arkuszy.
- ▶ Kliknij **OK**.
 - ✓ Zostanie wyświetlony interfejs ASpect PQ. Metoda i sekwencja są już załadowane.

W zależności od konfiguracji arkusza roboczego można teraz powiązać metodę i sekwencję załadowaną za pomocą arkusza z plikiem identyfikatora próbki lub od razu rozpocząć pomiar.

1.2.3 Rozpoczynanie bez arkusza roboczego

Bez przygotowanego arkusza roboczego należy załadować lub ponownie skonfigurować metodę, sekwencję i identyfikator próbki dla pomiaru.

- ▶ Zainstaluj akcesoria na analizatorze, a następnie włącz akcesoria i urządzenie.
- ▶ Uruchom oprogramowanie.
 - ✓ Zostanie wyświetlone okno **Quick Start**.
- ▶ Wprowadź niezbędne dane w polach **Operator** i **Lab.** .
- ▶ Wybierz szkło kwarcowe lub ceramikę w punkcie **Torch material**.
- ▶ Kliknij **Skip Quick Start**.
 - ✓ Zostanie wyświetlony interfejs ASpect PQ.

Ogólny przebieg procedury pomiarowej

Zdefiniuj metodę i sekwencję dla zadania analizy i uruchom procedurę pomiarową. Poniższe kroki są niezbędne do przeprowadzenia ręcznej lub automatycznej procedury pomiarowej:

- ▶ Zdefiniuj **parametry metody** w metodzie (rozwój metody). Załaduj metodę.
- ▶ Utwórz **sekwencję**. Sekwencja zawiera próbki i działania w kolejności, w jakiej mają być przetwarzane. Niektóre dane opisujące próbkę, takie jak nazwa próbki i pozycja na autosamplerze, można wprowadzić bezpośrednio i zapisać wraz z sekwencją.
- ▶ W przypadku rutynowych analiz korzystne jest utworzenie **pliku identyfikacji próbki** (ID próbki). Zawiera on dane opisujące próbkę, takie jak nazwa, współczynnik rozcięńczenia i pozycja w autosamplerze. Dane te są wymagane, jeśli ma nastąpić przeliczenie wsteczne stężenia na pierwotną próbkę. Pliki identyfikujące próbkę to pliki tekstowe, które mogą być również tworzone za pomocą zewnętrznych programów.
- ▶ Uruchom **pomiar**.

Podczas procesu pomiaru wyniki są natychmiast zapisywane w bazie danych wyników. Ten centralny plik wyników jest dostępny za pośrednictwem funkcji zarządzania danymi (np. eksport, drukowanie).

Po rozpoczęciu pomiaru wartości wynikowe są wprowadzane na listę wyników w oknie głównym. Odpowiedni wiersz próbki może zostać wybrany do szczegółowego wyświetlenia (np. poszczególne wartości, widma). Ostatnie zmierzone wyniki są zawsze dodawane na końcu tabeli, nadpisywanie nie jest możliwe.

W razie potrzeby można dokonać dalszej oceny danych poprzez ponowne obliczenie. Dane pomiarowe można przygotować do wydruku protokołu lub wyeksportować.

1.2.4 Otwieranie drugiej instancji ASpect PQ

Jeśli aplikacja jest już uruchomiona, kolejna instancja programu zostaje otwarta w trybie offline. W tym trybie nie ma połączenia z urządzeniem. Jednak wszystkie inne funkcje, takie jak tworzenie metod lub ładowanie i ocena wyników, mogą być używane równoległe do trybu pomiarowego trwającego w pierwszej instancji programu.

- ▶ Uruchom drugą instancję programu za pomocą pozycji menu **File | Start Offline Program Instance**.

1.2.5 Blokowanie ASpect PQ

Aplikacja może zostać zablokowana do obsługi; podczas blokady pomiary są kontynuowane. W połączeniu z opcjonalnie dostępnym modułem Zarządzania użytkownikami do odblokowania ekranu wymagane jest potwierdzenie hasłem.

- ▶ Wybierz pozycję menu **Extras | Lock**.
- ▶ Aby odblokować aplikację, kliknij symbol kłódki na ekranie.

1.3 Zamykanie ASpect PQ

- ▶ Zgaś plazmę.
- ▶ Zakończ program, wybierając pozycję menu **File | Quit**.
- ▶ Jeśli w tym momencie pliki informacji o metodzie, sekwencji lub próbkach nie zostały jeszcze zapisane, wyświetlony zostanie odpowiedni komunikat. Kliknij **Yes**, jeśli chcesz zapisać pliki.
- ▶ Po wyłączeniu plazmy urządzenie ICP-OES wymaga jeszcze czasu na schłodzenie systemu. Jeśli temperatura docelowa nie została jeszcze osiągnięta, wyświetlane jest okno postępu z powiadomieniem o konieczności bezpiecznego wyłączenia urządzenia. Wyłącz urządzenie ICP-OES dopiero po zamknięciu ASpect PQ.



WSKAZÓWKA

Jeśli zamkniesz ASpect PQ, gdy plazma się pali, plazma zostanie automatycznie zgaszona po zapytaniu!

Zobacz także

- 📖 Włączanie spektrometru i zapalenie plazmy [▶ 63]


1.4 Ogólne wskazówki dotyczące obsługi

1.4.1 Interfejs roboczy

Po uruchomieniu programu ASpect PQ najpierw otwiera się okno **Quick Start**. Z niego można uzyskać dostęp do interfejsu roboczego.

Główne elementy interfejsu roboczego

The screenshot shows the ASpect PQ software interface. The main window displays a table with columns: No., Sample type, Name, Pa, No., Name, Line, Type, Ints., SD(Ints.), RSD%, Date, Time, and Single values(Ints.). The table contains 38 rows of data, including calibration standards (e.g., Cal-Zero1, Cal-Std1, Cal-Std2) and various samples (e.g., Sample, Cu227.596, Fe259.940, Ni231.604, Pb226.353, Zn13.856, Zn206.200). The interface includes a menu bar at the top, a toolbar with icons for file operations, and a sidebar on the left with icons for Plasma, Spectrometer, Method, Autosampler, Sample ID, Sequence, Calibration, and Data. Seven numbered callouts (1-7) are overlaid on the screenshot to highlight specific UI elements: (1) points to the menu bar, (2) to the toolbar, (3) to the toolbar area, (4) to the sidebar icons, (5) to the table header, (6) to the status bar, and (7) to the status bar area.

| Nr | Opis |
|----|---|
| 1 | W pasku tytułu znajdują się informacje o wersji oprogramowania, podłączonym urządzeniu, technologii i (jeśli jest załadowany) arkuszu roboczym. |
| 2 | Dostęp do wszystkich funkcji oprogramowania można uzyskać za pośrednictwem paska menu . |
| 3 | Pasek narzędzi zawiera przyciski do uruchamiania i wstrzymywania sekwencji pomiarowych oraz pokazuje aktualnie załadowaną metodę, sekwencję i plik ID próbki. Klikając przycisk  za polami, można załadować rekord danych. Znajduje się tam również przycisk do tworzenia nowego arkusza roboczego. |
| 4 | Pasek symboli zapewnia dostęp do najważniejszych okien (funkcji) oprogramowania. Gdy tylko jedno z okien zostanie otwarte, odpowiednia ikona zmienia kolor na czerwony. Jeśli otwartych jest kilka okien, ponownym kliknięciem przenieś dane okno na pierwszy plan. |
| 5 | W oknie głównym wyświetlana jest sekwencja i wyniki pomiarów. |
| 6 | Niektóre zakładki główne mają dodatkowe zakładki podrzędne rozmieszczone w dolnej części okna. |
| 7 | Pasek statusu przy dolnej krawędzi pokazuje informacje o podłączonym urządzeniu, zalogowanym użytkowniku i nazwie aktualnie wyświetlanej bazy danych wyników. |

Zobacz także

- Wyświetlanie wyników i postępu analizy w oknie głównym [▶ 72]
- Okno Quick Start [▶ 8]

1.4.2 Korzystanie z pomocy

Pomoc dotyczącą obsługi ASpect PQ można uzyskać za pomocą pozycji menu ? | **Help topics**. Podczas pracy z oknami programu ASpect PQ można nacisnąć klawisz funkcyjny **F1**, aby uzyskać pomoc kontekstową.

Po najechaniu wskaźnikiem myszy program wyświetla krótkie informacje (etykiety narzędzi) dotyczące przycisków na pasku narzędzi i pasku symboli, innych przycisków ikon i tytułów kolumn w oknach **Method**, **Sequence** i **Sample ID**.

1.4.3 Przegląd paska menu, paska narzędzi i paska symboli


Funkcje na pasku menu











Pasek menu znajduje się w górnej części interfejsu ASpect PQ i umożliwia inicjowanie wszystkich czynności związanych z obsługą oprogramowania. Menu i przyciski, które nie są dostępne dla bieżącej zawartości interfejsu roboczego, są wyświetlane na szaro. Niektóre pozycje menu, takie jak funkcja drukowania, są wyświetlane w zależności od innych otwartych okien.

| Pozycja menu | Opis |
|---------------------------|---|
| File | <ul style="list-style-type: none"> ■ Tworzenie, otwieranie i zapisywanie nowych metod, sekwencji i plików informacji o próbkach ■ Otwieranie danych wyników ■ Usuwanie metod i sekwencji ■ Eksport danych widmowych ■ Drukowanie aktywnego okna lub protokołu ■ Wywołanie trybu wersji roboczej protokołu ■ Uruchomienie instancji programu offline lub online ■ Otwieranie okna Quick Start ■ Zamykanie aplikacji ■ Bezpośrednie wywołanie ostatnio otwartych metod i sekwencji |
| Edit | <ul style="list-style-type: none"> ■ Kopiowanie i wklejanie zawartości pól tekstowych i pól wprowadzania ■ Kopiowanie do schowka wybranych wierszy listy wyników ■ Usuwanie zawartości listy wyników |
| View | <ul style="list-style-type: none"> ■ Otwieranie i zamykanie okien zawierających widoki i informacje podczas procesu analizy, np. przebiegu sygnału ■ Wybór skalowania osi sygnału widoków |
| Method Development | <ul style="list-style-type: none"> ■ Otwieranie okien wymaganych podczas rozwoju metody ■ Zapisywanie widma przeglądowego |
| Routine | <ul style="list-style-type: none"> ■ Uruchamianie, wstrzymywanie i anulowanie sekwencji pomiarów ■ Ponowne obliczanie wyników ■ Usuwanie kalibracji ■ Gaszenie plazmy ■ Przepłukiwanie systemu |
| System | <p>Dostępne, jeśli zainstalowany jest opcjonalny moduł „21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ”.</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ Konfiguracja Zarządzania użytkownikami ■ Zmiana hasła ■ Wyświetlanie ścieżki audytu ■ Podpisywanie wyników |
| Extras | <ul style="list-style-type: none"> ■ Otwieranie okna Data i Options ■ Otwieranie listy linii ■ Wyszukiwanie próbek ■ Drukowanie aktualnego ekranu ■ Sprawdzanie i przeprowadzanie konserwacji (chłodnica obiegowa) ■ Blokowanie stanowiska pracy |
| ? | <ul style="list-style-type: none"> ■ Wyświetlanie pomocy i informacji o wersji |

Pasek narzędzi







Przyciski na pasku narzędzi służą głównie do uruchamiania/przerywania i kontynuowania pomiaru sekwencyjnego. W polach paska narzędzi wyświetlane są aktualnie załadowane metody, sekwencje i identyfikatory próbek.





| Narzędzia | Opis |
|---|--------------------------------|
|  | Uruchamianie procedury pomiaru |

| Narzędzia | Opis |
|---|---|
|  | Pomiar zaznaczonych wierszy w sekwencji |
|  | Przerywanie uruchomionej procedury pomiarowej |
|  | Kontynuowanie przerwanej pomiaru sekwencyjnego |
|  | Obliczanie na nowo wyników |
|  | Uruchamianie/zatrzymywanie pompy w urządzeniu ICP-OES |
|  | |
|  | Przyspieszanie pompy (płukanie ścieżki próbki) |
|  | Gaszenie plazmy (szybkie wyłączenie) |
|  | Otwieranie plików Można załadować do programu zapisane metody, sekwencje lub identyfikatory próbek i użyć ich do bieżącej analizy. |
|  | Tworzenie nowego arkusza roboczego |
| Plasma-Cam | Aktywacja kamery plazmy Oprogramowanie stale wyświetla obraz z kamery z nagraniem plazmy. Można szybko rozpoznać ewentualne nieprawidłowości, takie jak tworzenie się plazmy pierścieniowej podczas procesu zapłonu. Obraz z kamery można przyciąć za pomocą polecenia menu Settings Crop camera image w oknie kamery. |

Pasek symboli

Pasek symboli zapewnia szybki dostęp do najważniejszych funkcji programu ASpect PQ. Kliknięcie ikony otwiera okno z odpowiednią funkcją programu. Po instalacji pasek symboli znajduje się po lewej stronie ekranu, ale można go dowolnie przesuwać, przytrzymując go przyciskiem myszy.

| Ikona | Opis |
|---|---|
|  | Kontrola rozpylania: <ul style="list-style-type: none"> ▪ Zapalenie/gaszenie plazmy ▪ Ustawienia przepływów gazu ▪ Sprawdzanie pompy pod kątem tłoczenia próbki do rozpylacza ▪ Regulacja transferowego układu optycznego ▪ Optymalizacja mocy plazmy i gazu rozpylającego |
|  | Sprawdzanie funkcji spektrometru: <ul style="list-style-type: none"> ▪ Dane urządzenia ▪ Test korekt długości fali ▪ Rozpoczynanie pomiaru przy testowej długości fali ▪ Rozpoczynanie ciągłego pomiaru w celu optymalizacji urządzenia |
|  | Otwarcie okna metody |
|  | Definiowanie autosamplera |
|  | Otwarcie okna z plikiem informacji o próbce |
|  | Otwarcie okna sekwencji |

| Ikona | Opis |
|---|--|
|  | Otwarcie okna z kalibracją |
|  | Otwarcie okna z danymi kontroli jakości |
|  | Otwieranie zarządzania danymi |
|  | Zarządzanie arkuszami roboczymi, otwieranie zapisanych arkuszy roboczych |



1.4.4 Często używane elementy obsługowe

Różne przyciski, funkcje myszy i funkcje klawiatury są bardzo często używane w ASpect PQ z tym samym lub bardzo podobnym znaczeniem.

Te elementy obsługowe są tutaj opisane w sposób ogólny; w razie potrzeby szczegółowe informacje można znaleźć w opisie poszczególnych okien.

Przyciski ogólne

Znaczenie przycisków ikon jest opisane w wyświetlanych podpowiedziach, gdy wskaźnik myszy znajduje się nad daną ikoną.

| Przycisk | Opis |
|---|---|
| OK | Zamknięcie okna i zastosowanie ustawień |
| Cancel | Zamknięcie okna i odrzucenie zmian |
| Accept | Zastosowanie ustawień bez zamykania okna |
| Close | Zamknięcie okna, ustawienia mogą nie zostać zapisane na stałe |
| Open | Otwarcie okna wyboru w celu załadowania pliku lub rekordu danych |
| Save | Otwarcie okna wyboru w celu zapisania pliku lub rekordu danych |
|  | Otwarcie okna dialogowego wyboru, np. okna dialogowego wyboru ścieżki |
|  | Otwarcie okna Print . Zawartość bieżącego okna można wydrukować lub wyeksportować do pliku |

Tabele

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

Stocks... Calibration Table




W niektórych oknach wartości są wprowadzane bezpośrednio do tabeli. W zależności od rodzaju wpisu komórka tabeli zachowuje się jak pole wprowadzania, lista wyboru lub pole wprowadzania ograniczonego zakresu wartości liczbowych za pomocą klawiszy strzałek.

- ▶ Aby wybrać wiersz tabeli, kliknij odpowiedni wiersz w pierwszej kolumnie tabeli z szarym tłem. Pasek wyboru można następnie przesuwać za pomocą klawiszy strzałek na klawiaturze.
- ▶ Aby zmienić szerokość kolumny, przesuń wskaźnik myszy do linii granicznej między dwiema kolumnami, aż pojawi się podwójna strzałka. Naciśnij lewy przycisk myszy i zmień szerokość kolumny.

W polach wprowadzania dostępne są następujące funkcje dodatkowe:





- ▶ F2 włącza tryb edycji. W tym trybie klawisze strzałek na klawiaturze są używane do edycji znak po znaku. Ponowne naciśnięcie **F2** aktywuje tryb domyślny, w którym klawisze kursora są używane do nawigacji między komórkami.
- ▶ Teksty można kopiować i wklejać do schowka Windows za pomocą menu **Edit | Copy** i **Edit | Insert** lub za pomocą kombinacji klawiszy Ctrl+C i Ctrl+V.

Przyciski w tabelach

| Przycisk | Funkcja |
|---|---|
| Append | Wstawia nowy wiersz tabeli na końcu listy. |
| Insert | Wstawia nowy wiersz tabeli przed zaznaczonym wierszem tabeli. |
| Delete | Usuwa zaznaczony wiersz tabeli. |
|  | Przenosi zaznaczony wiersz tabeli o jedną pozycję w górę. Wskazówka: Aby można było przenieść wiersz tabeli, należy zaznaczyć go w całości. W tym celu kliknij numer danego wiersza w pierwszej kolumnie tabeli. |
|  | Przenosi zaznaczony wiersz tabeli o jedną pozycję w dół. |
|  | Stosuje wartość z zaznaczonej komórki do wszystkich kolejnych wierszy tabeli tego samego typu próbki (próbka, wzorce, QC itp.). Jeśli pole wyboru inc. (= przyrost) jest aktywne , wartość ta jest automatycznie zwiększana, np. próbka001, próbka002... |

Grafiki

W grafikach można otworzyć menu kontekstowe za pomocą prawego przycisku myszy, aby skopiować grafikę lub całe okno w formacie graficznym do schowka systemu Windows. W różnych oknach grafiki dostępne są dodatkowe przyciski ikony:

| Ikona | Funkcja |
|---|--|
|  | Aktywuje tryb powiększenia Po aktywowaniu przycisku przytrzymaj lewy przycisk myszy i rozciągnij ramkę wokół obszaru graficznego, który ma zostać powiększony, a następnie puść przycisk myszy. |
|  | Wyłącza tryb powiększenia i przełącza wyświetlacz z powrotem do pierwotnego skalowania |
|  | Aktywuje tryb tekstowy Po aktywowaniu przycisku przytrzymaj lewy przycisk myszy i narysuj ramkę na grafice, a następnie wpisz tekst. Dwukrotne kliknięcie istniejącego tekstu otwiera okno umożliwiające jego zmianę lub usunięcie. Istniejący tekst można przenieść za pomocą kombinacji klawiszy Ctrl + prawy przycisk myszy. |
|  | Aktywuje tryb zaznaczania na widokach krzywej sygnału lub widma Za pomocą lewego przycisku myszy do punktów pomiarowych dodawane są etykiety. |

Przyciski funkcji

| Ikona | Funkcja |
|-------|---|
| F1 | Wywołanie pomocy kontekstowej |
| F2 | Edycja komórek tabeli |
| F5 | Rozpoczęcie wydruku ekranu |
| F6 | Pomiar wybranego wiersza sekwencji (pozycja menu Routine Run Selected Sequence Row...) |
| F7 | Wyświetlanie dodatkowych okien widoku (np. krzywej sygnału) |
| F8 | Zamykanie dodatkowych okien widoku |
| F10 | Przełączanie między paskiem menu obszaru roboczego a oknem wyników przy obsłudze za pomocą klawiatury |
| F11 | Kontynuacja zatrzymanego przebiegu pomiaru (pozycja menu Routine Continue) |
| F12 | Uruchamianie i zatrzymywanie przebiegu pomiaru (pozycje menu Routine Start Sequence... i Routine Stop) |

Korzystanie z drukarki

W ASpect PQ używana jest domyślna drukarka skonfigurowana w systemie Windows.

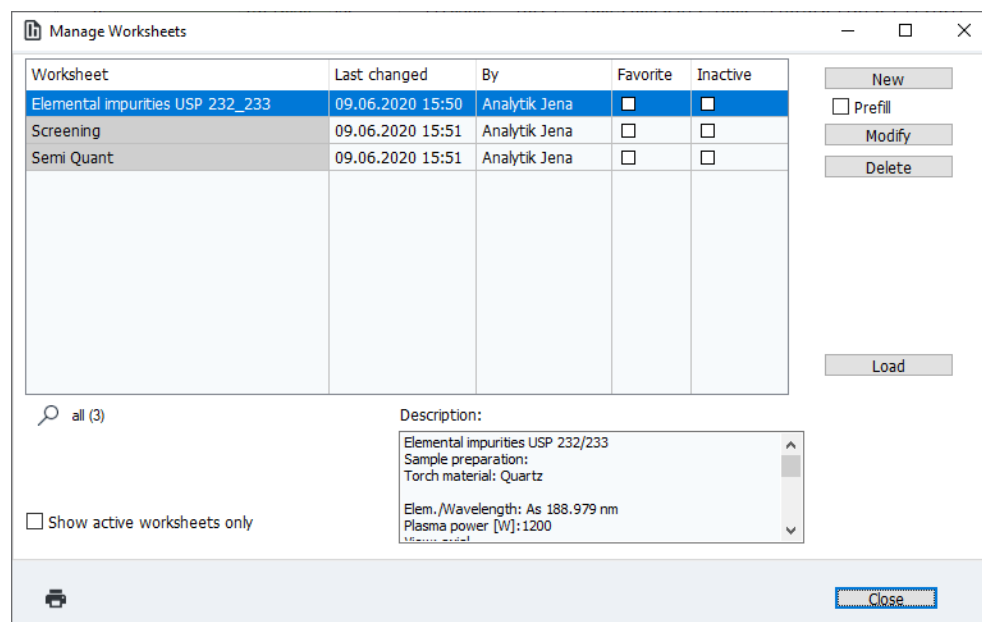
2 Arkusze robocze

Arkusze robocze to folder zawierający metodę i sekwencję. Jako uzupełnienie w arkuszu roboczym mogą być zapisane ustawienia pliku ID próbki i danych wyników. Z załadowanym arkuszem roboczym można od razu uruchomić procedurę pomiarową.

Można tworzyć nowe arkusze robocze, zmieniać, usuwać, dezaktywować lub ładować arkusze robocze. Funkcje do tego służące można znaleźć w oknie **Manage Worksheets**.

Otwórz okno **Manage Worksheets**, klikając  na pasku symboli.

Elementy w oknie Manage Worksheets



| Przyciski / opcje | Opis |
|------------------------------------|---|
| New | Tworzenie nowego arkusza roboczego |
| Prefill | Przejęcie załadowanej już sekwencji i metody. |
| Modify | Edycja zaznaczonego arkusza roboczego |
| Delete | Usunięcie zaznaczonego arkusza roboczego |
| Load | Załadowanie zaznaczonego arkusza roboczego dla pomiaru |
| Show active worksheets only | Ukrycie wszystkich arkuszy roboczych w tabeli oznaczonych jako Inactive . |
| Description | Opis zaznaczonego arkusza roboczego Informacje te są zapisywane podczas tworzenia arkusza roboczego. |

W tabeli wyświetlane są następujące informacje dotyczące arkuszy roboczych:

| Kolumna tabeli | Opis |
|---------------------|--|
| Worksheet | Nazwa arkusza roboczego |
| Last changed | Data ostatniej zmiany arkusza roboczego |
| By | Użytkownik, który dokonał ostatniej zmiany. Nazwa użytkownika jest pobierana z Quickstart. |
| Favorite | Jeśli ta opcja jest aktywna, arkusz roboczy jest wyświetlany na zakładce Favorites w oknie Quick Start . |

| Kolumna tabeli | Opis |
|----------------|--|
| Inactive | Jeśli ta opcja jest aktywna, ten arkusz roboczy nie jest wyświetlany w Quickstart. Arkusze robocze oznaczone jako nieaktywne można jednak załadować z okna Manage Worksheets . |

Zobacz także

📖 Rozpoczynanie z arkuszem roboczym [▶ 9]

2.1 Tworzenie nowego arkusza roboczego

Arkusze robocze tworzy się w oknie **New Worksheet**.

New Worksheet

Name: ★ Favorite

Method: Inactive

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:

Elementy w oknie New Worksheet

| Pole / opcja | Opis |
|------------------|---|
| Name | Wprowadzanie nazwy arkusza roboczego |
| Method | Metoda zapisana w arkuszu roboczym Otwórz okno bazy danych za pomocą <input type="checkbox"/> i wybierz metodę. |
| Sequence | Sekwencja zapisana w arkuszu roboczym Otwórz okno bazy danych za pomocą <input type="checkbox"/> i wybierz sekwencję. |
| Sample ID | Opcjonalnie można wprowadzić ustawienia ładowania pliku ID próbki: (none) : Dla pliku ID próbki nie są zapisywane żadne ustawienia. |

| Pole / opcja | Opis |
|---------------------|---|
| | <p>Open folder containing Sample ID files: Po załadowaniu arkusza roboczego otwierany jest folder, w którym znajduje się plik ID próbki. Kliknij  i wybierz folder.</p> <p>Load Sample ID file: Podczas ładowania arkusza roboczego automatycznie ładowany jest plik ID próbki. Kliknij  i wybierz plik. Można również użyć symboli zastępczych „*“ i „?“, aby zdefiniować maskę pliku.</p> |
| Results file | <p>Opcjonalnie można wprowadzić ustawienia zapisywania wyników:</p> <p>(none) Pomiar rozpoczyna się od okna Start, w którym nadawana jest nazwa pliku wynikowego i ustawiane jest miejsce zapisu.</p> <p>Always create new file (append time stamp) Pliki wyników sekwencji są zapisywane w nowym pliku. Nazwa pliku składa się ze stałego elementu (nazwy) i znacznika czasu pomiaru. Wybierz folder, w którym plik ma zostać zapisany i wprowadź jego nazwę.</p> <p>Create and append to file Przy pierwszym uruchomieniu sekwencji generowany jest plik wyników. Przy każdym kolejnym uruchomieniu sekwencji do tego pliku dołączane są wyniki.</p> |
| Description | <p>W polu Description początkowo domyślnie wyświetlane są niektóre parametry analizy wydodrębnione z metody. Można dowolnie edytować te informacje i tym samym dać konkretne instrukcje dotyczące korzystania z arkusza roboczego. Wpisy pojawiają się w oknie Quickstart i w oknie Manage Worksheets dla wybranego arkusza roboczego.</p> |
| Favorite | <p>Można oznaczyć arkusz roboczy jako ulubiony, klikając gwiazdkę:</p> <p>Żółta gwiazdka: Ulubiony</p> <p>Szara gwiazdka: Nie jest ulubionym</p> |
| Inactive | <p>Jeśli ta opcja jest aktywna, ten arkusz roboczy nie jest wyświetlany w Quickstart.</p> <p>Arkusz roboczy oznaczony jako nieaktywny można załadować z okna Manage Worksheets.</p> |

Definiowanie arkusza roboczego


- ▶ Aby utworzyć nowy arkusz roboczy, otwórz okno **Manage Worksheets**, klikając na  na pasku symboli, i kliknij na **New**.
Alternatywnie można kliknąć  na pasku narzędzi.
✓ Zostanie wyświetlone okno **New Worksheet**.
- ▶ Wybierz metodę i sekwencję.
Wskazówka: W sekwencji można później załadować dodatkowe metody jako działania.
- ▶ Opcjonalnie można dokonać ustawień dotyczących zapisu pliku wyników i użycia pliku ID próbki oraz edytować opis (patrz niżej).
- ▶ Zamknij okno, klikając **OK**.
✓ Nowy arkusz roboczy pojawi się w oknie **Manage Worksheets** i można go załadować.

Zobacz także

-  Uruchamianie procedury pomiaru [▶ 66]


2.2 Edycja arkusza roboczego

Można edytować wszystkie ustawienia w istniejącym arkuszu roboczym.

- ▶ Klikając  na pasku symboli, otwórz okno **Manage Worksheets**.
- ▶ Wybierz arkusz roboczy i kliknij **Modify**.
Pojawi się okno **Edit Worksheet**.
- ▶ Wprowadź zmiany tak samo, jak podczas tworzenia nowego arkusza roboczego.

2.3 Ładowanie arkusza roboczego

Arkusz roboczy można wybrać w oknie **Quick Start** lub załadować w oknie **Manage Worksheets** :

- ▶ Otwórz okno **Manage Worksheets**, klikając  na pasku symboli.
- ▶ Wybierz arkusz roboczy w tabeli kliknięciem myszy i kliknij **Load**.
 - ✓ Arkusz roboczy zostaje załadowany, a sekwencja wyświetlona w oknie głównym.

W zależności od konfiguracji arkusza roboczego można teraz powiązać metodę i sekwencję załadowaną za pomocą arkusza z plikiem identyfikatora próbki lub od razu rozpocząć pomiar.




WSKAZÓWKA

Podczas ładowania arkusza roboczego zawsze używane są aktualne wersje metody i sekwencji.

W przypadku wczytania metody lub sekwencji, która różni się od arkusza roboczego, ustawienia pliku wyników i identyfikatorów próbek w arkuszu roboczym zostaną zresetowane.

2.4 Usuwanie arkusza roboczego

Można usunąć arkusz roboczy, który nie jest potrzebny.


- ▶ Klikając  na pasku symboli, otwórz okno **Manage Worksheets**.
- ▶ Zaznacz arkusz roboczy i kliknij **Delete**.
 - ✓ Arkusz roboczy zostaje usunięty po potwierdzeniu pytania.

3 Metody

W Metodach przechowywane są parametry wymagane do analizy:

- Wybór linii analizy
- Parametry oceny linii
- Ustawienia plazmy i spektrometru
- Rodzaj doprowadzania próbki
- Parametry kalibracji
- Oceny statystyczne
- Ustawienia kontroli i zapewnienia jakości
- Ustawienia wyjścia zmierzonych wartości

Na podstawie metody mogą być tworzone sekwencje pomiarowe. Sekwencje definiują kolejność, w jakiej próbki i działania mają być przetwarzane w ramach procedury pomiarowej. Zapisane metody mogą być używane do analiz z różnymi sekwencjami.


Otwórz okno **Method**, klikając  na pasku symboli. Wyświetlana jest ostatnio aktywna metoda. Jeśli po uruchomieniu ASpect PQ użytkownik nie załaduje metody, wyświetlane okno zawiera ustawienia domyślne lub puste wskazania.

3.1 Tworzenie, zapisywanie i ładowanie metod

Metody są przechowywane w bazie danych. Jeśli zmienisz istniejącą metodę i zapiszesz zmienioną metodę pod tą samą nazwą, oprogramowanie utworzy nową wersję metody. Oznacza to, że istniejąca metoda nie może zostać nadpisana i w ten sposób przypadkowo usunięta.


Dalsze funkcje eksportu, importu lub usuwania metod można znaleźć w oknie **Data | Data management**.

Zobacz także

-  Zarządzanie metodami i sekwencjami [[▶ 119](#)]

3.1.1 Tworzenie nowej metody

Podczas tworzenia nowej metody można użyć ustawień domyślnych, parametrów zapisanej metody lub bieżących parametrów metody.

- ▶ Wybierz pozycję menu **File | Create new Method**.
Jeśli jeszcze nie została aktywowana żadna metoda, można alternatywnie kliknąć .
- ▶ Aktywuj jedną z trzech opcji w oknie **New method**:
 - **Based on default parameters**: Otwórz okno **Method** z domyślnymi ustawieniami kalibracji i statystyk.
 - **Based on current parameters**: Otwórz okno **Method** z bieżącymi parametrami metody.
 - **Based on saved method**: W oknie bazy danych **Load method** wybierz metodę.
- ▶ Potwierdź wybór za pomocą **OK**.
 - ✓ Zostanie wyświetlone okno **Method** z wybranymi ustawieniami wstępnymi.
- ▶ Zdefiniuj metodę w różnych zakładkach i dokonaj niezbędnych optymalizacji.
- ▶ Zaakceptuj ustawione parametry metody za pomocą przycisków **OK** lub **Accept**.

- ✓ Możesz teraz zapisać metodę lub użyć jej do następnej analizy. Na potrzeby analizy utwórz sekwencję w oparciu o metodę i opcjonalnie wypełnij tabelę ID próbki. Następnie rozpocznij pomiar.

Zobacz także


- 📖 Definiowanie parametrów metody [▶ 25]

3.1.2 Zapisywanie metody

Po wprowadzeniu parametrów metody zapisz metodę w bazie danych. Umożliwia to załadowanie metody w późniejszym terminie do dalszych pomiarów lub w celu włączenia jej do arkuszy roboczych. W oknie **Save method** metody są zapisywane w bazie danych. Można wprowadzić dodatkowe dane, aby skategoryzować metodę i ułatwić jej znalezienie.

Elementy w oknie Save method

| Opcja | Opis |
|------------------------------|--|
| Name | Nazwa metody |
| Cat. | Kategoria (trzy znaki) do dodatkowego oznaczenia i sortowania metod Ten wpis jest opcjonalny. Jeśli zainstalowany jest Moduł zgodności z przepisami FDA 21 CFR Part 11, za pomocą wybranych kategorii można oznaczyć metodę jako udostępnioną. Kategorie udostępnionych metod definiuje się w ustawieniach Zarządzania użytkownikami. |
| Table | Przegląd istniejących metod |
| Sort by | Za pomocą opcji w tej grupie można sortować listę metod. Jeśli opcja Current version only jest aktywna, w przypadku metod o tej samej nazwie wyświetlana jest tylko najnowsza wersja. |
| Use as routine method | Jeśli ta opcja jest aktywna, metoda jest dostępna w trybie programu Routine . Tryb programu wybiera się w oknie Quick Start . Jeśli zainstalowany jest opcjonalny „Moduł 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ”, opcja ta nie jest dostępna do wyboru. |
| Predefined methods | Zapisywanie istniejących krzywych kalibracji z metodą Krzywe kalibracji mogą być wykorzystane do dalszych analiz. |

| Opcja | Opis |
|--------------------|--|
| Description | <p>Opcjonalnie można wprowadzić bardziej szczegółowe objaśnienia metody</p> <p>Kliknięcie  otwiera listę predefiniowanych uwag. Zarządzanie tymi uwagami odbywa się w oknie Data .Default descriptions</p> |

Zapisywanie metody

- ▶ W oknie **Method** kliknij **Save** lub wybierz pozycję menu **File | Save | Method**.
 - ✓ Zostanie wyświetlone okno **Save method**.
- ▶ Wprowadź nazwę metody i wybierz dalsze parametry.
 - ✓ Metoda zostaje zapisana w bazie danych. Jeśli używana jest istniejąca nazwa metody, w bazie danych tworzona jest nowa wersja metody.



WSKAZÓWKA

Metoda jest również zapisywana w pliku wyników pomiarów. Po otwarciu pliku wyników można przywrócić metodę z pliku wyników. Dalsze funkcje zarządzania metodami są dostępne w oknie **Data | Data management**.


Zobacz także

- 📖 Konfiguracja ogólnych ustawień Zarządzania użytkownikami [▶ 146]
- 📖 Okno Quick Start [▶ 8]
- 📖 Zarządzanie metodami i sekwencjami [▶ 119]

3.1.3 Ładowanie metody


Zaplane metody można załadować i wraz z sekwencją uruchomić procedurę pomiarową. Parametry metody mogą być ładowane z bazy danych metod lub z istniejącego pliku wyników.

Ładowanie z bazy danych

- ▶ Otwórz okno bazy danych za pomocą jednej z poniższych alternatyw:
 - Kliknij ikonę folderu  w pasku narzędzi obok pola **Method**.
 - Wybierz pozycję menu **File | Load method**.
 - Kliknij **Open** w oknie **Method**.
- ▶ Wybierz żądaną metodę z listy.
- ▶ W polu **Cat.** można ograniczyć wyświetlane metody, wybierając kategorię. Aby zobaczyć wszystkie metody, usuń wpis w polu **Cat.**
- ▶ Aktywuj pole wyboru **Current version only**, jeśli w przypadku metod o tej samej nazwie ma być wyświetlana tylko metoda z najwyższą wersją.
- ▶ Zamknij okno **Method** za pomocą **OK**.
 - ✓ Załadowana została żądana metoda. Metoda jest wyświetlana na pasku narzędzi **Meth**.

Ładowanie z pliku wyników

Metodę można wyodrębnić z pliku wyników wyświetlanego w oknie głównym.

- ▶ Kliknij prawym przyciskiem myszy dowolną próbkę.
- ▶ Wybierz **Load method from results** z menu kontekstowego.
- ▶ Po zapytaniu, czy bieżące parametry metody zostaną nadpisane, można wyświetlić metodę, klikając .



3.2 Definiowanie parametrów metody

W oknie **Method** można zdefiniować parametry pomiaru do analizy i parametry do oceny wyników.

Otwórz okno **Method**, klikając .

Przyciski w oknie Method

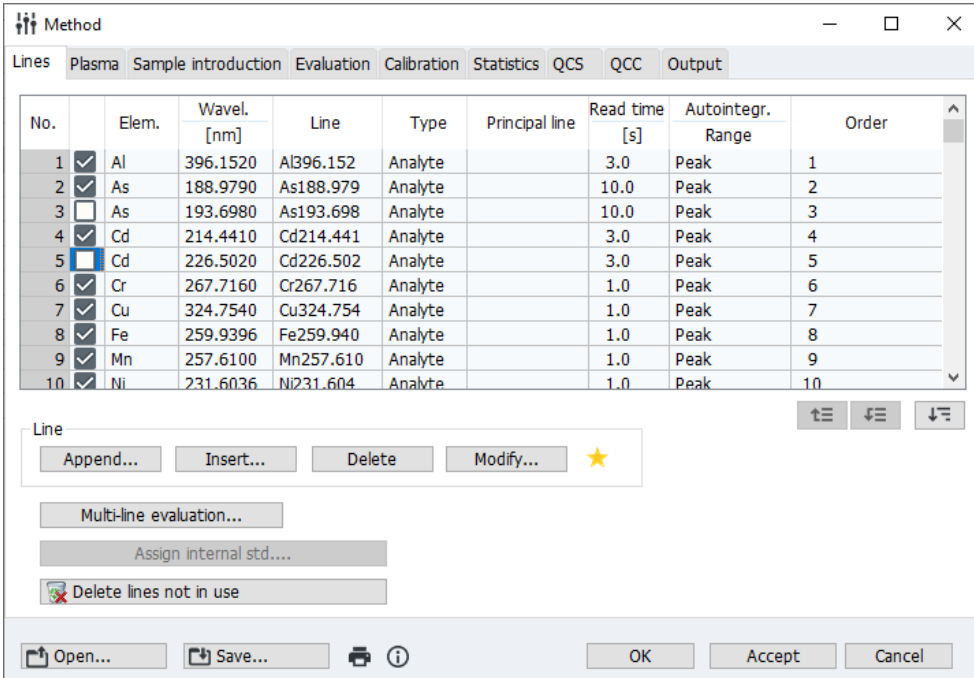
W dolnej części okna znajdują się przyciski, które są zawsze dostępne.

| Przycisk | Opis |
|---|---|
| Open | Otwieranie zapisanej metody |
| Save | Zapisywanie bieżących parametrów metody |
|  | Drukowanie parametrów metody |
|  | Przeglądanie właściwości metody |
| OK | Przejmowanie parametrów w oknie i zamykanie okna |
| Accept | Przejmowanie parametrów w oknie bez zamykania okna |
| Cancel | Nieprzejmowanie parametrów w oknie i zamykanie okna |

3.2.1 Definiowanie linii analizy (okno Method | Lines)





W oknie **Method | Lines** wybierz linie analizy dla pomiaru.

Okno Method | Lines



Parametry tabeli linii

| Kolumna tabeli | Opis |
|--|--|
| No. | Kolejność wybranych linii w tabeli |
| <input type="checkbox"/> / <input checked="" type="checkbox"/> | Dostępne tylko w trybie Method Development (nie z „Modułem 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ”). |

| Kolumna tabeli | Opis |
|--------------------------|--|
| | Zaznaczenie ułatwia rozwój metody, w której na początku mierzonych jest kilka linii jednego pierwiastka, a następnie wybierana jest odpowiednia linia. Jeśli linia pierwiastka jest zaznaczona, jest ona używana na potrzeby analizy i mierzona. Nieaktywne linie są wyłączone z dalszej analizy i nie są mierzone. Nieaktywne linie nie są jeszcze usunięte z tabeli linii. |
| Elem. | Symbol pierwiastka, który ma być analizowany |
| Wavelength | Długość fali linii analizy w nm |
| Line | Oznaczenie linii analizy Domyślnie nazwa linii składa się z symbolu pierwiastka i długości fali. Nazwę można dowolnie edytować i musi ona być unikalna. |
| Type | Wybór pomiędzy Analyte (linia do analizy) i Int.std. (wewnętrzna linia odniesienia) |
| Principal line | Wybór i wyświetlenie linii analizy, z którą jednocześnie mierzona jest bieżąca linia (pomiar symultaniczny) Czas pomiaru można skrócić, rejestrując przy jednym ustawieniu spektrometru linie znajdujące się blisko siebie. Po kliknięciu Multi-line evaluation wyświetlane są możliwe kombinacje. |
| Read time | Całkowity czas pomiaru jednej linii analizy |
| Autointegr. Range | Automatyczny wybór czasu całkowania, tak aby detektor CCD był optymalnie oświetlony i nie dochodziło do prześwietlenia W przypadku prześwietlenia, ładunek niepochłonięty przez piksel przelewa się na sąsiednie piksele i powoduje błędy pomiaru (efekt bloomingu). W celu określenia czasu całkowania należy wybrać rozważany zakres: Spectrum Czas całkowania jest optymalizowany pod kątem najwyższego piksu w zakresie widmowym linii. Ta opcja jest wstępnie ustawiona i prowadzi do bezpiecznego wyniku. Peak Czas całkowania jest zoptymalizowany pod kątem piksu analizy. W przypadku wyboru tej opcji zakres dynamiczny detektora CCD jest optymalnie wykorzystywany do analizy. Należy jednak zwrócić uwagę, aby w bezpośrednim sąsiedztwie piksela analizy nie było wyższego piksu. W takim przypadku wynik pomiaru może zostać zafałszowany przez efekt bloomingu. etector Czas całkowania zostaje dostosowany do najwyższego piksu na detektorze. Przy tej opcji żaden obszar detektora nie zostanie prześwietlony, ewentualnie piksele piksu analizy mogą nie zostać optymalnie oświetlone. |
| Order | Kolejność w analizie Kolejność pomiaru można określić dowolnie. Uwaga: po zaznaczeniu numeru można przypisać rosnące numery do kolejnych wierszy, klikając  . Za pomocą przycisków  i  można uporządkować wybrane wiersze (linie pierwiastków) w tabeli w żądanej kolejności pomiaru, wprowadzić jako kolejność „1” w pierwszym wierszu i przyciskiem  przypisać kolejność pomiaru rosnąco do wszystkich pozostałych linii analizy. |

Przyciski w grupie Lines

Przyciskami **Append**, **Insert** i **Modify** dodaje się kolejne linie analizy do tabeli linii lub edytuje wybraną linię. Kliknięcie jednego z tych przycisków otwiera okno **Select element/line** do wprowadzania dalszych danych. Przyciskiem **Delete** usuwa się jedną lub więcej wybranych linii analizy z metody.

Dalsze przyciski i pola wyboru

| Przycisk | Opis |
|----------------------------------|--|
| Multi-line evaluation | Znajdowanie kombinacji linii analizy, które mogą być rejestrowane razem z jednym ustawieniem spektrometru Te linie analizy mogą być mierzone jednocześnie. |
| Assign internal std. | Łączenie i korygowanie linii analizy za pomocą wzorca wewnętrznego |
| Delete lines not in use | Dostępne tylko w trybie programu Method Development (nie z „Modułem 21 CFR Part 11 Compliance Aspect PQ”). Usunięcie wszystkich nieaktywnych linii z listy metod. Uwaga: metody mogą być zapisywane i używane jako metody rutynowe tylko wtedy, gdy wszystkie linie w tabeli linii są używane. |
| Optimized measuring order | Automatyczne sortowanie linii analizy według długości fali i warunków pomiaru w celu skrócenia całkowitego czasu pomiaru Jeśli pole wyboru jest aktywne, nie jest już możliwe ręczne sortowanie linii analizy. Uwaga: czas pomiaru zależy od liczby i sortowania linii analizy oraz warunków pomiaru. W ten sposób również poprzez wybór podobnych parametrów dla plazmy i transferowego układu optycznego można skrócić czas pomiaru dla wielu linii analizy. |

Zobacz także

- 📖 Jednoczesny pomiar linii [▶ 30]
- 📖 Często używane elementy obsługowe [▶ 15]
- 📖 Definiowanie wzorców wewnętrznych [▶ 31]

3.2.1.1 Wstawianie linii analizy do tabeli liniiLinie analizy wybiera się w oknie **Select element/line**.

Elementy w oknie Select element/line

Karta **Elements** zawiera układ okresowy ze wszystkimi pierwiastkami, które można analizować za pomocą techniki ICP-OES (z ciemnoszarymi przyciskami i czarnymi symbolami pierwiastków). Pierwiastki „wyszarzone” są niedostępne. Karta **Line interferences** pokazuje dla wybranej linii znane możliwe interferencje ze względnymi czułościami.

Select element/line - [Selected: 1 from 186]

Elements Line interferences Select Element:

| Element | Wavel. [nm] | Type | BEC(ax.) [mg/L] | Rank |
|--|-------------|------|-----------------|------|
| <input checked="" type="checkbox"/> Si | 251.6112 | I | 0.05 | 1 |
| <input type="checkbox"/> Si | 212.4120 | I | 0.08 | 2 |
| <input type="checkbox"/> Si | 288.1577 | I | 0.13 | 3 |
| <input type="checkbox"/> Si | 221.6669 | I | 0.15 | 4 |
| <input type="checkbox"/> Si | 220.7978 | I | 0.61 | 5 |
| <input type="checkbox"/> Si | 252.4108 | I | 0.19 | 6 |
| <input type="checkbox"/> Si | 198.8370 | I | 0.25 | 7 |
| <input type="checkbox"/> Si | 190.0730 | I | 0.65 | 8 |
| <input type="checkbox"/> Si | 221.0892 | I | 0.28 | 9 |
| <input type="checkbox"/> Si | 251.9202 | I | 0.25 | 10 |
| <input type="checkbox"/> Si | 250.6897 | I | 0.15 | 11 |
| <input type="checkbox"/> Si | 252.8508 | I | 0.16 | 12 |
| <input type="checkbox"/> Si | 251.4316 | I | 0.19 | 13 |
| <input type="checkbox"/> Si | 243.5150 | I | 0.57 | 14 |
| <input type="checkbox"/> Si | 205.8130 | I | 1.07 | 15 |

Sort by (15 Line(s) found):
 Element Wavelength BEC
 Sort selection as list
 Deselect

Lines Favorites

Extended line catalog... User-defined lines... OK Cancel

Arkusz tabeli **Favorites** zawiera wstępny wybór linii z zalecanymi zastosowaniami (słowa kluczowymi). Przy wyborze tych linii do metody przesyłane są jednocześnie zoptymalizowane parametry metody. Można także dodać do tych ulubionych własne linie.

Arkusz tabeli **Lines** zawiera wszystkie możliwe do wybrania linie z następującymi informacjami:

| Kolumna tabeli | Opis |
|----------------|--|
| Element | Element |
| Wavel. | Długość fali analizy w nm |
| Type | Widok typu atomizacji: I: Linia atomowa II: Linia jonowa |
| BEC | Typowa wartość BEC linii analizy Wartość BEC (równoważne stężenie w tle) to stężenie analitu, które wytwarza intensywność równoważną tłu. Niższa wartość odpowiada tym samym wyższej czułości. Wartości BEC zostały wyznaczone w następujących warunkach: obserwacja osiowa, moc 1200 W, przepływ gazu plazmowego 12 L/min, przepływ gazu pomocniczego 0,5 L/min, przepływ gazu rozpylającego 0,6 L/min. |
| Rank | Ranking rekomendacji linii analizy Rekomendacja linii analizy zależy zarówno od czułości, jak i możliwych zakłóceń przez sąsiednie linie innych pierwiastków. Im dalej w rankingu znajduje się dana linia, tym większe są szanse na osiągnięcie dobrych wyników z tą linią analizy. |

Za pomocą opcji **Element**, **Wavelength** lub **BEC** można sortować tabelę linii w porządku rosnącym według symbolu chemicznego, długości fali lub BEC.

Jeśli opcja **Sort selection as list** jest aktywna, linie są wstawiane do tabeli linii metody w kolejności sortowania listy (**Sort by**). Jeśli ta opcja jest nieaktywna, linie są wstawiane w kolejności, w jakiej zostały zaznaczone.

Wybór linii

- ▶ W oknie **Method | Lines** kliknij **Append** lub **Insert**.
 - ✓ Zostanie wyświetlone okno **Select element/line**.
- ▶ Kliknięcie jednego z ciemnoszarych symboli pierwiastków w układzie okresowym powoduje wyświetlenie tylko linii wybranego pierwiastka w tabelach **Lines** i **Favorites**. Alternatywnie wprowadź symbol pierwiastka w polu **Select Element**. Skasuj wpis w polu **Select Element**, aby wyświetlić pełną listę pierwiastków w tabeli linii.
- ▶ W arkuszu tabeli **Favorites** zaznacz linie zgodnie z ich użyciem lub zaznacz pola wyboru dla żądanych linii w arkuszu tabeli **Lines**.
- ▶ Przejdź do karty **Line interferences** i sprawdź wybrane linie pod kątem znanych interferencji.
- ▶ Kontynuuj w ten sposób, aż wybierzesz linie dla każdego analitu. Zamknij okno za pomocą **OK**.
 - ✓ Zaznaczone linie zostają przeniesione do okna **Method | Lines**.

Uwaga:

podczas opracowywania metody wybierz wiele linii dla każdego analitu.

Rozszerzony katalog linii

Po instalacji lista linii zawiera wstępny wybór linii analizy. Można to uzupełnić o linie analizy z rozszerzonego katalogu linii.

- ▶ W oknie **Select element/line | Elements** kliknij **Extended line catalog**.
- ▶ Zaznacz żądane linie na liście, klikając je. Kliknij ponownie pojedynczą linię, aby ją odznaczyć. Za pomocą **Deselect** można usunąć wszystkie zaznaczenia.
- ▶ Przenieś wybór do listy linii, klikając **Add to lines table**.

**WSKAZÓWKA**

Linie dodane z rozszerzonego katalogu linii nie mogą już zostać usunięte z katalogu domyślnego.

Tworzenie i edytowanie własnych linii analizy

Można tworzyć własne linie analizy i używać ich do analizy.

- ▶ W oknie **Select element/line** kliknij **User-defined lines**.
- ▶ W oknie **Edit lines** wprowadź dane dla **Element** i **Wavelength** i wybierz z listy **Type**.
- ▶ Przenieś wpisy na własną listę linii za pomocą **Add**.
- ▶ Kliknij **Close**, aby przenieść własne linie na listę linii.

Możesz edytować własne linie lub usunąć je z listy linii.

- ▶ Aby edytować linię na własnej liście, zaznacz linię, klikając ją na liście w oknie **Edit lines**. Wprowadź dane nowej linii, a następnie kliknij **Modify**.
- ▶ Usuń wybrany wpis z listy, klikając **Delete**.

Zobacz także

- 📖 Definiowanie swoich ulubionych linii [▶ 31]

3.2.1.2 Jednoczesny pomiar linii

Linie, które są rejestrowane razem, z jednym ustawieniem spektrometru, mogą być mierzone jednocześnie, co skraca czas analizy. Za pomocą funkcji **Multi-line evaluation** można znaleźć te linie w bieżącej metodzie i połączyć je do analizy.

- ▶ W oknie **Method | Lines** kliknij **Multi-line evaluation**.
Pojawi się okno o tej samej nazwie z przeglądem możliwych kombinacji linii.

Elementy w oknie Multi-line evaluation

W oknie **Multi-line evaluation** wymienione są możliwe kombinacje linii. Wykres słupkowy pokazuje położenie linii na detektorze dla wybranego wiersza listy.

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 |

No combined lines
Swap line priority

Line positions on CCD [nm] Show all line positions


OK Cancel

| Kolumny tabeli / przycisk | Treść |
|---------------------------|--|
| Pole wyboru | Jeśli ta opcja jest aktywna, odpowiednia kombinacja linii w metodzie jest mierzona jednocześnie. |
| Principal line | Do pomiaru kombinacji linii używane są parametry pomiaru Principal line . Line Nazwa linii głównej Wavel. Długość fali w nm linii głównej |
| Additional line | Line Nazwa dodatkowej analizowanej linii Wavel. Długość fali w nm dodatkowej analizowanej linii |
| Meas.wavel. | Długość fali pomiaru w nm (środek linii detektora) |
| Status | Uwagi |
| No combined lines | Usuwanie wszystkich zaznaczeń W tej metodzie żadne linie nie są mierzone razem. |
| Swap line priority | Zamiana linii głównej i dodatkowej w kombinacji linii |

Dla kombinacji linii automatycznie określana jest linia główna i linia dodatkowa. Dodatkowe linie przejmują czas analizy i parametry plazmy z linii głównej. To przypisanie można odwrócić za pomocą **Swap line priority**.


3.2.1.3 Definiowanie swoich ulubionych linii

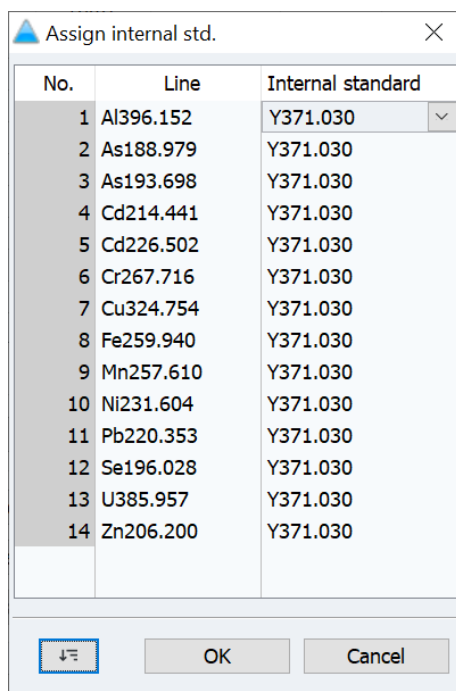
Preferowane linie analizy można dodać do listy ulubionych wraz z uwagami na temat preferowanej aplikacji. Informacje o linii analizy są zapisywane w tym wpisie wraz ze wszystkimi parametrami metody istotnymi dla linii. Lista ulubionych jest dostępna dla każdego wyboru linii pierwiastków.

- ▶ Zaznacz linię w tabeli okna **Method | Lines** i kliknij .
- ▶ Edytuj nazwę linii w oknie **Add to favorites**.
- ▶ W polu **Comment** można wprowadzić dalsze uwagi dotyczące linii.
- ▶ Wybierz jedną lub więcej aplikacji z listy **Tags**.
Można dodać własne wpisy do listy słów kluczowych. Wstępnie zdefiniowane słowa kluczowe są zaznaczone na niebiesko.
 - ✓ Linia jest dostępna w oknie **Select element/line**.

3.2.1.4 Definiowanie wzorców wewnętrznych

Wzorce wewnętrzne są używane głównie do korygowania zakłóceń niespektralnych, np. wynikających z zakłóceń transportu próbki. Wzorce wewnętrzne definiuje się w tabeli linii okna **Method | Lines**.

- ▶ Wstaw linię analizy, która ma być używana jako wzorzec wewnętrzny, do tabeli linii i wybierz w kolumnie tabeli **Type** opcję **Int.std..**
- ▶ Kliknij **Assign internal std..**
Pojawi się okno **Assign internal std..**
- ▶ Przypisz wzorce wewnętrzne do odpowiednich linii analizy w tabeli. W tym celu kliknij odpowiedni wiersz w kolumnie **Internal standard** i wybierz wzorzec wewnętrzny z listy.
- ▶ Kliknięcie  powoduje przeniesienie ustawień linii analizy do wszystkich kolejnych linii w tabeli.
- ▶ Za pomocą **OK** ustawienia zostają przejęte do metody.



3.2.2 Ustawianie parametrów plazmy i transferowego układu optycznego (okno Method | Plasma)

W oknie **Method | Plasma** wprowadza się następujące ustawienia:

- Przepływy gazu dla plazmy w palniku
- Wybór kierunku obserwacji plazmy i jego regulacja

Elementy w oknie Method | Plasma

| 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 |

| Kolumna tabeli | Opis |
|----------------|--|
| No. | Kolejność wybranych linii w tabeli |
| Line | Oznaczenie linii analizy |
| Power | Efektywna moc plazmy w watach Zwiększenie mocy plazmy poprawia stabilność plazmy, np. w przypadku rozpuszczalników organicznych lub próbek o wysokiej zawartości soli jako roztworu pomiarowego. Jednocześnie wyższa moc plazmy wymaga również wyższego przepływu gazu plazmowego, aby zapobiec stopieniowi lub uszkodzeniu palnika. |
| Plasma gas | Przepływ gazu plazmowego w L/min Gaz plazmowy przepływa między zewnętrzną a wewnętrzną rurką kwarcową palnika. Jest wprowadzany w stan plazmy przez indukcję cewki i jednocześnie chłodzi zewnętrzną rurkę palnika. Wyższy przepływ gazu plazmowego może wydłużyć żywotność palnika. |
| Aux. gas | Przepływ gazu pomocniczego w L/min Gaz pomocniczy przepływa między wewnętrzną rurką kwarcową a wtryskiwaczem. Wspomaga on tworzenie kanału pomiarowego i odsuwa plazmę od końcówki wtryskiwacza. Wyższy przepływ gazu pomocniczego jest wymagany w przypadku roztworów pomiarowych zawierających rozpuszczalniki organiczne lub wyższe stężenia soli. |
| Nebulizer gas | Przepływ gazu rozpylającego w L/min Gaz rozpylający jest doprowadzany do rozpylacza. Rozpyla on próbkę i przenosi ją przez komorę rozpylania i wtryskiwacz do plazmy. |
| Direction | Kierunek obserwacji plazmy |

| Kolumna tabeli | Opis |
|-----------------|---|
| | <p>Za pomocą transferowego układu optycznego promieniowanie emisyjne z plazmy może być wprowadzane do spektrometru z dwóch kierunków. W zależności od linii analitu można wybrać optymalny kierunek obserwacji.</p> <p>radial Obserwacja plazmy odbywa się z boku na określonej wysokości powyżej górnej krawędzi cewki.</p> <p>axial Obserwacja jest prowadzona od góry wzdłuż osi podłużnej plazmy.</p> <p>Oba kierunki obserwacji mogą również zostać osłabione. Zapobiega to przepełnieniu detektora przy wysokiej intensywności i zwiększa zakres analityczny.</p> |
| x-offset | Korekta transferowego układu optycznego w mm |
| oraz | Przesuwając transferowy układ optyczny wzdłuż kanału pomiarowego (w przypadku obserwacji promieniowej) i ze środka kanału pomiarowego (w przypadku obserwacji promieniowej i osiowej), można skanować obszary o różnych temperaturach i rejestrować optymalną temperaturę emisji linii analizy. |
| y-offset | Optimum może zostać wyznaczone automatycznie w oknie Plasma . |



WSKAZÓWKA

W pierwszej fazie rozwoju metody (wyboru odpowiednich linii) wystarczające są wstępnie ustawione parametry plazmy. Parametry te można zmienić po zdefiniowaniu linii analizy, niezbędnych korektach tła i wyznaczeniu zakresu liniowości, w celu dalszej optymalizacji parametrów metody.

Stosowanie tlenu

W przypadku zastosowań specjalnych, np. matryc organicznych, tlen może być używany jako dodatkowy gaz.

- ▶ Ustaw przepływ gazu w polu **Oxygen flow**.

Zobacz także

- 📖 Regulacja i optymalizacja plazmy [▶ 105]

3.2.3 Definiowanie doprowadzania próbki (okno Method | Sample delivery)

W oknie **Method | Sample delivery** wprowadź następujące ustawienia analizatora:

- Szybkość pompowania pompy w analizatorze
- Korzystanie z autosamplera
- Opcje płukania

Okno Method | Sample delivery

Czasy pompowania w urządzeniu ICP-OES

| Opcja | Opis |
|-----------------------|--|
| Normal mode | Normalna prędkość pompy, z jaką próbka jest transportowana podczas analizy. Prędkość ta powinna zapewniać optymalne rozpylenie próbki i opierać się na zalecanej szybkości pompowania używanego rozpylacza. |
| Fast mode | Zwiększona prędkość, z jaką próbka może być płukana (cieczą płuczącą) między przerwami pomiarowymi i transportowana do rozpylacza. Włączenie tej prędkości optymalizuje czas transportu. Jednakże, prędkość nie może być używana w czasie pomiaru, ponieważ jednorodne rozpylenie próbki nie jest już zagwarantowane. |
| Delay time | Czas od rozpoczęcia zasysania próbki do faktycznego rozpoczęcia pomiaru Czas ten jest wymagany do przepłukania całej ścieżki próbki łącznie z palnikiem i zapewnienia stabilnego rozpylania. Uwaga: czas opóźnienia obejmuje również czas ustawiony w polu Fast mode time . |
| Fast mode time | Czas, w którym próbka jest transportowana z dużą szybkością pompowania w czasie opóźnienia |

**WSKAZÓWKA**

W oknie **Method | Sample delivery** ustawia się szybkość pompowania pompy perystalicznej urządzenia ICP-OES. Szybkość pompowania w autosamplerze w celu dostarczenia cieczy płuczącej można regulować za pomocą pokrętła nad pompą na autosamplerze lub, w przypadku autosamplerów Cetac, w oknie **Autosampler | Techn. parameters**.

Stosowanie autosamplera

Jeśli do analizy używany jest autosampler, należy aktywować opcję **Autosampler**. Opcja **Parameters** umożliwia dostęp do ustawień autosamplera.

Kontrola płukania i czyszczenia

Podczas wykonywania sekwencji można ustawić etapy płukania po każdym pomiarze próbki. Podczas pomiaru automatycznego ciecz płuczająca jest pobierana ze zlewnicy do płukania autosamplera. Podczas pomiaru ręcznego zostaje wyświetlone polecenie przygotowania cieczy płuczącej.

Jeśli stężenie próbki przekracza zakres pomiarowy krzywej kalibracyjnej o więcej niż 10%, można przepłukać ścieżkę próbki i palnik w celu usunięcia zanieczyszczeń z poprzedniego pomiaru. Podczas płukania w celu kontroli efektu czyszczenia mierzona jest intensywność i płukanie trwa do momentu osiągnięcia granicy kontrolnej. Automatyczna kontrola czyszczenia jest zalecana po pomiarze próbek o wysokim stężeniu.

| Opcja | Opis |
|------------------------|---|
| Wash | off Płukanie jest wyłączone. Płukanie nie odbywa się automatycznie. Between samples Płukanie po każdej próbce, ale nie w trakcie serii statystycznej |
| Wash time | W tym czasie płukana jest ścieżka próbki aż do palnika. |
| Wash only in fast mode | Etap płukania odbywa się tylko przy czasie szybkiego działania. Jeśli ta opcja jest nieaktywna, płukanie jest początkowo wykonywane w trybie szybkim przez wprowadzony czas szybkiego działania (Fast mode time), a przez pozostały czas płukania w trybie normalnym. |
| Controlled cleaning | Jeśli ta opcja jest aktywna, kontrolowane czyszczenie jest przeprowadzane automatycznie przy przekroczeniu stężeń |
| Control limit (Ints.) | Wartość poziomu sygnału, który musi zostać osiągnięty podczas płukania przed pomiarem kolejnego roztworu |
| Line | Linia pierwiastka, która zostanie użyta jako linia kontrolna |

3.2.4 Ocena pików (okno Method | Evaluation)

W oknie **Method | Evaluation** definiuje się parametry oceny pików.



WSKAZÓWKA

Podczas rozwoju metody określa się optymalne ustawienia korekcji tła danej linii analizy w oknie **Edit spectra | Evaluation**, a następnie przenosi je do metody.

Okno Method | Evaluation

The screenshot shows the 'Method | Evaluation' window with the following table of peak parameters:

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

Below the table, there are two dropdown menus for 'Spectral corrections...' and 'IEC factors...', both set to '(none)'. At the bottom, there are buttons for 'Open...', 'Save...', 'OK', 'Accept', and 'Cancel'.

| Kolumna tabeli | Opis |
|-----------------|--|
| No. | Kolejność wybranych linii w tabeli |
| Line | Oznaczenie linii analizy |
| Range | low. Dolna granica zakresu długości fali do oceny widma względem długości fali pomiaru upp. Górna granica zakresu długości fali względem długości fali pomiaru |
| Poly.deg. | Wybór stopnia wielomianu krzywej regresji dla statycznej korekcji tła Do wyboru są stopnie wielomianu 0., 1., 2. i 3. rzędu lub automatyczne wyszukiwanie stopnia wielomianu (opcja auto). |
| Peak evaluation | Wybór oceny pików Pixels Liczba pikseli używanych do oceny intensywności, z których ostatecznie tworzone są zmierzone wartości. Intensywności pikseli oceny są sumowane. W ten sposób można zmniejszyć niedokładności analizy wynikające z wahań pozycji piksu. Zalecana liczba wybranych pikseli: 3 Height Interpolacja maksimum piksu User defined Dowolny wybór pikseli oceny, np. do oceny multipletów Przykładowe wprowadzenie: 50,120-130 tworzy sumę zmierzonych wartości pikseli 50 i 120-130. |
| Correction | Algorytm korekcji widmowej (patrz poniżej). off Nie jest wykonywana korekcja widmowa LSM Korekcja widmowa metodą najmniejszych kwadratów IEC Korekta widmowa z korektą międzypierwiastkową (Inter Element Correction) |
| BGC fit | Dostosowanie pikseli do korekcji tła off Nie jest wykonywana korekcja tła dynamic Piksele do korekcji tła są automatycznie znajdowane przez oprogramowanie. static Piksele do korekcji tła są określane przez użytkownika w kolumnie BGC pixel pos.. |
| BGC pixel pos. | Położenie pikseli względem pikselu pomiaru przy statycznym dopasowaniu korekcji tła Wprowadź numery pikseli dla korekcji tła. |

Przyciski

| Przyciski | Opis |
|----------------------|---|
| Spectral corrections | Przypisanie do linii analizy modelu korekcji widmowej |
| IEC factors | Przypisanie do linii analizy korekty międzypierwiastkowej |

Zobacz także


 Ocena piksu i wyznaczanie korekty tła - okno Edit spectra | Processing [▶ 83]

3.2.4.1 Korekcje widmowe metodą najmniejszych kwadratów

Za pomocą korekcji widmowych można matematycznie wyeliminować ustrukturyzowane emisje tła spowodowane np. nakładaniem się linii elementów macierzy na linię analizy. Warunkiem jest połączenie możliwych widm zakłócających w jeden model korekcji dla danej linii analizy.

- ▶ W oknie **Method | Evaluation** kliknij **Spectral corrections** i ustaw odpowiedni model korekcji dla każdej linii z osobna.
 - ✓ Linie, do których przypisany jest model korekcji, są oznaczone w kolumnie **Correction** za pomocą **LSM**.

Zobacz także

 Usuwanie zakłóceń widmowych - okno Edit spectra | Spectral corrections [▶ 84]

3.2.4.2 Korekta międzypierwiastkowa

Za pomocą korekty międzypierwiastkowej można skorygować bezpośrednie nakładanie się linii. Warunkiem jest dalsza niezakłócona długość fali interferenta.

Za pomocą roztworu jednopierwiastkowego (roztworu IEC) określany jest stosunku dwóch linii interferenta (nałożonej linii analizy i linii niezakłóconej). Iloraz (współczynnik IEC) jest wykorzystywany w kolejnych pomiarach próbki w celu odjęcia pozornej intensywności lub stężenia interferenta w linii analitu.

Elementy w oknie 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

| Element obsługowy | Wyjaśnienie |
|-------------------------------------|---|
| IEC solutions | Wprowadzanie nazwy, stężenia, jednostki i pozycji autosamplera roztworów pierwiastków IEC oraz wartości ślepej próby używanych do korekty międzypierwiastkowej. |
| Append | Dodawanie nowego wiersza na końcu listy |
| Insert | Wstawianie nowego wiersza w zaznaczonym miejscu listy |
| Delete | Usuwanie zaznaczonego wiersza |
| Interelement correction is based on | Intensities Korekcja jest dokonywana przez odjęcie intensywności Concentration Korekcja jest dokonywana przez odjęcie stężeń pozornych |
| Extract factors from results data | Wyodrębnienie obliczonych współczynników IEC z załadowanego pliku wyników |

Zawartość tabeli

| Kolumna tabeli | Opis |
|------------------------------|--|
| Specify IEC solutions | Oznaczenie zakłóconej linii analizy |
| Interferent | Oznaczenie linii zakłócenia |
| IEC solution | Oznaczenie roztworu jednopierwiastkowego zawierającego interferent. Roztwory IEC definiuje się przyciskiem IEC solutions . |
| IEC blank | Oznaczenie roztworu ślepej próby, która jest odejmowana od intensywności lub stężenia interferenta. Roztwory ślepej próby definiuje się za pomocą przycisku IEC solutions . |
| IEC factor | Współczynnik korekcy IEC Obliczone współczynniki mają szare tło. |
| manually | Jeśli ta opcja jest aktywna, współczynnik IEC można wprowadzić ręcznie. Nie są potrzebne żadne roztwory pomiarowe. |

Przypisywanie korekty międzypierwiastkowej

- ▶ W oknie **Method | Evaluation** kliknij **IEC factors**.
 - ✓ Zostanie wyświetlone okno **Assign IEC Elements**.
- ▶ Najpierw zdefiniuj roztwory IEC. Dla każdego interferenta potrzebna jest wartość ślepej próby i roztwór IEC (roztwór jednopierwiastkowy).
 - Kliknij **IEC solutions**.

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 |
| | | | | |

- Wstaw w tabeli w oknie **Analyte line** wartość ślepej próby i roztwór IEC dla każdego interferenta, klikając **Add blank** i **Add IEC solution**.
- Wpisz nazwy roztworów w odpowiednich komórkach tabeli.
- Dla roztworów IEC wprowadź stężenie interferenta w roztworze IEC w kolumnie **Concentration**.
- Potwierdź wprowadzenia za pomocą **OK**.
- ▶ Z powrotem w oknie **Assign IEC Elements** wybierz zakłóconą linię analitu w kolumnie tabeli **Specify IEC solutions**.
- ▶ W kolumnie **Interferent** wybierz niezakłóconą linię interferenta.
- ▶ W kolumnach **IEC solution** i **IEC blank** wprowadź odpowiedni roztwór jednopierwiastkowy i roztwór ślepej próby.
- ▶ Wybierz rodzaje korekty międzypierwiastkowej na podstawie **Intensities** lub **apparent concentrations**.
- ▶ Potwierdź wprowadzenia za pomocą **OK**.
 - ✓ Linie, do których przypisana jest korekta międzypierwiastkowa, są oznaczone jako **IEC** w tabeli linii okna **Method | Evaluation** w kolumnie **Correction**.

Roztwory IEC muszą być mierzone w kolejności po pomiarze wzorców kalibracyjnych lub obliczeniu kalibracji.

Ręczne wprowadzanie współczynników

Zamiast wyznaczania współczynników korekty międzypierwiastkowej poprzez pomiar roztworu jednopierwiastkowego, można wprowadzić bezpośrednio do tabeli znane współczynniki:

- ▶ Po wprowadzeniu **Specify IEC solutions** i **Interferent** zaznacz pole wyboru **manually**.
- ▶ Wprowadź wyznaczony już współczynnik w kolumnie **IEC factor**.

3.2.5 Wprowadzanie parametrów kalibracji (okno Method | Calibration)

W oknie **Method | Calibration** definiuje się rodzaj kalibracji i korektę o wartość ślepej próby. Generalnie do kalibracji używane są wzorce wielopierwiastkowe, które można wprowadzić jako wzorce podstawowe.

Okno Method | Calibration

| 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 |

Wybór procedury kalibracji

Wybierz procedurę z listy **Calibration mode**:

| Procedura kalibracji | Opis |
|-----------------------------------|---|
| No calibration | Wyniki próbki są wyświetlane wyłącznie jako intensywność. Kalibracja nie jest wymagana dla tych pomiarów. Nie są wymagane żadne dalsze wpisy na karcie Calibration . Lista sekwencji powinna składać się tylko z próbek. |
| Standard calibration | Kalibracja jest przeprowadzana z próbkami zawierającymi analit w znanym stężeniu (wzorcami). próbki o nieznanym stężeniu są mierzone względem tej kalibracji. |
| Method of additions | Nieznaną próbkę jest wzbogacana różnymi ilościami znanej próbki i mierzona. Wynikiem wyrównania jest stężenie analitu w próbce. |
| Method of additions calib. | Krzywa kalibracji, za pomocą której można wyznaczyć dalsze stężenia, jest generowana przez dodanie wzorca. Jednocześnie wyznaczane jest stężenie pierwszej próbki. |

Przygotowanie wzorców

| Opcja | Opis |
|--------------------------|---|
| manually | Wzorcowe roztwory kalibracyjne przygotowuje się ręcznie. |
| by diluter system | Tylko w przypadku korzystania z autosamplera Cetac SDXHPLD z automatyczną funkcją rozcieńczania |

| Opcja | Opis |
|-------|---|
| | Wzorce są przygotowywane przez rozcieńczenie roztworu podstawowego w worteckerze (naczyniu mieszającym) autosamplera. |

Korekta o wartość ślepej próby

Metody dodawania wzorca i kalibracja z dodawaniem wymagają korekty o wartość ślepej próby. Wybierz procedurę z listy **Blank correction**:


| Korekta | Opis |
|--------------------------------|---|
| Intensity corrected | Przy każdym dodaniu wzorca mierzona jest także wartość ślepej próby, a zmierzona wartość intensywności jest odejmowana od wszystkich zmierzonych wartości przed obliczeniem prostej regresji. Procedura ta była powszechna przez długi czas, ale w przypadku wielu prawdziwych próbek prowadzi do błędnych wyników. |
| Concentration corrected | Za pomocą roztworu ślepej próby najpierw przeprowadzane jest oddzielne dodawanie wzorca z takimi samymi dodatkami stężenia jak w przypadku próbki. Wyznaczone stężenie jest automatycznie odejmowane od wszystkich innych stężeń wyznaczonych przez dodanie wzorca (Conc. 2). |

Parametry kalibracji specyficzne dla linii

Parametry specyficzne dla linii ustawia się w tabeli:

| Kolumna tabeli | Opis |
|---------------------|--|
| No. | Kolejność wybranych linii w tabeli |
| Line | Oznaczenie linii analizy |
| Calib. func. | Tylko dla kalibracji zgodnie z metodą standardową linear Liniowy postęp funkcji kalibracji $y = a + bx$ nonlin. ratio. Nieliniowy postęp funkcji kalibracji opisanej przez funkcję wymierną $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$ nonlin. quadr. Nieliniowy postęp funkcji kalibracji opisany przez funkcję kwadratową $y = a + bx + cx^2$ automatically Dla kalibracji obliczana jest funkcja liniowa i nieliniowa. Porównywane są sumy kwadratów residuów (test Mandela). Jeśli suma dla funkcji nieliniowej jest znacznie niższa niż dla funkcji liniowej, wybierany jest nieliniowy postęp krzywej kalibracji, w przeciwnym razie wybierany jest liniowy postęp krzywej kalibracji. Funkcję nieliniową wybiera się w oknie Options Calibration . Domyślnym ustawieniem jest tutaj funkcja wymierna. Uwaga: dla metody dodawania wzorca i kalibracji z dodawaniem dozwolone są tylko przebiegi liniowe. |
| Intercept | Set zero Krzywa kalibracji jest umieszczana dokładnie przez zmierzony punkt wartości zerowej. calculate Wartość zerowa jest uwzględniana w obliczeniu tak jak każdy inny punkt kalibracji. |
| Weighting | none Uwzględnienie wszystkich punktów kalibracji w takim samym stopniu. |

| Kolumna tabeli | Opis |
|----------------|---|
| | <p>1/conc Większe uwzględnienie punktów kalibracji z niższymi stężeniami.</p> <p>1/SD Większe uwzględnienie punktów z mniejszymi odchyleniami w ramach wielokrotnie powtarzanych pomiarów wzorca (warunek: aktywna statystyka średniej).</p> <p>1/(SD*conc) Kombinacja metod obliczeniowych 1/conc i 1/SD</p> |
| Check | <p>Oprogramowanie umożliwia automatyczne sprawdzenie wyznaczonych krzywych kalibracji za pomocą pasma prognozy, które jest obliczane na podstawie ręcznie wybranej pewności statystycznej.</p> <p>none Wszystkie zmierzone i nieskasowane punkty kalibracji są używane do obliczania krzywej. Punkty kalibracji nie są oznaczane ani eliminowane.</p> <p>Elim .outliers Jeśli punkty kalibracji leżą poza obliczonym pasmem prognozy, przeprowadzana jest eliminacja wartości odstających za pomocą testu F (sprawdzenie, czy wykluczenie punktu prowadzi do znacznej poprawy rozrzutu resztkowego):</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Z punktem kalibracji, który znajduje się najdalej poza pasmem prognozy, przeprowadzany jest test F. Jeśli nieuwzględnienie tego punktu nie prowadzi do znacznej poprawy rozrzutu resztkowego, punkt ten jest brany pod uwagę i krzywa kalibracji nie jest dalej optymalizowana. ▪ Jeśli nieuwzględnienie punktu kalibracji prowadzi do znaczącej poprawy, zostaje on uznany za odstający (oznaczony jako „!” w tabeli i kolorem czerwonym na wykresie) i krzywa kalibracji jest ponownie obliczana bez tego punktu. ▪ Dla punktu, który teraz najbardziej odbiega od pasma prognozy, przeprowadzany jest ponownie test F. Procedura ta jest powtarzana do momentu usunięcia wszystkich wartości odstających. ▪ Wszystkie punkty kalibracji znajdujące się poza nowym pasmem prognozy, które nie zostały wyeliminowane jako wartości odstające, są oznaczone jako „?” w tabeli i na niebiesko na wykresie. |
| Unit | Należy wprowadzić osobno jednostki stężenia dla każdego pierwiastka. |

Za pomocą  przejmujemy się wartość bieżącej komórki do wszystkich poniższych komórek w kolumnie tabeli. Przyciskiem **Calibration Table** otwiera się tabelę w celu wprowadzenia stężenia wzorca.

Zobacz także

 Opcje przebiegu analizy [[▶ 133](#)]

3.2.5.1 Definiowanie wzorców podstawowych

Jeśli stosowane są wzorce podstawowe, zamiast stężeń można wprowadzić współczynniki rozcieńczenia dla poszczególnych wzorców. W tym celu przed wypełnieniem tabeli kalibracji należy zdefiniować wzorce podstawowe, przy czym można użyć kilku wzorców podstawowych z różnymi pierwiastkami i stężeniami.

- ▶ W oknie **Method | Calibration** kliknij **Stocks**.
 - ✓ Otworzy się okno **Stock standards**.
- ▶ Kliknij **New** lub **Insert**, aby dodać nowy wiersz do listy wzorców podstawowych. Maks. liczba wzorców podstawowych: 20

- ▶ W przypadku opcji **From stock database** wybierz z listy oznaczenie wzorca podstawowego. Baza danych wzorców podstawowych jest zarządzana w oknie **Data | Stock std/QC samples**.
- ▶ Wybierz opcję **Enter manually**, jeśli nie używasz wzorca podstawowego z bazy danych.
- ▶ Z powrotem w oknie **Stock standards** wprowadź dane wzorca podstawowego bezpośrednio do tabeli:

| Kolumna tabeli | Opis |
|------------------------------------|---|
| Name | Nazwa wzorca |
| Elements and concentrations | Pierwiastki i przynależne stężenia wzorca Za pomocą Concentrations otwórz listę do wprowadzania stężeń. Alternatywnie wprowadź wartości w następującym formacie wprowadzania bezpośrednio w wierszu w formacie <i>symbol pierwiastka-spacja-stężenie</i> , np. nikiel, stężenie 0,5 mg/L: Ni 0.5 Inne pierwiastki i ich stężenia dodaje się, oddzielając średnikami. Przykładowy format wprowadzania jest pokazany pod listą wzorców podstawowych. |
| Unit | Jednostka stężenia pierwiastków we wzorcu |

Zobacz także

- 📖 Zarządzanie bazami danych wzorców podstawowych zapasów i próbek QC [▶ 127]

3.2.5.2 Wprowadzanie do tabeli kalibracji

Wprowadź dane wzorca do tabeli kalibracji.

Okno Calibration Table

Calibration Table
— □ ×

Number of standards

Calb-Zero standards:

Calibration standards:

Allow deactivated lines

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

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

Shift selected column:

inc.

- ▶ W oknie **Method | Calibration** kliknij **Calibration Table**.

- ▶ Najpierw wprowadź w polach wprowadzania liczbę wzorców. W zależności od wybranej procedury kalibracji należy wybrać różne wzorce.

W przypadku metody standardowej należy wprowadzić liczbę wzorców kalibracyjnych (**Calibration standards**) i zerowych wzorców kalibracyjnych (**Calib-Zero standards**).

Można wprowadzić kilka wzorców zerowych, np. jeśli badane pierwiastki występują w różnych rozpuszczalnikach. W takim przypadku należy ustawić stężenie odpowiednich linii pierwiastków na „0” i pozostawić pozostałe kolumny puste.

W przypadku **Method of additions** i **Method of additions calib.** należy wprowadzić liczbę **Addition standards**.

- ▶ Aby przygotować wzorce przy użyciu podłączonego układu rozcieńczania, należy wybrać wzorzec podstawowy używany dla każdego wzorca kalibracyjnego w wierszu **Stock** oraz współczynnik rozcieńczenia w wierszu **Dil.fac.**.
Do rozcieńczania można wybrać następujące współczynniki: 1, 2, 5, 10, 15, 20, 25, 50, 75, 100, 200, 250, 500, 1000, 1500, 2000, 2500, 5000. Liczba współczynników rozcieńczenia jest ograniczona zgodnie z ustawieniami zakresu w oknie **Auto-sampler | Dilution**. Dla współczynników rozcieńczenia 1 ... 100 rozcieńczenie jest przeprowadzane jednostopniowo, dla wyższych wartości dwustopniowo.
 - ✓ Po wybraniu wzorca podstawowego i współczynnika rozcieńczenia oprogramowanie automatycznie oblicza stężenie dla każdego wzorca kalibracyjnego i każdej linii analizy.
- ▶ Stężenia wzorca, które nie mają być mierzone, można ręcznie usunąć z tabeli po aktywowaniu pola wyboru **Flexible selection**.
Aby ponownie aktywować usunięte wpisy, wprowadź plus (+) w odpowiednich polach i potwierdź klawiszem Enter lub zmień komórkę za pomocą myszy.
- ▶ W przypadku ręcznego przygotowywania wzorców kalibracyjnych można również zlecić oprogramowaniu obliczenie stężeń wzorców kalibracyjnych poprzez wybranie wzorca podstawowego i wprowadzenie współczynnika rozcieńczenia.
Alternatywnie dla każdego wzorca w tabeli można wprowadzić stężenie dla każdej linii analizy.
- ▶ W przypadku wzorców przygotowywanych ręcznie w wierszu **Pos** można określić pozycję wzorców w autosamplerze.
Jeśli autosampler nie jest używany, wpisy w tym wierszu nie są brane pod uwagę.
W przypadku autosamplery z funkcją rozcieńczania pozycja wzorca podstawowego jest przejmowana z bazy danych wzorców podstawowych.
Przypisanie pozycji autosamplera można wprowadzić lub zmienić w sekwencji.
- ▶ W przypadku rekaliibracji zdefiniowanych jako działanie sekwencyjne lub jako sekwencja działań QC, w wierszu **Recal.** należy wybrać co najmniej jeden zerowy wzorzec kalibracyjny i jeden wzorzec kalibracyjny lub co najmniej dwa wzorce kalibracyjne. Jeśli dla linii wybrano więcej niż dwa wzorce rekaliibracyjne, używany jest zawsze najniższy i najwyższy wzorzec rekaliibracyjny.

Zobacz także

- 📖 Definiowanie wzorców podstawowych [▶ 41]
- 📖 Funkcja rozcieńczania [▶ 112]

3.2.6 Definiowanie ocen statystycznych (okno Method | Statistics)

W oknie **Method | Statistics** wybierz metody statystyczne, które mają zostać zastosowane do kalibracji i pomiaru próbki. Ustawienia te są niezależne od wybranej procedury kalibracji i są zachowywane przy każdej zmianie procedury.

Okno Method | Statistics

Rodzaj statystyki

| Opcja | Opis |
|--------------------------|--|
| Sigma statistics | Obliczanie średniej i odchylenia standardowego Statystyka błędów według średniej arytmetycznej: próbka jest mierzona kilka razy po cyklach pustych. Na podstawie wyników pomiarów obliczane są średnia arytmetyczna, odchylenie standardowe i względne odchylenie standardowe. |
| Median statistics | Obliczanie mediany i zakresu (R). Statystyka błędów według metody mediany: próbka jest mierzona kilka razy po pseudopomiarach, zmierzone wartości są sortowane według wielkości. Wyświetlana wartość mediany jest wtedy: <ul style="list-style-type: none"> w przypadku nieparzystej liczby cykli pomiarowych wartością pośrodku posortowanej listy w przypadku parzystej liczby cykli pomiarowych średnią oby zmierzonych wartości pośrodku posortowanej listy Ponieważ najmniejsze i największe pojedyncze zmierzone wartości nie mają wpływu na wynik pomiaru, statystyka mediany jest odpowiednia do eliminacji wartości odstających. |

Liczba powtórnych pomiarów

| Opcja | Opis |
|-------------------|--|
| Samples | Liczba powtórzeń pomiaru na próbkę |
| Calib.std. | Liczba powtórzeń pomiaru na próbkę kalibracyjną |
| QC | Liczba powtórzeń pomiaru na pomiar QC |
| Pre-runs | Liczba powtórzeń pseudopomiarów Pseudopomiary to pomiary z próbką, które są wstawiane przed serią statystyczną i nie są używane do obliczania wyniku. |

Test wartości odstających Grubbsa Dla statystyki średniej z co najmniej 3 powtórzeniami pomiarów na próbkę

| Status | Opis |
|------------|--|
| Nieaktywny | Wszystkie wartości w serii statystycznej są używane do obliczania średniej. |
| Aktywny | Wartości odstające są eliminowane i nie są używane do obliczania wielkości statystycznych. Obliczone w ten sposób średnie są oznaczone jako „!” w tabeli wyjściowej. |

Obliczanie przedziału ufności

Podstawą obliczania przedziału ufności jest wybrana pewność statystyczna, patrz poniżej. Oprócz błędu podczas pomiaru próbki, przedział ufności obejmuje przede wszystkim błąd kalibracji, dlatego wartość jest podawana nawet wtedy, gdy funkcja statystyki jest wyłączona.

| Ustawienie | Opis |
|------------|--|
| off | Przedział ufności nie jest obliczany |
| absolute | Wyświetlanie przedziału ufności w wartościach bezwzględnych (w jednostce stężenia) |
| relative | Wyświetlanie przedziału ufności w wartościach względnych (jako procent wartości stężenia). |

Prawdopodobieństwo

Opcja **Confidence level** (możliwy wybór w zakresie 68,3 99,9%) służy do obliczania przedziału ufności próbek i pasm prognozy krzywych kalibracyjnych.

Zobacz także

 Definiowanie kontroli jakości (okno Method | QCS) [▶ 45]

3.2.7 Definiowanie kontroli jakości (okno Method | QCS)

W oknie **Method | QCS** definiuje się próbki do kontroli jakości (próbki QC). W trakcie sekwencji w określonych punktach wstawiane są pomiary kontrolne z próbkami, które mają dostarczyć znane wyniki pomiaru. Znana jest przy tym albo wartość bezwzględna (absorbancja/stężenie), albo różnica stężeń w porównaniu z poprzednią próbką. Można zdefiniować różne typy próbek do kontroli jakości.

Wyniki pomiarów kontrolnych mogą być automatycznie dokumentowane na kartach kontroli jakości (kartach QC). System kart QC służy do monitorowania jakości w dłuższym okresie czasu. Karty QC są zapisywane wraz z metodą i kontynuowane podczas każdego pomiaru tą metodą.

| 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 | - | - |

Elementy w oknie Method | QCS

| Elementy | Opis |
|---------------------|--|
| Type | Ta próbka QC jest wyświetlana w tabeli linii. Tutaj można edytować parametry próbki QC. |
| Name | Nazwa wyświetlanej próbki QC |
| Reaction | Procedura, jeśli wyniki próbki QC przekraczają lub nie osiągają uzgodnionych granic |
| New/Modify | Definiowanie nowej próbki QC lub zmiana istniejącej próbki QC |
| Delete | Usuwanie wyświetlanej próbki QC |
| Blank correction | Opcjonalnie można aktywować korektę o wartość ślepej próby dla wszystkich próbek QC, z wyjątkiem wzorców QC i wartości ślepej próby QC |
| Unit | Jednostka stężenia |
| QC samples overview | Otwarcie listy z parametrami specyficznymi dla linii wszystkich próbek QC |
| Tabela linii | W tabeli wyświetlane są parametry próbki QC wybranej w polu listy Type |

Typy próbek QC

Można zdefiniować następujące typy próbek QC:

| Opcja | Opis |
|-----------|---|
| QC sample | Definiowanie próbki jako próbki QC Stężenia próbki QC można załadować z bazy danych lub wprowadzić bezpośrednio. from database Wybór odpowiedniej próbki QC z sąsiedniego pola listy. Bazą danych próbek QC zarządza się w oknie Method QCS . enter manually Wprowadzenie stężenia próbki QC bezpośrednio do tabeli Maks. liczba próbek QC: 50 |

| Opcja | Opis |
|----------|---|
| QC std. | Definiowanie wzorca jako próbki QC Jako wzorzec QC może zostać użyty dowolny wzorzec zdefiniowany w tabeli kalibracji Możliwa liczba wzorców QC = liczba wzorców w tabeli kalibracji (maks. 65) |
| QC blank | Definiowanie ślepej próby jako próbki QC |
| QC spike | Definiowanie próbki z dodatkiem roztworu o znanym stężeniu jako próbki QC Przy tej opcji kontrolowane są wyniki pomiarów zdefiniowanego stężenia dodanego do jednej lub większej liczby próbek. W tym celu po dowolnej próbce w tabeli próbek należy zdefiniować próbkę QC z dodatkiem roztworu o znanym stężeniu. Po pomiarze różnica stężeń (stężenie 1 próbki i próbki QC z dodatkiem roztworu o znanym stężeniu) jest porównywana ze zdefiniowanym tutaj oczekiwanym wzrostem stężenia (Exp. conc. increase) i obliczany jest współczynnik ponownego wykrycia. |

Jeśli nie są dostępne certyfikowane próbki kontrolne, kontrolę jakości można również przeprowadzić przy użyciu podwójnych oznaczeń:

| Opcja | Opis |
|-----------|---|
| QC trend | Zmierzona wartość stężenia zostaje zapisana przy pierwszym pojawieniu się próbki kontrolnej podczas analizy. Przy następnym wystąpieniu tworzona i analizowana jest różnica stężeń. Zalecany pomiar próbek kontrolnych na początku i na końcu serii próbek. |
| QC matrix | Jedna próbka analityczna jest dzielona przed przygotowaniem. Obie części przechodzą osobno przez wszystkie etapy przygotowania próbki i są osobno umieszczane w autosamplerze jako trend QC i macierz QC. Analizowana jest różnica między stężeniami. |

Procedura w przypadku przekroczenia granic błędów

Dla typów próbek QC można wybrać różne procedury jako reakcję na przekroczenie granic błędów:

| Opcja | Opis |
|----------------------|---|
| QC sample QC std. | flag Zmierzona wartość jest oznaczana w tabeli próbek i program pomiarowy jest kontynuowany z następną próbką. recal. + continue Wykonywana jest rekaliibracja. Następnie próbka QC jest ponownie mierzona. Jeśli próbka QC znajdzie się teraz w prawidłowym zakresie, pomiar jest kontynuowany z następną próbką, w przeciwnym razie program pomiarowy zostaje przerwany. cal. + continue Wykonywana jest nowa kalibracja. Następnie próbka QC jest ponownie mierzona. Jeśli próbka QC znajdzie się teraz w prawidłowym zakresie, pomiar jest kontynuowany z następną próbką, w przeciwnym razie program pomiarowy zostaje przerwany. recal. + rerun Wykonywana jest rekaliibracja. Następnie próbka QC jest ponownie mierzona. Jeśli próbka QC znajduje się poza zakresem, program pomiarowy zostaje przerwany. Jeśli mieści się w zakresie, mierzone są na nowo wszystkie próbki po ostatniej próbce QC lub ostatniej (re-)kaliibracji. Jeśli próbka QC ponownie znajdzie się poza granicą błędów, program pomiarowy zostaje przerwany. |

| Opcja | Opis |
|-----------|--|
| | <p>cal. + rerun Wykonywana jest nowa kalibracja. Następnie próbka QC jest ponownie mierzona. Jeśli próbka QC znajduje się poza zakresem, program pomiarowy zostaje przerwany. Jeśli mieści się w zakresie, mierzone są na nowo wszystkie próbki po ostatniej próbce QC lub ostatniej (re-)kalibracji. Jeśli próbka QC ponownie znajdzie się poza granicą błędu, program pomiarowy zostaje przerwany.</p> <p>next method Bieżący program pomiarowy zostaje przerwany i uruchomiony zostaje program pomiarowy następnej metody, jeśli sekwencja zawiera następną metodę.</p> <p>Stop Bieżący program pomiarowy zostaje przerwany.</p> |
| QC spike | <p>flag</p> <p>recal. + continue</p> <p>cal. + continue</p> <p>next method</p> <p>Stop</p> |
| QC blank | <p>flag</p> <p>next method</p> <p>Stop</p> |
| QC trend | Brak reakcji |
| QC matrix | |

Specyficzne dla linii parametry typów próbek QC

Specyficzne dla linii parametry typów próbek QC wprowadza się w tabeli linii.

| Opcja | Opis |
|---------------------|--|
| Line | Nazwa linii analizy |
| Exp. conc. | Dla QC sample i QC std. Oczekiwane stężenie próbki QC |
| Exp. conc. increase | Dla QC spike Oczekiwany wzrost stężenia od próbki do próbki z dodatkiem roztworu o znanym stężeniu Wprowadź wartość zgodnie z ilością dodatku i stężeniem roztworu o znanym stężeniu. |
| Exp. ints. | Dla QC blank Oczekiwana intensywność w ślepej próbce QC |
| lower lim. | Dolny zakres granicy błędu w procentach |
| upper lim. | Górny zakres granicy błędu w procentach |
| QC chart | Jeśli linia jest oznaczona znakiem „+”, wynik kontroli jakości dla tej linii jest wyświetlany na karcie QC na liście wyników. |
| React. | Procedura ta powinna być stosowana w przypadku przekroczenia granicy zakresu błędów. Jeśli kilka linii jest oznaczonych znakiem „+”, do wywołania reakcji wystarczy, że jedna z tych linii przekroczy granice błędów (logika LUB). |
| Unit | Dla QC std. Jednostka oczekiwanego stężenia |

Wprowadzanie parametrów próbek QC

- ▶ Kliknij **New/Modify**, aby utworzyć nowy zestaw parametrów dla typu próbki QC lub edytować wybrany typ próbki.
 - ✓ Otworzy się okno **Add/modify QC sample type**.
- ▶ Wybierz typ próbki z listy **Type**.
- ▶ Tylko próbki QC: W przypadku definiowania kilku próbek QC przypisz kolejny numer w polu listy.
- ▶ Tylko wzorzec QC: Wybierz numer wzorca w polu listy zgodnie z kolejnością w tabeli kalibracji.
- ▶ Wprowadź w tabeli parametry specyficzne dla linii.
 - ✓ Próbki QC są zdefiniowane w metodzie.

Zobacz także

- 📖 Zarządzanie bazami danych wzorców podstawowych zapasów i próbek QC [▶ 127]

3.2.8 Definiowanie kontroli jakości (okno Method | QCC)

W oknie **Method | QCC** definiuje się parametry kontroli jakości podczas przebiegu sekwencji:

- Względne odchylenie standardowe (statystyka średniej) lub względny zakres (statystyka mediany)
- Kontrola kalibracji
- Kontrola rekalkulacji
- Procedura w przypadku przekroczenia granic błędów

Można wybrać różne kontrole jednocześnie z różnymi reakcjami.

| No. | Line | RSD/RR% < | RSD ! | R²(adj.) > | R² ! | Rec.Fact. > | Rec.Fact. < | Rec. ! |
|-----|-----------|-----------|-------|------------|------|-------------|-------------|--------|
| 1 | Al396.152 | 3 | + | 0.99 | + | 0.9 | 1.2 | + |
| 2 | As188.979 | 3 | + | 0.99 | + | 0.9 | 1.2 | + |
| 3 | As193.698 | 3 | + | 0.99 | + | 0.9 | 1.2 | + |
| 4 | Cd214.441 | 3 | + | 0.99 | + | 0.9 | 1.2 | + |
| 5 | Cd226.502 | 3 | + | 0.99 | + | 0.9 | 1.2 | + |
| 6 | Cr267.716 | 3 | + | 0.99 | + | 0.9 | 1.2 | + |
| 7 | Cu324.754 | 3 | + | 0.99 | + | 0.9 | 1.2 | + |
| 8 | Fe259.940 | 3 | + | 0.99 | + | 0.9 | 1.2 | + |
| 9 | Mn257.610 | 3 | + | 0.99 | + | 0.9 | 1.2 | + |
| 10 | Ni231.604 | 3 | + | 0.99 | + | 0.9 | 1.2 | + |

Rodzaje kontroli jakości

| Typ kontroli | Opis |
|----------------------|---|
| RSD/RR% check | Kontrola względnego odchylenia standardowego lub względnego zakresu |
| Calib. check | Kontrola współczynnika determinacji kalibracji |
| Recal. check | Kontrola współczynnika rekalkulacji |

Reakcje w przypadku przekroczenia granic błędów

| Reakcja | Opis |
|--------------------------|--|
| none | Odpowiednia kontrola nie jest przeprowadzana |
| flag | Jeśli granice błędów zostaną przekroczone, w tabeli próbek zaznaczona zostanie odpowiednia próbka, kalibracja lub rekalkibracja |
| repeat + continue | Tylko w przypadku RSD/RR% check Przy przekroczeniu szeregowej granicy precyzji pomiar danej próbki zostanie powtórzony przed pomiarem kolejnej próbki |
| cal. + continue | Tylko Calib. check i Recal. check Przy przekroczeniu granic błędu dla kalibracji lub współczynnika rekalkibracji zostanie przeprowadzona nowa kalibracja, a następnie pomiar będzie kontynuowany z następną próbką |
| next method | Tylko Calib. check i Recal. check Przy przekroczeniu granic błędu bieżący program pomiarowy zostanie przerwany i uruchomiony zostanie program pomiarowy dla następnej linii pierwiastka w metodzie. Opcja ta może zostać wybrana tylko wtedy, gdy w metodzie zdefiniowano więcej niż jedną linię pierwiastka. |
| Stop | Tylko Calib. check i Recal. check Przy przekroczeniu granic błędu pomiar aktualnie wykonywanej metody zostanie zakończony. |

Specyficzne dla linii parametry kontroli jakości

Wprowadź w tabeli specyficzne dla linii parametry różnych kontroli jakości. Dla każdej analizowanej linii określa się, czy będzie ona używana do kontroli. Jeśli jedna lub więcej kontrolowanych linii przekroczy granice błędów, uruchomiona zostanie reakcja opisana powyżej.

| Kontrola jakości | Parametr / znaczenie |
|----------------------|--|
| RSD/RR% check | RSD/RR% < W przypadku względnych odchyłeń standardowych lub zakresów większych lub równych wprowadzonej wartości nastąpi reakcja według uzgodnionej procedury. RSD ! W przypadku linii oznaczonych znakiem „+” kontrolowane jest RSD% lub RR% |
| Calib. check | R²(adj.) Współczynnik determinacji regresji R ² (adj.) musi być większy lub równy wprowadzonej wartości. W innym przypadku nastąpi reakcja według uzgodnionej procedury. R² ! W przypadku linii oznaczonych znakiem „+” kontrolowane jest R²(adj.) . |
| Recal. check | Rec.Fact. > Górna granica współczynnika rekalkibracji Rec.Fact. < Dolna granica współczynnika rekalkibracji W przypadku współczynników kalibracji wykraczających poza zadane wartości graniczne następuje reakcja. Rec. ! W przypadku linii oznaczonych znakiem „+” kontrolowany jest współczynnik rekalkibracji. |

Zobacz także

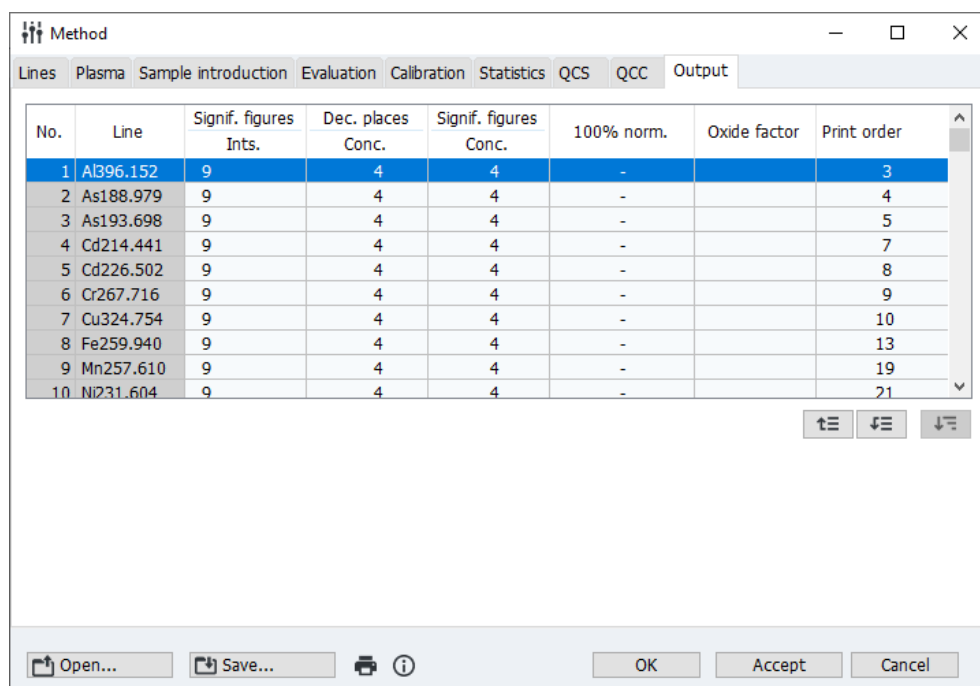
 Definiowanie ocen statystycznych (okno Method | Statistics) [▶ 43]

3.2.9 Definiowanie formatów wyjściowych wyników (okno Method | Output)

W oknie **Method | Output** można zdefiniować liczbę miejsc dziesiętnych wyników na ekranie i na wydruku, dodatkowe rodzaje wydruku oraz kolejność linii w przypadku analizy wielopierwiastkowej na wydruku.

Użytkownik definiuje liczbę miejsc dziesiętnych wyświetlania i drukowania intensywności i stężenia, a także kolejność drukowania oddzielnie dla każdego pierwiastka na liście.

Elementy w oknie Method | Output



| 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 |

| Elementy | Opis |
|------------------------------|---|
| Signif. figures Ints. | Liczba znaczących cyfr wartości intensywności |
| Dec. places Conc. | Liczba miejsc dziesiętnych wartości stężenia |
| Signif. figures Conc. | Liczba znaczących cyfr wartości stężenia |
| 100% norm. | Stężenie wyjściowe Conc. 2 jest przeliczane na stężenie całkowite w odniesieniu do wartości procentowej. Stężenie całkowite jest sumą stężeń linii oznaczonych znakiem „+”. |
| Oxide factor | Stężenie wyjściowe Conc. 2 jest przeliczane na stężenie/zawartość tlenku, jeśli wybrany został tlenek. Współczynnik utleniania jest podany w nawiasach, np. Ti jest przeliczany na TiO ₂ przez pomnożenie przez 1,6681. |
| Print order | Kolejność wyświetlania linii w raporcie |

4 Sekwencje


Sekwencja określa kolejność, w jakiej próbki i działania mają być przetwarzane w ramach procedury pomiarowej. Niektóre dane opisujące próbkę, takie jak oznaczenie próbki i pozycja na statywie na próbki, mogą być również wprowadzane bezpośrednio. Dane te są zapisywane wraz z sekwencją.

Sekwencja opiera się na załadowanej metodzie, która zawiera informacje o rodzaju kalibracji, ocenach statystycznych, kontrolach jakości itp.

4.1 Tworzenie, zapisywanie i otwieranie sekwencji


Sekwencje są przechowywane w bazie danych, podobnie jak metody. Można tworzyć nowe sekwencje, a także je zmieniać, zapisywać i ładować. Dalsze funkcje zarządzania sekwencjami można znaleźć w oknie **Data | Data management**.

Zobacz także

 Zarządzanie metodami i sekwencjami [▶ 119]

4.1.1 Tworzenie nowej sekwencji

Najpierw utwórz lub załaduj metodę. Na podstawie metody można zdefiniować nową sekwencję pomiarów próbki i działań.

- ▶ Wybierz pozycję menu **File | New Sequence**.
- ▶ Alternatywnie można otworzyć okno z bieżącymi parametrami sekwencji, klikając  lub wybierając pozycję menu **Method Development | Sequence**.
 - ✓ Zostanie wyświetlone okno **Sequence**. Teraz można definiować pomiary i kolejności działań.

4.1.2 Zapisywanie sekwencji

Po wprowadzeniu pomiarów i działań zapisz sekwencję w oknie **Save sequence** w bazie danych. Pozwala to na ponowne używanie sekwencji do późniejszych pomiarów. Podczas zapisywania sekwencji można dodać dodatkowe dane, aby skategoryzować sekwencję i ułatwić jej znalezienie.

Elementy w oknie Save sequence

| Opcja | Opis |
|--------------------|---|
| Name | Nazwa sekwencji |
| Cat. | Kategoria (trzy znaki) do dodatkowego oznaczania i sortowania sekwencji Ten wpis jest opcjonalny. |
| Tabela | Przegląd istniejących sekwencji |
| Sort by | Opcje w tej grupie umożliwiają sortowanie listy sekwencji. Jeśli opcja Current version only jest aktywna, w przypadku sekwencji o tej samej nazwie wyświetlana jest tylko najnowsza wersja. |
| Description | Opcjonalnie można wprowadzić bardziej szczegółowe objaśnienia sekwencji Kliknięcie otwiera listę predefiniowanych uwag. Zarządzanie tymi komentarzami odbywa się w oknie Data Default descriptions . |

Zapisywanie sekwencji

- ▶ W oknie **Sequence** kliknij **Save** lub wybierz pozycję menu **File | Save | Sequence**.
- ▶ Wprowadź nazwę sekwencji w oknie **Save sequence** i wybierz dalsze parametry.
- ▶ Potwierdź ustawienia za pomocą **OK**.
 - ✓ Sekwencja jest zapisana w bazie danych. Jeśli zostanie użyta istniejąca nazwa sekwencji, istniejąca sekwencja nie zostanie nadpisana, lecz w bazie danych zostanie utworzona nowa wersja.

Zobacz także

- Tworzenie predefiniowanych uwag [▶ 128]

4.1.3 Ładowanie sekwencji

Można załadować zapisane sekwencje i na ich podstawie wraz z metodą uruchomić procedurę pomiarową.

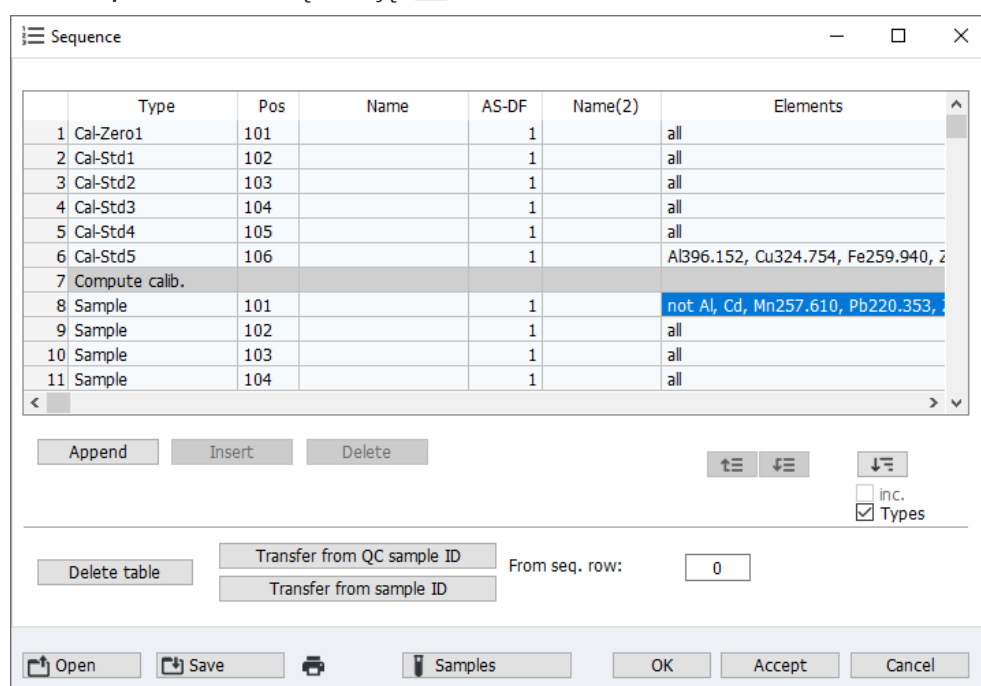
- ▶ Otwórz okno bazy danych sekwencji za pomocą jednej z poniższych opcji:
 - Kliknij ikonę obok pola **Sequ** na pasku narzędzi.
 - Wybierz pozycję menu **File | Open Sequence**.
 - Kliknij **Open** w oknie **Sequence**.

- ▶ Opcjonalnie można ograniczyć wyświetlanie sekwencji, wybierając kategorię w polu **Cat..** Aby zobaczyć sekwencje ze wszystkich kategorii, usuń wpis w polu **Cat...**
- ▶ Aktywuj pole wyboru **Current version only**, aby w przypadku sekwencji o tej samej nazwie wyświetlić tylko sekwencję z najwyższym numerem wersji.
- ▶ Zaznacz sekwencję w tabeli i kliknij **OK**.
 - ✓ Zostanie wyświetlone okno Sequence z zapisanymi parametrami.

4.2 Okno Sequence

W oknie **Sequence** definiuje się kolejność pomiarów i innych działań podczas analizy.

Okno **Sequence** otwiera się, klikając .



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

Tabela kolejności próbek i działań

Tabela zawiera listę wybranych kolejności próbek i sekwencji w kolejności ich przetwarzania.

| Kolumna tabeli | Wyjaśnienie |
|----------------|--|
| Type | Typ próbki lub etap analizy |
| Pos | Pozycja próbki w autosamplerze (jeśli jest używany) |
| Name | Nazwa próbki Ten wpis jest opcjonalny. W przypadku próbek kalibracyjnych i QC nazwa próbki jest przejmowana z metody, jeśli została tam zdefiniowana. W przypadku próbek do analizy i próbek QC nazwy można przenieść z pliku informacji o próbce. |
| Name (2) | Dodatkowe oznaczenie do identyfikacji próbki (opcjonalnie) |
| Elements | Wybór pierwiastków, które będą analizowane w próbce lub do działań specjalnych. <ul style="list-style-type: none"> ▪ none Bieżący wybór zostaje usunięty. ▪ all Wszystkie pierwiastki określone w metodzie są oznaczane (ustawienie domyślne). |

| Kolumna tabeli | Wyjaśnienie |
|----------------|--|
| | <ul style="list-style-type: none"> ■ Symbol pierwiastka Oznaczone są tylko wymienione pierwiastki, np. „Cu, Pb”. ■ Linia pierwiastka (symbol + długość fali) Oznaczone są tylko wymienione linie pierwiastków, np. „Mn 257.610, Ca 315.887”. ■ not Symbol pierwiastka lub not linia pierwiastka Wymienione pierwiastki lub linie pierwiastków nie są oznaczane, np. „not Cu, Pb”, „not Mn 257,610, Ca 315,887”. |

Przyciski

Za pomocą przycisków można dodawać próbki i działania do listy sekwencji, usuwać je lub przejmować istniejące pliki informacji o próbkach.

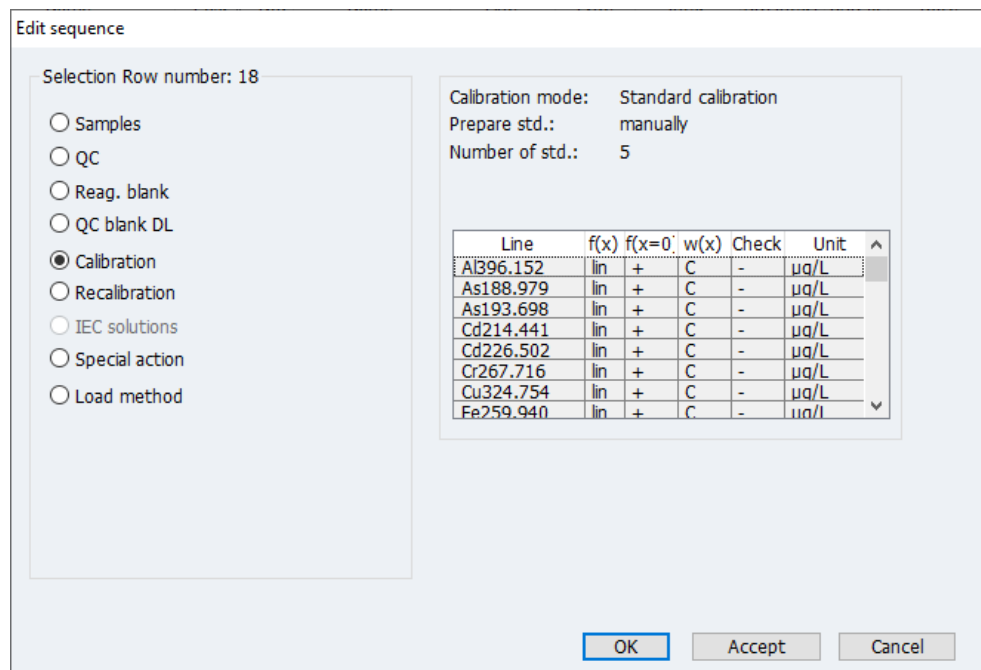
| Przycisk | Wyjaśnienie |
|-----------------------------------|---|
| Append | Dodanie nowego wiersza na końcu listy i otwarcie okna Edit sequence |
| Insert | Wstawienie nowego wiersza powyżej wybranej pozycji na liście |
| Delete | Usuwanie zaznaczonych wierszy |
| Delete table | Usuwanie całej listy sekwencji |
| Transfer from QC sample ID | Przejmowanie informacji o nazwach próbek QC i ich pozycji w autosamplerze z okna Samples QC sample information Informacje z tabeli identyfikatorów próbek QC są wprowadzane do tabeli sekwencji. Pierwszy wiersz z nową identyfikacją próbki jest określany w polu From seq. row . |
| Transfer from sample ID | Przejmowanie informacji o nazwie próbki, pozycji w autosamplerze i analizowanych pierwiastkach z okna Samples Informacje z tabeli identyfikatorów próbek są wprowadzane do tabeli sekwencji. Pierwszy wiersz z nową identyfikacją próbki jest określany w polu Samples . |
| Samples | Otwieranie okna Sample ID |

Zobacz także

- 📖 Często używane elementy obsługowe [▶ 15]
- 📖 Wybór pierwiastków/linii do analizy próbki/działania [▶ 58]

4.3 Definiowanie pomiarów i działań w sekwencji

W oknie **Edit sequence** można zdefiniować kolejność pomiarów i działań dla analizy. Okno pojawia się po kliknięciu **Append** lub **Insert** w oknie **Sequence**.




Możliwe pomiary i działania


W zależności od ustawień metody można zdefiniować dla analizy różne pomiary i działania.

| Próbka/działanie | Opis |
|------------------------|--|
| Samples | Pomiar liczby próbek wprowadzonych w Number |
| QC samples | Pomiar próbki QC i jej ocena zgodnie ze specyfikacją w metodzie Wybierz z listy próbkę QC zdefiniowaną w metodzie. Parametry próbki QC są wyświetlane w sąsiednim polu. |
| Reag. blank | Pomiar wartości ślepej próby bez analitu |
| QC blank DL | Pomiar wartości ślepej próby w celu określenia granic wykrywalności i oznaczalności metodą wartości ślepej próby |
| Calibration | Pomiar próbek kalibracyjnych i obliczanie kalibracji zgodnie ze specyfikacją w metodzie |
| Recalibration | Pomiar próbki kalibracyjnej przeznaczonej do recalibracji i obliczanie recalibracji |
| Sample-addition | Dla metody kalibracji Kalibracja z dodawaniem Dodanie do próbki roztworu o znanym stężeniu i obliczenie krzywej kalibracyjnej oraz stężenia próbki |
| Blank-addition | Dla metody kalibracji Kalibracja z dodawaniem i korekty o wartość ślepej próby na podstawie stężenia Dodanie do próbki wartości ślepej roztworu o znanym stężeniu i obliczenie wartości ślepej próby |
| IEC solutions | Tylko do korekt pików z IEC Pomiar roztworów IEC |
| Special action | Te działania nie mają bezpośredniego wpływu na pomiar próbek (patrz poniżej). |
| Load method | Załadowanie zapisanej metody, np. w celu rozpoczęcia kolejnej analizy w ramach sekwencji Za pomocą ... otwiera się okno bazy danych z zapisanymi metodami. Wybierz jedną z zapisanych metod. |

Działania specjalne

| Działanie | Opis |
|---------------------------|---|
| Extinguish plasma | Gaszenie plazmy |
| Dark current meas. | Wykonanie dodatkowego pomiaru prądu ciemnego Przy tym pomiarze prądu ciemnego sygnał jest wyznaczany przy zamkniętej migawce. Pomiar ciemności jest zawsze wykonywany automatycznie, nawet jeśli nie został dodany do sekwencji. |
| Waiting time | Czekanie na upływanie czasu wprowadzonego w polu (w minutach), a następnie kontynuowanie analizy W przypadku korzystania z autosamplera kaniula pozostaje w pozycji płukania i dalej zasysana jest ciecz płuczająca. |
| Pause | Zatrzymanie analizy Sekwencję można następnie kontynuować, klikając  lub wybierając pozycję menu Routine Continue . |
| Beep | Zlecenie komputerowi wygenerowania sygnału dźwiękowego, np. w celu wskazania końca kalibracji |
| Repeat / While | Definiowanie pętli (powtarzania) w sekwencji. Część sekwencji zawarta między punktem początkowym Repeat a punktem końcowym While jest powtarzana do momentu spełnienia kryterium przerwania. Jako warunek przerwania można określić liczbę wykonań pętli lub czas w minutach. W przypadku pomiarów online (w ramach zdalnej konserwacji) opcja autom. musi zostać aktywowana. Zapobiega to zapytaniu o dozowanie próbki w trybie ręcznym. |
| Show calib. plots | Wyświetlanie krzywej kalibracji podczas wykonywania sekwencji, aż do upływu czasu oczekiwania (w minutach). Po upływie czasu oczekiwania lub po kliknięciu OK oprogramowanie kontynuuje pomiar. W przypadku aktywacji działania Show calib. plots bez wprowadzenia czasu oczekiwania oprogramowanie kontynuuje pomiar dopiero po potwierdzeniu kalibracji za pomocą OK . Po kliknięciu przycisku Stop w oknie Calibration oprogramowanie zamyka okno i przerywa przebieg analizy niezależnie od ustawionego czasu oczekiwania. |
| Clean system | Płukanie ścieżek próbki aż do palnika roztworem płuczającym w trybie normalnym Wprowadzanie czasu płukania w polu wprowadzania. |

Definiowanie sekwencji

- ▶ Otwórz okno **Sequence** klikając na .
- ▶ Kliknij **Append**.
 - ✓ Zostanie wyświetlone okno **Edit sequence**.
- ▶ Aktywuj kolejno wymagane działania i przenoś je do tabeli sekwencji za pomocą **Accept**.
- ▶ Potwierdź ostatnie działanie **OK**.
 - ✓ Następuje powrót do okna **Sequence**. Tabela sekwencji zawiera teraz wszystkie działania w kolejności wyboru.
- ▶ Jako ustawienie domyślne dla analizowanych pierwiastków w tabeli sekwencji dla każdej próbki/działania wybrana jest opcja **all**. Ustawienie to można zmienić w oknie, klikając komórkę tabeli **Elements** odpowiedniej próbki/odpowiedniego działania.

- ▶ W przypadku korzystania z autosamplera:
Określ pozycję **Pos** próbek w autosamplerze. Pozycje próbek kalibracyjnych i QC są automatycznie przejmowane z metody. Można tutaj jednak zmienić pozycje. Pozycje ustawione w sekwencji zawsze mają pierwszeństwo.

Najlepiej jest wprowadzić dane próbek do analizy w oknie **Sample ID**, a następnie przenieść je do listy sekwencji.

4.4 Wybór pierwiastków/linii do analizy próbki/działania

W sekwencji wszystkie pierwiastki są domyślnie aktywowane do analizy próbek lub wykonywania działań. Aby wykluczyć pierwiastki do analizy próbki lub działania, wykonaj następujące czynności:

- ▶ W oknie **Sequence** kliknij komórkę tabeli odpowiedniej próbki lub działania. Pojawia się okno **Select elements and lines**.
Aktywuj pole wyboru **Show elements/lines of the currently loaded method**.
 - ✓ Na liście **Elements** wszystkie pierwiastki/linie ustawione w metodzie zostają zaznaczone na niebiesko.
- ▶ Aby całkowicie wykluczyć pierwiastek, usuń jego zaznaczenie, klikając odpowiedni pierwiastek. Aby aktywować pierwiastek, kliknij go ponownie.
- ▶ Jeśli w metodzie dla pierwiastka ustawionych jest kilka linii, a mają zostać użyte tylko wybrane linie, zaznacz żądaną linię na liście **Line**, klikając ją myszą.
- ▶ Przyciskami **all** i **none** aktywuj wszystkie pierwiastki lub całkowicie wyklucz wszystkie pierwiastki z analizy/działania.
- ▶ Opcja **Not (invert selection)** wyklucza wszystkie wybrane pierwiastki/linie z analizy/działania. Analizowane są tylko niezaznaczone pierwiastki/linie. Przed listą pierwiastków/linii pojawia się „not”.

W polu wyjściowym wyświetlane są wszystkie wybrane pierwiastki/linie. Pierwiastki/linie można edytować bezpośrednio w komórce tabeli po powrocie do okna sekwencji.

Okno Select elements and lines

Select elements and lines - no method lines

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

Not (invert selection)

Show elements/lines of the currently loaded method

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

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


5 Pliki informacji o próbkach (identyfikator próbki)

Pliki informacji o próbce (identyfikator próbki) zawierają określone dane, takie jak nazwa próbki, pozycja na autosamplerze, odważka, rozcieńczenie lub jednostka stężenia dla bieżących próbek analizowanych i próbek QC. Nazwy i pozycje próbek można przejść do tabeli sekwencji kliknięciem myszy. Pliki informacji o próbkach są zapisywane jako tabela w formacie CSV i mogą być również edytowane w arkuszu kalkulacyjnym, np. w programie Excel. Możliwa jest również odwrotna sytuacja: utworzone zewnętrznie tabele próbek mogą zostać zaimportowane do ASpect PQ.

Otwórz okno **Sample ID**, klikając  na pasku symboli.

5.1 Tworzenie, zapisywanie i otwieranie plików informacji o próbkach


Tworzenie nowego zestawu identyfikatorów próbek

- ▶ Kliknij  na pasku symboli lub wybierz pozycję menu **Method Development | Sample ID** lub **File | New Sample Information File**.
 - ✓ Zostanie wyświetlone okno **Sample ID**.
- ▶ Zdefiniuj dane próbek i próbek QC.
- ▶ Przejmij rekord danych do sekwencji, klikając **Transfer to sequence**.
 - ✓ Próbki są aktywne i zostaną użyte do następnej analizy. Można również zapisać identyfikator próbki do późniejszej analizy.

Zapisywanie identyfikatora próbki

- ▶ W oknie **Sample ID** kliknij **Save** lub wybierz pozycję menu **File | Save | Sample information**.
- ▶ Zapisz rekord danych w standardowym oknie **Zapisz jako**.
 - ✓ Identyfikator próbki jest zapisywany w formacie CSV. Pliki można załadować do dalszych analiz lub edytować w arkuszu kalkulacyjnym.


Otwieranie plików informacji o próbkach

- ▶ Identyfikator próbki można otworzyć za pomocą jednej z poniższych możliwości:
 - Kliknij ikonę  obok pola **Samples** na pasku narzędzi.
 - Wybierz pozycję menu **File | Open Sample Information File**.
 - Kliknij **Open** w oknie **Sample ID**.
- ▶ Wybierz plik w standardowym oknie **Otwórz**.
 - ✓ Identyfikator próbki jest wyświetlany w oknie **Sample ID** i może zostać użyty do następnej analizy.

Zobacz także

-  Definiowanie informacji o próbkach [▶ 61]

5.2 Okno Sample ID | Sample information

Zdefiniuj próbki i próbki QC w oknie **Sample ID**. Oprócz nazwy i pozycji w autosamplerze można wprowadzić parametry ważne dla analizy. Okno **Sample ID | Sample information** otwiera się, klikając na .

The screenshot shows a software window titled 'Sample ID' with two tabs: 'Sample information' and 'QC sample information'. The 'Sample information' tab is active, displaying a table with 11 rows and 11 columns. The columns are: Pos, Name, Pre-DF, Unit, Wt. (g), Vol. (mL), Total wt. (g), Name(2), AS-DF, Blank corr., and a small icon column. The data in the table is as follows:

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

Below the table are several control buttons: 'Append', 'Insert', 'Delete', 'Number: 1', 'Delete table', 'Transfer to sequence', 'Transfer from sequence', 'From seq. row: 1', 'Open', 'Save', 'Sequence', and 'Close'. There are also navigation arrows and an 'inc.' checkbox.

Karta Sample information

Karta **Sample information** zawiera listę próbek i ich właściwości.

| Kolumna tabeli | Opis |
|----------------|--|
| Pos | Pozycja próbki w autosamplerze |
| Name | Nazwa próbki Ten wpis jest opcjonalny. Maks. liczba znaków: 20 |
| Pre-DF | Dla typu jednostki liquid i solid Współczynnik wstępnego rozcieńczenia próbki to współczynnik, o który oryginalna próbka została rozcieńczona przed umieszczeniem jej w autosamplerze lub doprowadzeniem do plazmy w przypadku pracy bez autosamplera. Współczynnik ten jest wymagany do obliczenia stężenia pierwotnej próbki (Conc. 2). |
| Unit | Jednostka stężenia próbki |
| Wt. | Odważka w gramach (tylko dla typu jednostki solid) Masa pierwotnej próbki, która została wprowadzona do roztworu podczas wstępnej obróbki próbki. Odważka jest wymagana do obliczenia stężenia pierwotnej próbki (Conc. 2). |
| Vol. | Całkowita objętość lub objętość wlewana w mL (tylko dla typu jednostki solid) |
| Total wt. | Całkowita odważka próbki i rozpuszczalnika w gramach (tylko dla typu jednostki liquid grav. , np. dla olejów). |
| Name (2) | Dalsza nazwa próbki Ten wpis jest opcjonalny. Maks. liczba znaków: 20 |
| AS-DF | Współczynnik rozcieńczenia autosamplera |
| Blank corr. | Korekta o wartość ślepej próby (tylko dla typu próbki Sample) off Nie jest wykonywana korekta o wartość ślepej próby. on Aby obliczyć stężenie pierwotnej próbki, odejmowana jest wartość ślepej próby ostatnio zmierzona w sekwencji. Metodę korekty o wartość ślepej próby wybiera się w oknie Options Calibration . |

| Kolumna tabeli | Opis |
|----------------|--|
| Sample type | Wybór pomiędzy Sample i Blank |
| Elements | Pierwiastki lub linie, które mają być analizowane w próbce Po kliknięciu komórki tabeli pojawia się okno Select elements and lines , w którym dokonywane są te ustawienia. |

Przyciski

| Przyciski | Opis |
|------------------------|---|
| Append | Wstawianie liczby nowych wierszy na końcu listy. |
| Insert | Wstawianie liczby nowych wierszy przed zaznaczoną pozycją listy. |
| Delete | Usuwanie wybranego wiersza. |
| Number | Pole wprowadzania liczby wierszy do wstawienia. |
| Delete table | Usuwanie całej listy informacji o próbkach. |
| Transfer to sequence | Przenoszenie nazw próbek, pozycji w autosamplerze i pierwiastków do analizy do listy sekwencji. Pierwszy wiersz listy sekwencji, od którego mają zostać przesłane dane próbek, należy określić w polu wprowadzania From seq. row . |
| Transfer from sequence | Przenoszenie nazw próbek, pozycji w autosamplerze i analizowanych pierwiastków z listy sekwencji do tabeli identyfikatorów próbek. Pierwszy wiersz listy sekwencji, od którego mają zostać przesłane dane próbek, należy określić w polu wprowadzania From seq. row . |

Karta QC sample information

Analogicznie jak w przypadku karty **Sample information**, na tej karcie wymienione są próbki QC. Dodatkowo kolumna **Type** zawiera informacje o typie QC. Kolumna **Unit** jest pomijana, ponieważ jednostka jest zdefiniowana w metodzie. Korekta o wartość ślepej próby dla próbek QC jest zdefiniowana w metodzie i nie można jej tutaj wybrać.

Przycisk


| Przycisk | Opis |
|----------------------|--|
| Transfer to sequence | Przenoszenie nazw próbek QC i pozycji w autosamplerze do listy sekwencji |


Zobacz także

- 📖 Opcje przebiegu analizy [▶ 133]
- 📖 Wybór pierwiastków/linii do analizy próbki/działania [▶ 58]
- 📖 Definiowanie jednostek [▶ 127]

5.3 Definiowanie informacji o próbkach

Jeśli do analizy wymagane są dodatkowe dane dotyczące próbek lub próbek QC, takie jak odważka lub współczynnik wstępnego rozcieńczenia, należy określić te dane w oknie **Sample ID**. Zdefiniowane tutaj nazwy próbek i pozycje w autosamplerze można przenieść do sekwencji.





- ▶ Otwórz okno **Sample ID | Sample information**, klikając .
- ▶ Wprowadź liczbę próbek do analizy w polu **Number**. Następnie kliknij **Append**, aby wstawić wiersze do tabeli.
- ▶ Wprowadź w tabeli wymagane informacje o każdej próbce.

- ▶ Jeśli wpisy w kolumnie są takie same, za pomocą  można skopiować wpis z zaznaczonej komórki do wszystkich kolejnych komórek w kolumnie. Jeśli aktywujesz pole wyboru **inc.** (oznacza przyrost), przy każdym przeniesieniu do następnej komórki wartość jest zwiększana o 1. W ten sposób można na przykład łatwo zająć kolejne miejsca w autosamplerze lub ponumerować kolejno nazwy próbek.
- ▶ Teksty z pól wprowadzania można skopiować do schowka i wkleić. W tym celu należy użyć kombinacji klawiszy Ctrl+C i Ctrl+V lub skorzystać z poleceń menu kontekstowego po kliknięciu komórki tabeli prawym przyciskiem myszy.
- ▶ Po wprowadzeniu wszystkich informacji, w polu **From seq. row** wprowadź linię w sekwencji, od której informacje o próbce mają zostać przeniesione do sekwencji. Prześlij informacje, klikając **Transfer to sequence**.
- ▶ Analogicznie zdefiniuj informacje o próbce QC w oknie **Sample ID | QC sample information**. Przejmij informacje o próbce QC do sekwencji, klikając **Transfer to sequence**.
 - ✓ Informacje o próbce zostaną użyte do następnej analizy.

6 Przeprowadzanie analiz i obliczanie wyników

6.1 Przegląd poleceń menu i przycisków do uruchamiania analiz w oknie głównym

Procedury pomiarowe (sekwencje analizy oparte na sekwencji) są uruchamiane za pomocą ikon paska narzędzi lub menu **Routine**.

| Ikona | Pozycja menu | Funkcja |
|---|--|--|
|  | Routine Run sequence | Rozpoczęcie procedury pomiarowej |
|  | Routine Run Selected Sequence Row... | Wykonanie wybranej(-nych) wiersza(-szy) w sekwencji. Przytrzymując klawisz Ctrl lub Shift za pomocą myszy można zaznaczyć kilka wierszy. |
|  | Routine Stop | Zatrzymanie procedury pomiarowej |
|  | Routine Continue | Kontynuowanie zatrzymanej procedury pomiarowej |

6.2 Włączanie spektrometru i zapalanie plazmy



OSTROŻNIE

Ryzyko zatrucia ozonem i gazami azotowymi

- Przed zapaleniem plazmy włącz urządzenie wyciągowe.
- Podczas eksploatacji pozostaw urządzenie wyciągowe włączone.

Aby zapewnić bezpieczne działanie plazmy, urządzenie monitoruje następujące warunki za pomocą obwodów bezpieczeństwa.

- Drzwi do komory plazmowej są zamknięte.
- Palnik plazmowy (ang. torch) znajduje się w pozycji roboczej.
- Chłodzenie działa w wystarczającym stopniu.
- Wyciąg zużytego powietrza jest aktywny.
- Zasilanie argonem jest zapewnione.

Plazmę można zapalić tylko wtedy, gdy spełnione są wszystkie warunki. Jeśli jeden z obwodów bezpieczeństwa zgłosi błąd podczas pracy, urządzenie wygasi plazmę.

Zapalanie plazmy

- ▶ Włącz komputer za pomocą przełącznika zasilania i poczekaj na inicjalizację systemu operacyjnego.
- ▶ Włącz urządzenie ICP-OES za pomocą przełącznika zasilania.
- ▶ Otwórz dopływ argonu. Ustaw ciśnienie wstępne na 500 ... 700 kPa (5 ... 7 bar).
- ▶ Włącz urządzenie wyciągowe.
- ▶ Włącz chłodnicę obiegową za pomocą przełącznika zasilania.
- ▶ Otwórz drzwi do komory plazmy. Sprawdź, czy palnik znajduje się w pozycji startowej. Końcówka wtryskiwacza musi znajdować się około 1 do 2 mm poniżej dolnej krawędzi cewki indukcyjnej.



- ▶ Sprawdź stożek okna do obserwacji osiowej pod kątem zabrudzenia i zużycia. Użyj dostarczonego klucza hakowego, aby sprawdzić, czy stożek jest prawidłowo osadzony.
i WSKAZÓWKA! Jeśli stożek jest luźny, nie jest wystarczająco chłodzony i ulega korozji..
- ▶ Zamknij drzwi komory plazmy.
- ▶ W przypadku PlasmaQuant 9200 Elite: Włącz opcjonalne oświetlenie komory próbki.
- ▶ Sprawdź węże pompy. Wymień węże, jeśli nie są już elastyczne lub są mocno starte.
- ▶ Zamocuj węże pompy między stoperami w pompie na urządzeniu ICP-OES.
- ▶ Połóż pałąki zaciskowe na węzłach i zabezpiecz przewodnice za pomocą dźwigni dociskowych. Zwróć uwagę, aby dźwignie dociskowe zablokowały się!
Przy tym **i** WSKAZÓWKA! zwróć uwagę na kierunek pompy. Pompa obraca się w lewo.
- ▶ Upewnij się, że w butelce znajduje się wystarczająca ilość roztworu płuczącego do analizy.
i WSKAZÓWKA! Roztwór płuczący powinien mieć taką samą zawartość kwasu jak próbki i wzorce. Jeśli nie dokonano innych ustaleń, należy użyć 2-procentowego kwasu azotowego.
- ▶ Sprawdź poziom napełnienia butelki na odpady i opróżnij butelkę, jeśli ma za mało przestrzeni do przeprowadzenia analizy.
- ▶ W przypadku obsługi ręcznej bez autosamplera zanurz wąż zasysania próbki w roztworze płuczącym. Podczas procesu zapłonu plazmy nie może napływać powietrze.
- ▶ Uruchom program ASpect PQ.
- ▶ Wprowadź następujące ustawienia w oknie **Quick Start**:
 - Wybierz opcję **Routine** lub **Method development**.
 - W przypadku stosowania zestawu HF w punkcie **Torch material** wybierz **Ceramic**, aby dostosować czułość optycznego czujnika plazmy.
 - Opcjonalnie: W obszarze **Worksheet** für wybierz arkusze robocze przygotowane do szybkiego uruchomienia, np. do badania zanieczyszczeń pierwiastkami produktów farmaceutycznych USP 232/233. Arkusze robocze zawierają ustawienia metod i przygotowane sekwencje.
- ▶ Przy uruchamianiu oprogramowania z arkuszem roboczym zamknij szybkie uruchamianie w oknie **Quick Start** za pomocą **OK**.
- ▶ Jeśli oprogramowanie jest uruchamiane bez arkusza roboczego, kliknij **Skip Quick Start** i przejdź do interfejsu ASpect PQ.
- ▶ Jeśli system nie był używany przez dłuższy czas lub komora rozpylacza była zdemonstrowana, przepłucz komorę rozpylacza i palnik gazem rozpylającym, aby usunąć powietrze z systemu. Kliknij **!**, aby otworzyć okno **Plasma | Control** i kliknij **Purge spray chamber**.
- ▶ Zapal plazmę. W oknie **Plasma | Control** kliknij przycisk **Ignite plasma**.
 - ✓ Następuje faza początkowa, w której palnik jest płukany argonem i sprawdzane są obwody bezpieczeństwa urządzenia ICP-OES. Jeśli wszystko jest w porządku, następuje zapłon plazmy.
- ▶ Obserwuj, czy plazma uformowała się prawidłowo. Plazma musi mieć kształt stożka, wystawać poza cewkę indukcyjną i zwęźać się ostro ku górze.
- ▶ Jeśli tworzy się plazma pierścieniowa, plazma tworzy się tylko wewnątrz cewki indukcyjnej lub słychać grzechotanie. Naciśnij wtedy czerwony przycisk wyłączenia plazmy na urządzeniu.

- ▶ Przed kolejną próbą zapłonu sprawdź, czy wąż próbki jest zanurzony w roztworze płuczającym oraz czy zasilanie gazem i chłodzenie obiegowe są prawidłowe.
 - ✓ Spektrometr jest chłodzony dopiero po pomyślnym zapłonie i stabilnym utworzeniu plazmy. Po 1 ... 2 min procedura zapłonu jest zakończona i uruchamia się pompa perystaltyczna. Spektrometr emisji jest gotowy do pomiarów.
- ▶ Dopiero teraz dokonaj dalszych ustawień w systemie analizy i rozpocznij procedurę pomiarową.

Zobacz także

- 📄 Uruchamianie ASpect PQ [▶ 7]

6.3 Gaszenie plazmy i wyłączenie spektrometru

- ▶ Po zakończeniu analizy przez ok. 3 min pompuj przez system roztwór płuczający, a następnie przez 1 min wodę. Następnie pozostaw urządzenie do wyschnięcia. Jeśli konieczna będzie wymiana węży, nie będzie w nich już kwasu!
- ▶ Zgaś plazmę w programie ASpect PQ, klikając  na pasku narzędzi. Alternatywnie, użyj , aby otworzyć okno **Plasma** i kliknij **Extinguish plasma**.
- ▶ Zakończ program ASpect PQ za pomocą **File | Quit**.
- ▶ Potwierdź pytanie o wyłączenie gazu oczyszczającego dla detektora za pomocą **Yes**, aby wyłączyć gaz oczyszczający.
Jeśli praca jest przerywana tylko na krótki czas (do 30 min) lub odbywa się w zakresie UV, nie wyłączaj gazu oczyszczającego. Oszczędza to czas oczekiwania podczas zapłonu do momentu wystarczającego oczyszczenia czujnika. Pozostaw urządzenie włączone podczas przerwy w pomiarach.
- ▶ Poczekaj, aż pojawi się komunikat informujący o możliwości wyłączenia urządzenia i chłodzenia.
- ▶ Wyłącz urządzenie ICP-OES i w razie potrzeby autosampler za pomocą przełączników zasilania.
- ▶ Podczas codziennych pomiarów można alternatywnie wyłączyć urządzenie ICP-OES za pomocą przełącznika trybu gotowości z przodu urządzenia. Do urządzenia nadal przyłożone jest napięcie sieciowe. W trybie gotowości zasilanie gazem zostaje wyłączone.
- ▶ Poluzuj węże pompy na urządzeniu ICP-OES. Poluzuj dźwignie dociskowe tak, aby pałki zaciskowe nie naciskały już na węże, i wyciągnij z blokady stopery węży po jednej stronie pompy.
- ▶ W przypadku korzystania z autosamplera poluzuj wąż pompy w ten sam sposób.
- ▶ Po wyłączeniu urządzeń zamknij zasilanie gazem.
- ▶ Wyłącz chłodnicę obiegową za pomocą przełącznika zasilania.
- ▶ Wyłącz urządzenie wyciągowe.
- ▶ Zamknij system Windows i wyłącz komputer.
 - ✓ Tym samym analizator jest wyłączony.



WSKAZÓWKA

Przed wyłączeniem urządzenia ICP-OES należy poczekać, aż ostygnie!

Po zgaszeniu plazmy poczekaj co najmniej 30 s przed wyłączeniem urządzenia za pomocą przełącznika zasilania.


6.4 Uruchamianie procedury pomiaru

W ramach przygotowań do pomiaru utwórz metodę i sekwencję lub użyj jednego z przygotowanych arkuszy roboczych.

W razie potrzeby przygotuj identyfikator próbki z dalszymi informacjami o próbce, takimi jak rozcieńczenia.

Przygotuj próbki do pomiaru, np. na tacy autosamplera.

Uruchamianie pomiaru

- ▶ Włącz komputer. Włącz spektrometr emisji i akcesoria.
- ▶ Zapal plazmę.
- ▶ Załaduj metodę:
 - Na pasku narzędzi kliknij ikonę folderu obok pola **Meth**. Wybierz metodę w oknie **Open Method**.
- ▶ Utwórz nową sekwencję lub załaduj istniejącą sekwencję:
 - Na początku sekwencji wykonaj kalibrację.
 - Podczas ładowania sekwencji zwróć uwagę, aby kalibracja pasowała do metody. Linie analizy wzorców kalibracyjnych muszą być zgodne z liniami analizy wybranymi w metodzie na karcie **Calibration**.
 - Po kalibracji zmierz próbkę QC, aby sprawdzić poprawność kalibracji.
- ▶ W razie potrzeby utwórz tabelę identyfikatorów próbek z dodatkowymi informacjami o próbkach.
- ▶ Uruchom procedurę pomiarową, klikając  lub za pomocą pozycji menu **Routine | Run sequence**.
- ▶ W oknie **Start** wybierz nazwę pliku wyników.

Wynik można zapisać w nowym pliku lub dołączyć do istniejącego pliku. Nadpisanie istniejącego pliku jest niemożliwe.

 - ✓ Po wybraniu nazwy pliku uruchamia się procedura pomiarowa zgodnie z ustawieniami w metodzie i sekwencji. W przypadku korzystania z autosamplera pomiar przebiega automatycznie.
- ▶ W przypadku ręcznego doprowadzania próbek bez autosamplera postępuj zgodnie z instrukcjami przygotowania próbek na ekranie.

Zobacz także

- 📖 Opcje przebiegu analizy [▶ 133]


6.5 Wskazania i zapisywanie wyników podczas procesu analizy

Wskazania podczas procesu analizy

Podczas procedury pomiarowej wyniki są wyświetlane w czasie rzeczywistym w oknie głównym. Można również wyświetlić dodatkowe okna z bieżącym wynikiem.

- **Spectrum Plot:** Widok linii analizy
- **Signal plot:** Krzywa sygnału pomiarowego
- **Bar graph:** Zmierzone wartości na wykresie słupkowym
- **Report window:** Raport plazmy
- **Sample conc. in calibration curve:** Wartości próbek na krzywej kalibracyjnej

Okna te można wybrać w oknie **Options | Analysis sequence**. Okna na ekranie mogą być wyświetlane i ukrywane podczas analizy.




- ▶ Poleceniem menu **View | Open Results Windows** lub klawiszem funkcyjnym F7 otwiera się okna.
- ▶ Poleceniem menu **View | Close Results Windows** lub klawiszem funkcyjnym F8 zamyka się okna.
- ▶ Okna można również otworzyć podczas analizy za pomocą .

Postęp pomiaru jest dokumentowany na liście sekwencji w oknie głównym. Wiersze z kolejnymi działaniami są oznaczone następującymi symbolami w kolumnie tabeli:

| Ikona | Znaczenie |
|-------|---|
| - | Jeszcze nie zmierzono/nie przetworzono. |
| 0 | Trwa pomiar. |
| + | Już zmierzono/przetworzono. |

Przyciski na pasku symboli

Podczas pomiaru na pasku symboli wyświetlane są następujące przyciski:

| Przycisk | Opis |
|---|---|
|  | Otwieranie i zamykanie okna wskazań |
|  | Wyświetlanie okna metody Metodę można tylko odczytać, ale nie można jej zmienić. |
|  | Wyświetlanie okna sekwencji Podczas trwającej analizy sekwencja może zostać rozszerzona. Okno sekwencji zawiera przycisk Samples , który otwiera okno Sample ID w celu uzupełnienia danych próbki. |

Zapisywanie danych wyników podczas procesu analizy

Wyniki analizy są zapisywane od razu podczas pomiaru w bazie danych, we wstępnie ustawionej domyślnej ścieżce lub w samodzielnie zdefiniowanych podfolderach. Są one przechowywane w nowej bazie danych lub dołączane do istniejącej bazy danych. Nie jest jednak możliwe nadpisanie bazy danych wyników poprzez wybranie tej samej nazwy.

Miejsce zapisu wyników jest automatycznie wymagane po uruchomieniu procedury pomiarowej. Otwiera się okno **Start** z następującymi opcjami dla pliku wynikowego:

Start Sequence: multi_element_ground

Results file
 Name: multi_element_ground ...
 Folder: (Standard) v
 Description: ...
 New file/list
 Append to file/list
 Extinguish plasma if error occurs

Current method:
 Method_Ground
 Version: 1
 from: Database

Continue with:
 Method_Ground
 Version: 1 Date: 05.06.2020 17:15

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

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

OK Cancel



| Opcja | |
|--|---|
| Name | Wprowadzenie nazwy pliku do bazy danych wyników New file/list Gdy ta opcja jest aktywna, należy wprowadzić nową nazwę pliku. System sprawdza, czy nazwa pliku już istnieje. Istniejące pliki nie mogą zostać nadpisane. Append to file/list Nowe wyniki są dołączane do istniejącego pliku wyników. Kliknięcie ... otwiera okno wyboru, z którego listy można wybrać istniejący plik wyników. |
| Folder | Wybór ścieżki zapisu pliku wyników Jeśli w oknie Options Analysis sequence aktywna jest opcja Attach date/time to the results filename , nazwa wyniku jest automatycznie rozszerzana o te dane. W tym oknie pojawia się komunikat o aktywacji opcji. |
| Description | Wprowadzanie dodatkowej notatki, która zostanie zapisana wraz z wynikami analizy Opisy zdefiniowane przez użytkownika można wybrać za pomocą przycisku ... |
| Extinguish plasma if error occurs | Zgaszenie plazmy, jeśli pomiar zostanie przerwany przez komunikat o błędzie |

Plik zawiera wyniki pomiarów i oceny, a także informacje z identyfikatora próbki. Dodatkowo w bazie danych wyników zapisywane są również parametry metody.

Baza danych wyników jest zapisywana z rozszerzeniami „.tps” (parametry metody, intensywności i stężenia) oraz „.spk” (surowe dane widmowe).

6.6 Przerwanie i kontynuowanie procesu analizy

Proces analizy może zostać przerwany, a następnie wznowiony.


- ▶ Za pomocą pozycji menu **Routine | Stop** lub przez kliknięcie  natychmiast przerwany jest proces analizy.
- ▶ Za pomocą **Routine | Continue** lub  przerwana procedura jest kontynuowana.

- ✓ Otwiera się okno **Continue sequence**, w którym wyświetlony zostaje stan działania przed przerwaniem.
- ✓ Przy zmianie metody aktywuj opcję **Continue with modified method**. Spowoduje to utworzenie nowego wpisu metody w pliku wyników i zapisanie kolejnej wersji metody. Pomiar może być kontynuowany w następujący sposób:

| Opcja | Opis |
|------------------------------|---|
| Continue | Kontynuacja z bieżącą próbką, bieżącą linią i bieżącym pomiarem statystycznym |
| First statistical run | Kontynuacja z bieżącą próbką, bieżącą linią i pierwszym pomiarem statystycznym |
| First element | Kontynuacja z bieżącą próbką, pierwszą linią i pierwszym pomiarem statystycznym |
| From table row -> | Kontynuacja sekwencji od sąsiedniej pozycji w tabeli |

6.7 Powtarzanie działań sekwencji

Poszczególne działania w sekwencji mogą być powtarzane.

- ▶ W oknie głównym na karcie **Sequence** lub **Sequence/Results** zaznacz linię (linie) z działaniem, które ma zostać powtórzone.
Można zaznaczyć wiele działań, klikając odpowiednie wiersze z wciśniętym klawiszem Ctrl lub Shift.
- ▶ Uruchom procedurę pomiarową, klikając  lub za pomocą polecenia menu **Routine | Run Selected Sequence Row...**
- ▶ W oknie **Start** wybierz nazwę pliku, w którym ma zostać zapisany wynik powtórzonego pomiaru.
Wynik może zostać zapisany w nowym pliku lub dołączony do istniejącego pliku. Nie jest możliwe nadpisanie istniejących wyników poprzez wybranie tej samej nazwy pliku.
 - ✓ Następnie rozpocznie się powtarzanie wybranego działania.



WSKAZÓWKA

Jeśli w międzyczasie dokonano zmian w metodzie, przy powtarzaniu sekwencji lub poszczególnych wierszy zostanie użyta zmieniona metoda i zostanie zapisana jako nowa wersja z wynikami.

6.8 Ponowne obliczenie wyników analizy


Ponowne obliczenie wyników analizy umożliwia zmiany warunków oceny, np. zmianę funkcji kalibracji lub metody, w celu uwzględnienia ich w analizie. Zmiany informacji o próbkach, np. nazw próbek, współczynników rozcieńczenia, również wymagają ponownego obliczenia w celu uwzględnienia ich w wynikach analizy.

Obliczone na nowo dane mogą zostać dołączone do bieżącego pliku wyników lub zapisane w nowym pliku. Manipulacja pierwotnymi danymi jest wykluczona. Jeśli w pliku wyników nowe obliczenie powtarza się kilka razy z różnymi parametrami, do każdego nowego obliczenia używane są pierwotne dane pliku wyników.


i WSKAZÓWKA! Przy każdym nowym obliczeniu zapisywana jest nowa wersja metody.

Opcje wprowadzania danych w oknie Reprocess results




| Opcja/pole | Opis |
|----------------------------|---|
| Start data | <p>Wybór danych wejściowych</p> <p>Name Wyświetlanie nazwy pliku wyników, którego dane są obliczane na nowo</p> <p>Modified sample information data Aktywuj tę opcję, jeśli dane w pliku informacji o próbce, np. współczynnik rozcieńczenia, zostały zmienione. Jeśli opcja nie jest aktywna, zmiany w pliku informacji o próbce nie będą uwzględniane podczas ponownego obliczania wyników.</p> <p>Update result plots Okna wyników, np. Display spectra, są aktualizowane tak jak podczas pomiaru. Uwaga: w związku z tym ponowne obliczanie trwa dłużej.</p> |
| Results file Target | <p>Wybór miejsca, w którym mają być zapisywane ponownie obliczone dane wyników.</p> <p>New file/list Zapisywanie danych wyników w nowym pliku Wybierz dla pliku wyników nowe miejsce zapisu obliczonych danych w Folder i Name.</p> <p>Append to file/list Obliczone ponownie dane są dołączane do istniejącego pliku wyników.</p> |
| Description | <p>Ta dodatkowa uwaga jest zapisywana wraz z ponownie obliczonymi wynikami analizy. Wpis jest wymagany, jeśli zainstalowany jest opcjonalny Moduł zgodności z 21 CFR Part 11. Z listy można wybrać opisy zdefiniowane przez użytkownika.</p> |
| Reprocess entries | Wybierz wiersze do ponownego obliczenia. |

| Opcja/pole | Opis |
|--------------------------|--|
| | <p>all Ponowne obliczenie wszystkich pozycji na liście wyników.</p> <p>Select entries Ponowne obliczenie tylko wybranych linii sekwencji. Kliknij  i w oknie Select entries wybierz wszystkie linie sekwencji, które mają zostać przeliczone.</p> <p>Lines of the currently selected method Zaznacz na liście wszystkie linie, które mają zostać ponownie obliczone. Za pomocą Select all wybierz wszystkie linie. Za pomocą Deselect wszystkie zaznaczenia są usuwane z listy linii.</p> |
| Temporary changes | Zapisanie tymczasowych zmian do przeliczenia (przesunięcia długości fali, znaczniki usunięcia) (rozszerzenie pliku „.rep”). Dane są następnie automatycznie ładowane do przynależnego pliku wyników (o tej samej nazwie). |
| add to QC chart | Jeśli ta opcja jest włączona, wyniki próbek typu QC są wprowadzane do karty QC podczas przeliczania. |

Wykonywanie ponownego obliczenia


- ▶ Wprowadź zmiany w parametrach metody lub w oknie **Sample ID**.
- ▶ Kliknij  lub wybierz pozycję menu **Routine | Reprocess**. Otworzy się okno **Reprocess results**.
- ▶ Zdefiniuj dane wejściowe (nazwa, zmienione informacje o próbce, zmieniony widok wyników), miejsce zapisu i nazwę pliku docelowego.
Uwaga: w przypadku ponownego obliczania z powodu zmian w informacjach o próbce należy aktywować opcję **Modified sample information data**. W przeciwnym razie zmiany te nie zostaną uwzględnione.
- ▶ Wybierz wiersze/linie do ponownego obliczenia.
- ▶ Rozpocznij ponowne obliczanie za pomocą **OK**. Jeśli nie zostanie zdefiniowany plik docelowy, pojawi się zapytanie „Reprocess data without saving to a permanent file?”.

Zmiana wzorca kalibracyjnego



- Istniejący wzorzec kalibracyjny można zastąpić wzorcem zmierzonym później. Wykonaj w tym następujące czynności:
- ▶ W oknie głównym na karcie **Sequence** lub **Sequence/Results** wybierz wiersz wzorca kalibracyjnego, który ma zostać zastąpiony.
 - ▶ Uruchom pomiar linii sekwencji, klikając .
 - ▶ W oknie **Start** określ, że wynik ma zostać dołączony do istniejącego pliku. Następnie rozpocznie się pomiar wzorca kalibracyjnego.
 - ▶ Otwórz okno **Reprocess results** klikając na .
 - ▶ Aktywuj opcję **Select entries** i otwórz okno o tej samej nazwie, klikając .
 - ▶ Zaznacz ostatni zmierzony wzorzec i przyciskami strzałek przesunij go na pozycję wzorca, który ma zostać zastąpiony.
 - ▶ Zaznacz wszystkie wiersze, które mają zostać obliczone na nowo. Dezaktywuj stary wzorzec, który nie ma być już uwzględniany w obliczeniach.
 - ▶ Za pomocą **OK** wróć do okna **Reprocess results** i zdefiniować dane wejściowe, miejsce zapisu oraz nazwę pliku docelowego.
 - ▶ Rozpocznij ponowne obliczanie za pomocą **OK**.
✓ Dane zostaną przeliczone dla wybranych wierszy.

Zastępowanie poszczególnych linii wzorca kalibracyjnego

Alternatywnie można również zastąpić wzorzec w następujący sposób:


- ▶ W oknie głównym na karcie **Sequence** lub **Sequence/Results** wybierz wiersz wzorca kalibracyjnego, który ma zostać zastąpiony.
- ▶ Uruchom pomiar linii sekwencji, klikając .
- ▶ W oknie **Start** określ, że wynik ma zostać dołączony do istniejącego pliku. Następnie rozpocznie się pomiar wzorca kalibracyjnego.
- ▶ Na liście wyników kliknij prawym przyciskiem myszy wzorzec (linię), który ma zostać zastąpiony. Wybierz **Sample single values** z menu kontekstowego.
- ▶ W oknie **Sample single values** aktywuj pole wyboru **Replace with entry number** i wprowadź w polu wprowadzania numer linii wzorca, który ma zostać zastąpiony.
- ▶ Uruchom ponowne obliczanie w sposób opisany powyżej.
 - ✓ Dane zostaną przeliczone dla wybranych wierszy.


Zobacz także

-  Tworzenie predefiniowanych uwag [[▶ 128](#)]
-  Definiowanie kontroli jakości (okno Method | QCS) [[▶ 45](#)]

6.9 Ocena pomiarów równoległe do trwającej analizy (tryb offline)

Podczas pomiaru nie można przeprowadzać dalszej oceny wyników. Jeśli aplikacja jest już uruchomiona, można jednak otworzyć kolejną instancję programu w trybie offline. W tym trybie nie ma połączenia z urządzeniem. Jednak wszystkie inne funkcje, takie jak tworzenie metod lub ładowanie i analiza wyników, mogą być używane równoległe do trybu pomiarowego trwającego w pierwszej instancji programu.

- ▶ Uruchom drugą instancję programu ASpect PQ za pomocą pozycji menu **File | Start Offline Program Instance**.
- ▶ Otwórz plik wyników trwającego pomiaru za pomocą pozycji menu **File | Open Results**.
Zmierzone do tej pory wyniki zostaną załadowane do okna wyników.
- ▶ Kolejne wyniki trwającego pomiaru można załadować kliknięciem  na pasku narzędzi lub przez pozycję menu **View | Update results list**.
 - ✓ Wskaźnik wyników zostaje zaktualizowany. Można dalej przetwarzać wyniki.

 **WSKAZÓWKA!** Przy ponownym obliczaniu ponownie obliczone wyniki są zapisywane w nowej bazie danych. Dostęp do pierwotnego pliku nie jest możliwy.

6.10 Wyświetlanie wyników i postępu analizy w oknie głównym

Wyniki pomiarów i sekwencja są wyświetlane na dużej powierzchni w tle interfejsu roboczego w oknie głównym. Wyświetlanie w różnych kartach w oknie głównym umożliwia dobry przegląd wyników pomiarów i ocen statystycznych.

Można wybrać następujące karty:

- **Sequence/Results** (zawartość kart **Sequence** i **Results** na jednej karcie)
- **Sequence** (widok bieżącej sekwencji)
- **Results** (widok wyników pomiarów)
- **Overview** (podsumowanie wyników pomiarów)

Pasek stanu okna wyników zawiera nazwę bieżącego pliku wyników.

Okno główne ASpect PQ z widokiem wyników

| No. | Sample type | Name | Pos. | No. | Name | Line | Type | Ints. | SD(Ints.) | RSD% | Date | Time | Single values(Ints.) |
|-----|----------------|------|------|-----|-----------|----------|------|-------|-----------|-------|------------|-------|----------------------|
| 1 | Cal-Zero1 | | 101 | 1 | Kal-HuE1 | Al67.022 | | 14 | 2 | 10.84 | 11.02.2025 | 12:51 | 15 14 12 |
| 2 | Cal-Std1 | | 102 | 2 | | Al67.022 | | 129 | 72 | 55.67 | 11.02.2025 | 12:51 | 30 189 147 |
| 3 | Cal-Std2 | | 103 | 3 | | Al67.022 | | 16 | 3 | 21.81 | 11.02.2025 | 12:51 | 12 18 17 |
| 4 | Compute calib. | | | 4 | | Al67.022 | | 9 | 3 | 28.79 | 11.02.2025 | 12:51 | 12 9 7 |
| 5 | Sample | | 101 | 5 | | Al67.022 | | 40 | 33 | 82.69 | 11.02.2025 | 12:51 | 35 10 76 |
| 6 | Sample | | 102 | 6 | | Al67.022 | | 46 | 13 | 27.33 | 11.02.2025 | 12:51 | 35 44 60 |
| 7 | Sample | | 103 | 7 | | Al67.022 | | 47 | 9 | 19.19 | 11.02.2025 | 12:51 | 98 43 41 |
| 8 | Sample | | 104 | 8 | | Al67.022 | | -198 | 34 | 16.98 | 11.02.2025 | 12:51 | -184 -174 -237 |
| 9 | Sample | | 105 | 9 | | Al67.022 | | 24 | 4 | 16.54 | 11.02.2025 | 12:51 | 19 26 26 |
| 10 | Sample | | 106 | 10 | | Al67.022 | | 105 | 23 | 21.89 | 11.02.2025 | 12:51 | 87 98 131 |
| 11 | Sample | | 107 | 11 | | Al67.022 | | 30 | 9 | 30.63 | 11.02.2025 | 12:51 | 23 41 27 |
| 12 | Sample | | 108 | 12 | Kal-Std.1 | Al67.022 | | 485 | 2 | 0.35 | 11.02.2025 | 12:51 | 486 483 486 |
| 13 | Sample | | 109 | 13 | | Al67.022 | | 3988 | 93 | 2.34 | 11.02.2025 | 12:51 | 4087 3976 3901 |
| 14 | Sample | | 110 | 14 | | Al67.022 | | 4614 | 8 | 0.17 | 11.02.2025 | 12:51 | 4606 4613 4622 |
| 15 | | | | 15 | | Al67.022 | | 5385 | 32 | 0.59 | 11.02.2025 | 12:51 | 5350 5396 5410 |
| 16 | | | | 16 | | Al67.022 | | 8831 | 44 | 0.49 | 11.02.2025 | 12:51 | 8808 8804 8882 |
| 17 | | | | 17 | | Al67.022 | | 2982 | 45 | 1.13 | 11.02.2025 | 12:51 | 2932 4020 3993 |
| 18 | | | | 18 | | Al67.022 | | 3948 | 38 | 0.95 | 11.02.2025 | 12:51 | 3912 3946 3987 |
| 19 | | | | 19 | | Al67.022 | | 3405 | 17 | 0.49 | 11.02.2025 | 12:51 | 3398 3424 3393 |
| 20 | | | | 20 | | Al67.022 | | 345 | 3 | 1.80 | 11.02.2025 | 12:51 | 341 346 347 |
| 21 | | | | 21 | | Al67.022 | | 5600 | 60 | 1.06 | 11.02.2025 | 12:51 | 5643 5628 5532 |
| 22 | | | | 22 | | Al67.022 | | 3735 | 12 | 0.31 | 11.02.2025 | 12:51 | 3723 3736 3746 |
| 23 | Kal-Std.2 | | | 23 | | Al67.022 | | 2411 | 30 | 1.25 | 11.02.2025 | 12:51 | 2385 2405 2444 |
| 24 | | | | 24 | | Al67.022 | | 19736 | 283 | 1.43 | 11.02.2025 | 12:51 | 20039 19691 19478 |
| 25 | | | | 25 | | Al67.022 | | 22989 | 213 | 0.93 | 11.02.2025 | 12:51 | 22767 23009 23192 |
| 26 | | | | 26 | | Al67.022 | | 27072 | 106 | 0.39 | 11.02.2025 | 12:51 | 27083 26961 27172 |
| 27 | | | | 27 | | Al67.022 | | 45223 | 225 | 0.50 | 11.02.2025 | 12:51 | 45469 45429 45804 |
| 28 | | | | 28 | | Al67.022 | | 19450 | 104 | 0.53 | 11.02.2025 | 12:51 | 19481 19329 19334 |
| 29 | | | | 29 | | Al67.022 | | 19575 | 159 | 0.81 | 11.02.2025 | 12:51 | 19757 19460 19508 |
| 30 | | | | 30 | | Al67.022 | | 17495 | 192 | 1.10 | 11.02.2025 | 12:51 | 17445 17706 17333 |
| 31 | | | | 31 | | Al67.022 | | 1632 | 14 | 0.83 | 11.02.2025 | 12:51 | 1640 1640 1617 |
| 32 | | | | 32 | | Al67.022 | | 28289 | 153 | 0.54 | 11.02.2025 | 12:51 | 28197 28466 28205 |
| 33 | | | | 33 | | Al67.022 | | 18746 | 250 | 1.33 | 11.02.2025 | 12:51 | 18522 18699 19016 |
| 34 | Kal-Std.3 | | | 34 | | Al67.022 | | 4820 | 32 | 0.66 | 11.02.2025 | 12:51 | 4786 4849 4824 |
| 35 | | | | 35 | | Al67.022 | | 28350 | 234 | 0.84 | 11.02.2025 | 12:51 | 28924 28249 28376 |
| 36 | | | | 36 | | Al67.022 | | 46168 | 53 | 0.11 | 11.02.2025 | 12:51 | 46216 46175 46111 |
| 37 | | | | 37 | | Al67.022 | | 54897 | 473 | 0.86 | 11.02.2025 | 12:51 | 55433 54716 54540 |
| 38 | | | | 38 | | Al67.022 | | 40118 | 460 | 0.73 | 11.02.2025 | 12:51 | 40453 40047 40014 |

6.10.1 Karta Sequence/Results

Karta **Sequence/Results** zawiera dane z dwóch tabel **Sequence** i **Results**.

Zobacz także

Karta Sequence [[▶ 73](#)]

Karta Results [[▶ 73](#)]

6.10.2 Karta Sequence

Na karcie **Sequence** znajduje się aktywna sekwencja.

Podczas analizy można tutaj śledzić jej postęp. Różne próbki i funkcje specjalne są oznaczone w 1. kolumnie w następujący sposób:

| Ikona | Znaczenie |
|-------|---|
| - | Jeszcze nie zmierzono/nie przetworzono. |
| O | Trwa pomiar. |
| + | Już zmierzono/przetworzono. |

i WSKAZÓWK! Po pomiarze można przeprowadzić nowy pomiar wybranej próbki.

W tym celu należy zaznaczyć wiersz próbki w sekwencji, a następnie nacisnąć na pa-sku narzędzi.

6.10.3 Karta Results

Karta **Results** zawiera wszystkie wyniki pomiarów i ocen statystycznych. Dla lepszego przeglądu wartości są rozmieszczone w dalszych tabelach. Zakładki tych tabel znajdują się w dolnej części okna.

Wartości są uporządkowane w kolejności pomiaru próbki. Dla każdej próbki wymienione są analizowane pierwiastki.

Tabela Ints./Time

Tabela zawiera intensywności i oceny statystyczne zgodnie z ustawieniami metody (okno **Method | QCC**).

| Kolumna | Opis |
|------------------------------|---|
| No. | Numer w sekwencji analizy |
| Name | Nazwa próbki, wzorca lub próbki/wzorca QC |
| Line | Linia pierwiastka |
| Type | Wzorec wewnętrzny lub analit |
| Ints. | Średnia zmierzonych poszczególnych intensywności próbki |
| SD(Ints.) | Odchylenie standardowe (statystyka średniej) |
| RSD% | Względne odchylenie standardowe (statystyka średniej) |
| Date/Time | Czas pomiaru |
| Single values (Ints.) | Poszczególne wartości pomiarów intensywności |

Tabela Conc.1

Tabela **Conc.1** przedstawia analizowane stężenie próbki, jaka została doprowadzona do urządzenia ICP-OES. Jako jednostka używana jest jednostka kalibracji ustawiona w metodzie.

| Kolumna | Opis |
|------------------------------|---|
| No. | Numer w sekwencji analizy |
| Name | Nazwa próbki, wzorca lub próbki/wzorca QC |
| Line | Linia pierwiastka |
| Type | Wzorec wewnętrzny lub analit |
| Unit | Jednostka stężenia |
| Conc.1 | Stężenie analitu w próbce / stężenie analitu we wzorcu |
| SD1 | Odchylenie standardowe Conc.1 (statystyka średniej) |
| RSD% | Względne odchylenie standardowe Conc.1 (statystyka średniej) |
| R | Zakres Conc.1 (statystyka mediany) |
| R% | Względny zakres Conc.1 (statystyka mediany) |
| Cf | Przedział ufności |
| DF | Współczynnik wstępnego rozcieńczenia próbki Współczynnik, o który oryginalna próbka została rozcieńczona przed umieszczeniem jej w autosamplerze lub doprowadzeniem do plazmy w przypadku pracy bez autosamplera |
| Rem. | Cechy szczególne uśredniania wartości |
| Ints. | Średnia zmierzonych poszczególnych intensywności podczas powtórzeń pomiaru |
| SD(Ints.) | Odchylenie standardowe intensywności (statystyka średniej) |
| Date/Time | Czas pomiaru |
| Single values (Ints.) | Poszczególne wartości intensywności podczas powtórzeń pomiaru |

Tabela Conc.2

Tabela **Conc.2** przedstawia stężenie pierwotnej próbki. Podczas obliczania Conc.2 uwzględniane są pliki informacji o próbce:

- Rozcieńczenie wstępne
- Odważki w przypadku substancji stałych i objętości roztworu
- Współczynniki przeliczania innych jednostek

| Kolumna | Opis |
|-----------------------|---|
| No. | Numer w sekwencji analizy |
| Name | Nazwa próbki, wzorca lub próbki/wzorca QC |
| Line | Linia pierwiastka |
| Type | Wzorzec wewnętrzny lub analit |
| Unit | Jednostka stężenia |
| Conc. | Stężenie pierwotnej próbki z uwzględnieniem informacji o próbce |
| SD2 | Odchylenie standardowe Conc.2 (statystyka średniej) |
| RSD% | Względne odchylenie standardowe Conc.2 (statystyka średniej) |
| Cf | Przedział ufności Conc.2 |
| 100% norm. | Conc.2 znormalizowane do udziału procentowego |
| Ints. | Średnia z wyznaczonych poszczególnych intensywności |
| SD(Ints.) | Odchylenie standardowe intensywności (statystyka średniej) |
| R(Ints.) | Zakres intensywności (statystyka mediany) |
| Date / Time | Czas pomiaru |
| Single values (Ints.) | Poszczególne wartości pomiarów intensywności |

Tabela QC Res.

W tabeli **QC Res.** podawane są wyniki próbek QC:

- Wartość zadana i wartość rzeczywista stężenia
- Współczynniki ponownego wykrycia (wszystkie typy z wyjątkiem wartości ślepej próby)
- Reakcje na wszelkie odchylenia (wszystkie typy z wyjątkiem wartości ślepej próby).

| Kolumna | Opis |
|--|--|
| No. | Numer w sekwencji analizy |
| Name | Nazwa próbki, wzorca lub próbki/wzorca QC |
| Line | Linia pierwiastka |
| Type | Wzorzec wewnętrzny lub analit |
| QC (do funkcji kalibracji) | R²(adj.) lub R Slope BEC Background Equivalent Concentration |
| QC(dla próbek QC, nie dla wartości ślepej próby QC) | Conc.1 Wartość zadana Recovery Współczynnik ponownego wykrycia Dla próbek QC i wzorca QC wyznaczany jest współczynnik ponownego wykrycia. W przypadku wzorca podstawowego QC, trendu QC i macierzy QC obliczany jest współczynnik ponownego wykrycia wzrostu stężenia spowodowanego przez dodanie roztworu o znanym stężeniu. |
| QC (dla granicy wykrywalności wartości ślepej próby) | SD Odchylenie standardowe pomiarów wartości ślepej próby LOD Granica wykrywalności LOQ Granica oznaczalności |
| Rem. | Uwagi dotyczące zdarzeń QC (np. >Cal.) |
| Ints. | Średnia zmierzonych poszczególnych intensywności |

| Kolumna | Opis |
|-----------------------|--|
| SD | Odchylenie standardowe intensywności (statystyka średniej) |
| Date / Time | Czas pomiaru |
| Single values (Ints.) | Poszczególne wartości pomiarów intensywności |

Tabela Error

Jeśli w pomiarze wystąpią błędy, odpowiednie pomiary zostają zaznaczone na czerwono we wszystkich tabelach. W tabeli **Error** dokumentowane są pisemnie błędy pomiaru wraz z numerem błędu.

Tabela Single values

Tabela **Single values** zawiera zmierzone poszczególne wartości intensywności i odpowiadającą im intensywność tła.



Tabela Sample ID

Tabela **Sample ID** zawiera przykładowe informacje o próbce.

| Kolumna | Opis |
|-------------|--|
| No. | Numer w sekwencji analizy |
| Name | Nazwa próbki, wzorca lub próbki/wzorca QC |
| Line | Linia pierwiastka |
| Pos | Pozycja próbki w zmieniarce próbek |
| Pre-DF | Współczynnik wstępnego rozcieńczenia Współczynnik, o który oryginalna próbka została rozcieńczona przed umieszczeniem jej w autosamplerze lub doprowadzeniem do spektrometru w przypadku pracy bez autosamplera. Współczynnik ten jest wymagany do obliczenia stężenia pierwotnej próbki. |
| Wt. | Odważka w gramach Masa pierwotnej próbki, która została wprowadzona do roztworu podczas wstępnej obróbki próbki (w g). Masa jest wymagana do obliczenia stężenia pierwotnej próbki (Conc.2). |
| Vol. | Objętość rozpuszczalnika, w którym rozpuszczono daną odważkę (w mL). Wartość ta jest wymagana do obliczenia stężenia pierwotnej próbki (Conc.2). |
| Total wt. | Całkowita odważka, zawiera próbkę i rozcieńczalnik (tylko dla typu jednostki liquid, liquid grav.) |
| Name(2) | Dalsza nazwa próbki z tabeli informacji o próbce |
| AS-DF | Współczynnik rozcieńczenia autosamplera |
| Blank corr. | Korekta o wartość ślepej próby off Nie przeprowadzono korekty o wartość ślepej próby. on Aby obliczyć stężenie pierwotnej próbki, odjęta została wartość ślepej próby ostatnio zmierzona w sekwencji. |

Tabela User defined

W tabeli **User defined** można wybrać parametry wyświetlania/drukowania wyniku i ich kolejność w samej tabeli.

- ▶ Kliknij przycisk **Select columns** w prawym dolnym rogu tabeli.
- ▶ W oknie **Select columns** zaznacz wymagane parametry, klikając je myszą.
- ▶ Aby zmienić kolejność na wskazaniu, zaznacz parametr, którego pozycja ma zostać zmieniona, i przesuń go na liście przyciskami  i .

- ▶ Po powrocie do okna głównego wyświetlane są wyniki. Szerokość kolumn tabeli można zmieniać, przesuwając wskaźnik myszy na linię tabeli w nagłówku tabeli (wskaźnik zmieni się w podwójną strzałkę), a następnie przytrzymując przycisk myszy i przeciągając kolumnę tabeli na żądaną szerokość.

Wskazówka:

Szerokość kolumny jest zapisywana w tym widoku. W przypadku innych tabel w oknie głównym zmiany szerokości kolumn są resetowane przy zamknięciu.

Zobacz także

- 📖 Opcje przebiegu analizy [▶ 133]
- 📖 Przegląd oznaczeń na wskazaniu wartości [▶ 179]
- 📖 Pliki informacji o próbkach (identyfikator próbki) [▶ 59]


6.10.4 Karta Przegląd

Na karcie **Overview** podsumowywane są wyniki analizy. Można wybrać różne wyświetlane wartości:

| Wartość | Opis |
|--------------------------------|--|
| Conc.1 | Stężenie 1 |
| Conc.(RSD%) | Stężenie 1 (względne odchylenie standardowe) |
| Conc.2 | Stężenie 2 |
| Conc.2(RSD%) | Stężenie 2 (względne odchylenie standardowe) |
| Ints. | Intensywność |
| Ints.(RSD%) | Intensywność (względne odchylenie standardowe) |
| Ints.(SD) | Intensywność (odchylenie standardowe) |
| LOD | Granica wykrywalności |
| LOQ | Granica oznaczalności |
| Recovery(Nominal val.) | Współczynnik ponownego wykrycia (wartość zadana) |
| R ² / Recal. factor | Współczynnik determinacji / współczynnik rekaliibracji |
| 100% norm. | Stężenie znormalizowane do udziału procentowego 2 |

Aktywując pola wyboru, można wyświetlić następujące typy próbek:

- Sample
- QC sample
- Cal-Std
- Inne

Za pomocą  otwiera się okno **Print Overview**, w którym można uruchomić wydruk danych wyświetlanych w bieżącym przeglądzie.

Zobacz także

- 📖 Funkcje drukowania w ASpect PQ [▶ 114]

6.11 Wyświetlanie i edytowanie poszczególnych wartości próbek

Można wyświetlić poszczególne wartości próbek i wykluczyć poszczególne wartości z obliczania stężenia próbki.

- ▶ Kliknij prawym przyciskiem myszy wiersz w tabeli wyników i wybierz **Sample single values** z menu kontekstowego.
Alternatywnie wybierz wiersz próbki i wybierz polecenie menu **View | Sample single values**.

Okna Sample single values

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:

Wyświetlanie poszczególnych wartości (tabela)

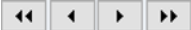
Poszczególne wartości próbek są wyświetlane w tabeli.

| Kolumna tabeli | Opis |
|----------------|--|
| No. | Numer pojedynczej wartości w pomiarze próbki |
| Ints. | Intensywność pojedynczej wartości |
| Conc.1 | Stężenie analitu w analizowanej próbce |
| Rem. | none Pojedyncza wartość jest uwzględniana przy obliczaniu średniej próbki. #MAN Wartość została ręcznie usunięta z obliczenia wartości próbki. #KOR Wartość została automatycznie wykluczona z obliczenia wartości próbki na podstawie testu wartości odstających Grubbsa. |

Informacja o próbce

| Pole | Opis |
|-------------|--|
| No. | Numer pomiaru w tabeli wyników |
| Type | Typ próbki (próbka, próbka wzorca lub próbka QC) |
| Name | Nazwa próbki |
| Date / Time | Data i godzina pomiaru zaznaczonego w tabeli |
| Ints.(Mean) | Uśredniona intensywność dla wszystkich pojedynczych wartości |
| SD | Odchylenie standardowe (statystyka średniej). Wyświetlanie jest niezależne od metody statystycznej (średniej/mediany) wybranej dla pomiaru. |
| RSD | Względne odchylenie standardowe (statystyka średniej) Wyświetlanie jest niezależne od metody statystycznej (średniej/mediany) wybranej dla pomiaru. |

Dalsze przyciski i opcje w oknie
Sample single values

| Opcja / przyciski | Opis |
|---|---|
| Delete / Reactiv. | Wykluczenie pojedynczej wartości próbki z obliczenia średniej lub ponowne włączenie do obliczenia. |
| Edit spectra | Wyświetlanie widm linii zależnych od długości fali |
| Replace with entry number | Tylko dla wzorców kalibracyjnych Podczas ponownego obliczania bieżąca próbka ma zostać zastąpiona próbką w pozycji Enr. w tabeli wyników. |
|  | Przechodzenie między wierszami poszczególnych próbek i między próbkami w tabeli wyników. |

Wykluczanie pojedynczych wartości próbek

Pojedynczą wartość można ręcznie wykluczyć z obliczenia średniej próbki.

- ▶ Zaznacz w tabeli pojedynczą wartość, która ma zostać wykluczona.
- ▶ Opcja **Delete** dezaktywuje wartość do obliczania średniej próbki podczas ponownego obliczania wyników.
- ▶ Opcja **Reactiv.** ponownie uwzględni zaznaczoną pojedynczą wartość w obliczeniach.

i WSKAZÓWKA! Za pomocą testu wartości odstających Grubbsa można podczas analizy automatycznie wyszukiwać wartości odstające wśród pojedynczych wartości i eliminować je.

Zobacz także

-  Wyświetlanie i edycja widm intensywności [▶ 79]

6.12 Wyświetlanie i edycja widm intensywności

Wyświetlanie widm intensywności w oknie **Edit spectra** służy do wykonywania następujących zadań:

- Wyznaczanie środka ciężkości piku linii analizy i zapisanie go w pliku linii
- Wyznaczanie korekty tła z uwzględnieniem macierzy próbki i przejmowanie jej metody
- Tworzenie korekt widmowych
- Identyfikacja linii obok linii analizy

Dla każdego pomiaru w oknie wyników można wyświetlać i edytować widma intensywności.

- ▶ Otwórz okno **Edit spectra**, klikając dwukrotnie odpowiedni wiersz próbki w tabeli wyników.
Alternatywnie kliknij prawym przyciskiem myszy wiersz w tabeli wyników i kliknij **Edit spectra** w menu kontekstowym. Można również zaznaczyć linię próbki i wybrać polecenie menu **View | Edit spectra**.

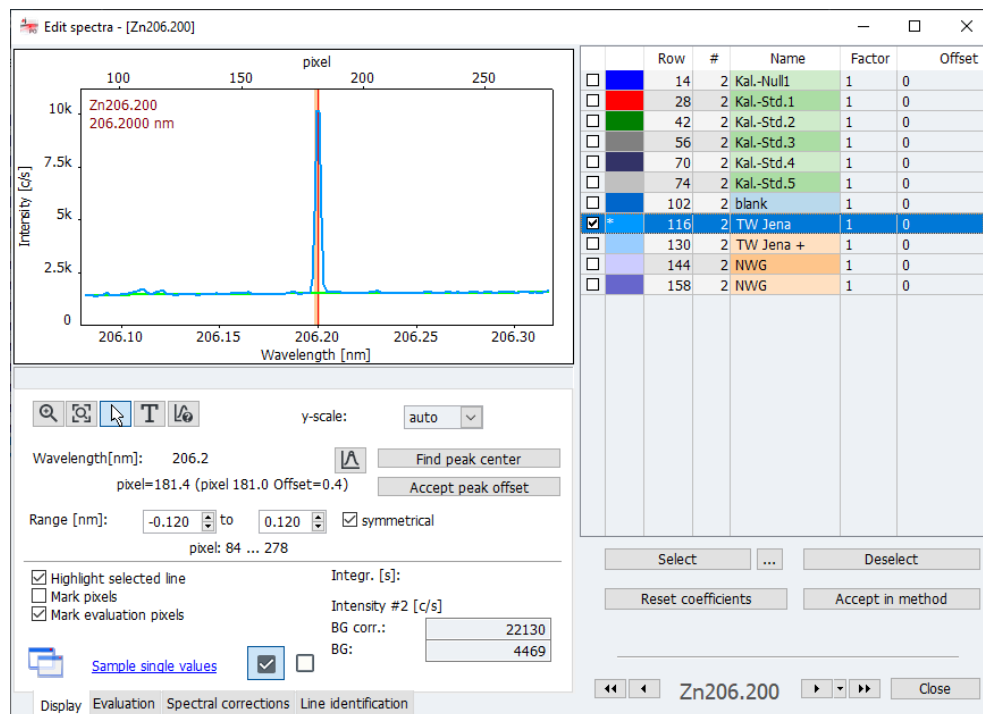
W oknie **Edit spectra** dla każdej linii analizy podawana jest lista wszystkich zmierzonych próbek ze wszystkimi poszczególnymi wartościami. Można przechodzić pomiędzy poszczególnymi liniami analizy.

Po lewej stronie okna **Edit spectra** znajduje się widok graficzny widma intensywności wybranych próbek lub próbki i cztery zakładki do analizy i edycji widma. W przeglądarce po prawej stronie można wybrać poszczególne wartości próbek do wyświetlenia.

6.12.1 Wyświetlanie widm - okno Edit spectra / Display

Okno **Edit spectra | Display** zawiera przegląd widm próbek. Można określić położenie piksu i przejść znalezione parametry do pliku linii/długości fali i metody.

Okno Edit spectra | Display



Wybór widm / lista próbek

Na liście próbek po prawej stronie wymienione są wszystkie poszczególne wartości próbek linii analizy.

- ▶ Aktywuj pola wyboru poszczególnych wartości, które mają zostać wyświetlone na wykresie.
Widma poszczególnych wartości próbek są wyświetlane nałożone na siebie. Do poszczególnych widm przypisany jest kolor pola z tabeli.
- ▶ Pojedyncza próbka zaznaczona myszą (niebieski pasek w tabeli) jest pogrubiona na wykresie, jeśli opcja **Highlight selected line** jest aktywna w lewym dolnym rogu okna.
- ▶ Za pomocą przycisków pod tabelą można filtrować wyświetlanie próbek/powtórnych pomiarów na liście próbek oraz wybór widoku graficznego widm (aktywacja pola wyboru na liście próbek):
 - Kliknij obok **Select** na **...**.
 - W oknie **Selection** dokonaj następujących ustawień:

| Opcja | Opis |
|------------------|---|
| all | Wybór wszystkich wierszy listy wyników w oknie głównym do widoku graficznego (zaznacz pole wyboru widoku graficznego). |
| from/to | Można wybierać tylko widma pomiędzy ustawionymi liniami listy wyników od/do. |
| Replicate | Wybór poszczególnych wartości próbki: all Wybiera wszystkie pojedyncze wartości próbki. Liczba porządkowa, np. „2.” Wybór tylko wybranej pojedynczej wartości próbki |

| Opcja | Opis |
|--|--|
| show selected replicate(s) only | Jeśli opcja ta jest aktywna, na liście próbek wyświetlane są tylko pozycje wybranego powtórnego pomiaru. Jeśli opcja ta jest nieaktywna, wyświetlane są wszystkie pojedyncze widma i ładowane są wybrane powyżej pozycje (wszystkie lub od/do) z okna głównego. |

- Poprzez kliknięcie **Select** dokonuje się wyświetlenia i wyboru widm przy użyciu parametrów ustawionych powyżej.
- Za pomocą **Deselect** dezaktywuje się wszystkie pola wyboru wyświetlania pojedynczych wartości.





Wprowadzanie współczynnika i przesunięcia

- ▶ Dla każdego widma można wprowadzić współczynnik i/lub przesunięcie w tabeli próbek. Zmanipulowane w ten sposób widmo jest rozciągane/ściskane i przesuwane wzdłuż osi y.
- ▶ Kliknięcie **Reset coefficients** resetuje współczynnik i przesunięcie i wyświetla widmo w jego pierwotnym stanie.

Wyświetlanie widm linii

Wybrane widma są wyświetlane po lewej stronie. Intensywność w zliczeniach na sekundę jest wykreślana względem długości fali w nanometrach. Przypisanie pikseli jest wyświetlane w górnej części wykresu. Spektrometr jest ustawiony tak, że na pikselu pomiarowym, np. 180, znajduje się środek ciężkości piksu. Przesunięcia środka ciężkości piksu muszą zostać skorygowane dla każdej linii analizy, patrz poniżej.



Przyciski mają następujące funkcje dla widoku widma:

| Opcja / przycisk | Opis |
|---|---|
|  | Aktywacja powiększenia wykresu. Zaznaczanie fragmentu widma, który ma zostać powiększony, z wciśniętym lewym przyciskiem myszy. |
|  | Przywrócenie pierwotnych współrzędnych po powiększeniu. |
|  | Aktywacja trybu zaznaczania na widokach krzywej sygnału lub widm. Lewym przyciskiem myszy wybiera się punkty pomiarowe. Wartości wybranego punktu pomiarowego są wyświetlane w polu wyjściowym pod przyciskami. |
|  | Aktywacja trybu tekstowego. Przytrzymując lewy przycisk myszy, można wybrać obszar okienka, w którym można dodać tekst do wykresu. Dwukrotne kliknięcie istniejącego tekstu otwiera okno umożliwiające zmianę lub usunięcie tekstu. Istniejący tekst można przenieść za pomocą kombinacji klawiszy Ctrl + prawy przycisk myszy. |
|  | Aktywacja trybu identyfikacji linii. Klikając lub przeciągając myszą, można przeszukać bazę danych linii pod kątem linii pierwiastków przy wybranej pozycji długości fali. Znaleziona linia jest wyświetlana pod wykresem. |
| y-scale | Wybór skalowania grafiki: auto. Auto skalowanie: Widmo jest wyświetlane z optymalnym rozwinęciem rzędnych. Value Ręczne skalowanie. Należy wybrać z listy górną granicę rzędnych. |
| Wavelength | Wyświetlanie długości fali linii analizy. |
|  | Ręczne ustawianie środka ciężkości piksu. |
| Find peak center | Automatyczne wyszukiwanie piksu i korygowanie przesunięcia. |




| Opcja / przycisk | Opis |
|-------------------------------------|---|
| Accept peak offset | Zapisywanie przesunięcia pików w bibliotece linii. Od tego momentu przesunięcie jest używane do każdego pomiaru tej linii pierwiastka. |
| Range (nm) | Wybór zakresu długości fali powyżej i poniżej linii analizy. Ten zakres długości fali jest dostępny do oceny spektralnej, np. korekcji tła. Jeśli pole wyboru symmetrical jest aktywne, zakres długości fali poniżej i powyżej długości fali jest taki sam. Odpowiedni zakres pikseli jest wyświetlany pod polami wprowadzania. Przenieś ustawienia zakresu długości fali wybranej linii do bieżącej metody pomiaru, klikając Accept in method . Zakres ten służy do dynamicznego dostosowywania tła (lub automatycznej korekcji tła) na potrzeby obliczeń. Dane są również zmieniane w oknie metody na karcie Evaluation . |
| Highlight selected line | Pojedyncze widmo zaznaczone w przeglądzie po prawej stronie zostanie wyróżnione grubą linią na wykresie. |
| Mark pixels | Piksele zostają oznaczone kółkiem na wykresie. |
| Mark evaluation pixels | Centralny piksel oceny w środku ciężkości pików zostaje wyróżniony czerwoną linią. Jeśli do oceny używanych jest wiele pikseli, ich zakres jest zaznaczony na jasnoczerwono. |
| Intensity | BG corr. Intensywność skorygowana względem tła BG Intensywność tła |
| Sample single values | Link do okna Sample single values |
| <input checked="" type="checkbox"/> | Jeśli symbol jest zaznaczony w ten sposób, linia jest używana w metodzie. W ten sposób można wybrać odpowiednie linie w oknie Edit spectra podczas rozwoju metody. |
| <input type="checkbox"/> | Linie nie ma być używana w metodzie. |

Automatyczne ustawienie środka ciężkości pików

Podczas rozwoju metody należy skorygować przesunięcia pików związane z urządzeniem i przesunięcia spowodowane interferencjami linii, np. duplikatami.

- ▶ Kliknij **Find peak center**. Za pomocą automatycznego wyznaczania środka ciężkości pików można bardzo dobrze wyznaczyć większość pików.
Alternatywnie kliknij  i ręcznie zaznacz środek ciężkości pików w widmie.
- ▶ Opcjonalnie można ponownie obliczyć wyniki w celu oceny nowego przesunięcia pików.
Przejdź do okna wyników i rozpocznij ponowne obliczanie, klikając .
- ▶ Zapisz znalezione przesunięcie pików za pomocą **Accept peak offset** w pliku linii/długości fali urządzenia.
✓ Dane są teraz dostępne do dalszej oceny linii analizy.

Zobacz także

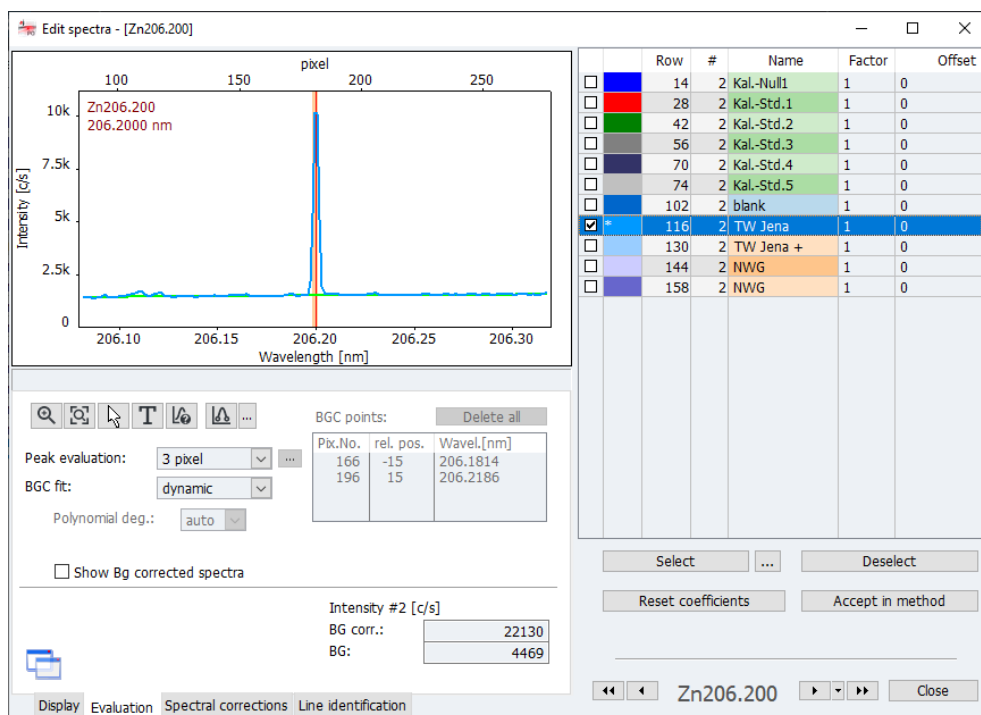
-  Definiowanie linii analizy (okno Method | Lines) [▶ 25]
-  Ponowne obliczenie wyników analizy [▶ 69]
-  Znajdowanie linii - okno Edit spectra | Line identification [▶ 87]

6.12.2 Ocena pików i wyznaczanie korekty tła - okno Edit spectra | Processing

Ciągłe emisje tła, które powodują wahania intensywności w szerokim zakresie widma wokół linii analizy, można skompensować za pomocą korekty tła. Polega to na wybraniu pikseli (punktów korekty tła) po obu stronach linii analizy, obliczenie regresji przez punkty i użycie krzywej regresji do korekty tła.

W statycznej metodzie wyboru punktów korekty tła punkty są ustawiane ręcznie i wyznaczany jest stopień wielomianu samej krzywej regresji. W metodzie dynamicznej krzywa regresji jest obliczana automatycznie przy użyciu algorytmu ABC (ABC = automatic baseline correction).




Nieciągłe zakłócenia tła, np. spowodowane nałożeniem linii na element macierzy, można zminimalizować za pomocą widm korekcyjnych.



Przegląd elementów do oceny pików i korekty tła

Przyciski widoku widma, niektórych wartości wyjściowych i wyboru poszczególnych wartości próbek opisano w rozdziale dotyczącym okna **Edit spectra | Display**.



| Opcja/przycisk | Opis |
|------------------------|---|
| Peak evaluation | Ustawianie liczby pikseli do oceny pików. 1 Sygnał pomiarowy jest ustalany tylko w pikselu, w którym znajduje się środek ciężkości pików. Wartość > 1 Liczba pikseli używanych do określenia sygnału pomiarowego Poszczególne sygnały pikseli są sumowane. Wynik jest zatem większy niż maksimum pików. Piksel ze środkiem ciężkości pików znajduje się w środku zakresu. Height Wysokość pików jest używana do oceny. |

| Opcja/ przycisk | Opis |
|---|---|
| | <p>User defined Zakres oceny jest definiowany przez użytkownika. Opcja ta jest preferowana do oceny duplikatów. Po kliknięciu  na liście aktywowane są wszystkie piksele używane do oceny.</p> |
| BGC fit | <p>Wybór rodzaju korekcji tła:</p> <p>dynamic Korekcja tła jest obliczana automatycznie przy użyciu algorytmu matematycznego. Ta opcja nie wymaga żadnych dodatkowych ustawień.</p> <p>static Punkty korekcji tła są ustawiane ręcznie w widmie za pomocą kliknięcia myszą. Dla tej funkcji korekcji należy dodatkowo wybrać stopień wielomianu.</p> |
|  | <p>Ustawianie lub usuwanie punktów korekcji tła przy dostosowaniu statycznym</p> <p>Przy najechaniu myszą na wykres widma wyświetlany jest krzyżyk. Kliknięcie  otwiera listę funkcji:</p> <p>Set background correction points Kliknięciem myszy ustawia się punkty korekcji na żądaną długość fali na widmie. Przesunięcie myszy z wciśniętym przyciskiem nad jakimś obszarem powoduje zaznaczenie całego obszaru.</p> <p>Delete background correction points Kliknięcie wybranego już punktu usuwa odpowiadający mu punkt korekcji tła. Obszary można usuwać, przeciągając myszą.</p> <p>Delete all background correction points Usuwa wszystkie wybrane punkty</p> |
| BGC points Delete all | Usunięcie wszystkich ręcznie ustawionych punkty korekcji tła |
| Tabela | Wyświetlanie ręcznie ustawionych punktów korekcji tła |
| Polynomial deg. | Wybór stopnia wielomianu dla regresji krzywej korekcji tła W przypadku opcji auto regresja jest wybierana automatycznie. |
| Show Bg corrected spectra | Wyświetlanie widm z korekcją tła Dostosowane tło (zielona linia) jest odejmowane od widma próbki. Tło odpowiada zatem linii zerowej. |

Przejmowanie danych do metody

Przeniesienie ustawienia oceny piksu i korekcji tła wybranej linii do bieżącej metody pomiaru, klikając **Accept in method**. Dane są również zmieniane w oknie metody na karcie **Processing**.

Zobacz także



-  Usuwanie zakłóceń widmowych - okno Edit spectra | Spectral corrections [▶ 84]
-  Wyświetlanie widm - okno Edit spectra / Display [▶ 80]

6.12.3 Usuwanie zakłóceń widmowych - okno Edit spectra | Spectral corrections

W tej procedurze podejmowana jest próba wybrania do analizy w miarę możliwości takich linii, które są niezakłócone i/lub mają tło łatwe do skorygowania. Jeśli nie jest to możliwe, można użyć widm korekcyjnych w celu wyeliminowania zakłóceń nieciągłych,

np. spowodowanych nakładaniem się linii na jeden lub kilka elementów macierzy. Widma korekcyjne macierzy są podsumowane w modelu i można je następnie powiązać z linią w metodzie.

Funkcje zapisywania poszczególnych widm korekcyjnych i podsumowywania modelu korekcyjnego znajdują się w oknie **Edit spectra | Spectral corrections**.

| Opcja/przycisk | Opis |
|-------------------------|---|
| Save correction spectra | Zapisywanie widm czystych elementów macierzy jako widm korekcyjnych |
| Use correction model | Jeśli ta opcja jest aktywna, do analitu stosowany jest model korekcji |
| Correction model |  Zapisywanie bieżącego modelu korekcji  Wczytywanie istniejącego modelu korekcji |


W tabeli linii wymienione są analyty i widma korekcyjne użyte w modelu. Poszczególne widma są wyświetlane na grafice poprzez aktywację pól wyboru. Za pomocą **Add** do modelu korekcji dodawane są dodatkowe widma. Za pomocą **Delete** z modelu usuwane jest widmo zaznaczone myszą.

i WSKAZÓWKA! Wszystkie widma korekcyjne w tabeli linii są używane do obliczeń w modelu, niezależnie od tego, czy pole wyboru wyświetlania jest aktywne, czy nie. Jeśli widmo korekcyjne nie ma być uwzględniane, musi zostać usunięte.

6.12.3.1 Tworzenie modelu korekcji do korekcji widmowych

Aby utworzyć i używać modelu korekcji dla linii analizy, należy wykonać następujące czynności:

1. Identyfikacja możliwych interferencji.
2. Utworzenie i zapisanie widm korekcyjnych.

3. Utworzenie modelu korekcji.
 4. Przejście do metody parametrów linii analizy z modelem korekcji.
- Krok 1: Identyfikacja interferencji
- ▶ Utwórz metodę z linią analizy.
 - ▶ Zmierz analit w macierzy i załaduj widmo do okna **Edit spectra** (kliknij dwukrotnie wiersz próbki w oknie głównym).
 - ▶ Zidentyfikuj możliwe linie interferencji w oknie **Edit spectra | Line identification**.
- Krok 2: Pomiar i zapisanie widm korekcyjnych
- ▶ Dodaj do sekwencji pomiar zakłócających składników macierzy, które powodują nakładanie się widm, i zmierz te składniki w roztwór jednopierwiastkowych.
Uwaga:
Stężenia elementów macierzy nie muszą odpowiadać stężeniom w próbkach, lecz muszą być wystarczająco wysokie, aby widma wykazywały wyraźne wartości intensywności. Aby zapewnić prawidłową korekcję widmową, mierz zawsze tylko jeden składnik na raz jako czystą substancję.
 - ▶ Załaduj widmo elementu macierzy do okna **Edit spectra | Spectral corrections..**
 - ▶ Kliknij **Save correction spectra**.
 - ✓ Pojawia się okno bazy danych umożliwiające zapisanie widm korekcyjnych.
 - ▶ Przypisz nazwę i zakończ proces, klikając **Save**.
 - ▶ Zapisz w ten sposób widma pozostałych elementów macierzy.
- Krok 3: Tworzenie modelu korekcji
- ▶ Ponownie załaduj widmo analitu w macierzy.
 - ▶ Aktywuj pole wyboru **Use correction model**.
 - ▶ Kliknij **Add**, aby otworzyć wybór widm korekcyjnych, które zostały już zapisane.
 - ▶ Wybierz widmo korekcyjne z listy i kliknij **Load**.
 - ▶ Dodaj w ten sposób wszystkie widma korekcyjne.
 - ▶ Sprawdź w widoku widm, czy wynikowe widmo próbki nie jest wolne od nakładania się.
 - ▶ Przyciskiem **Mask** przy wciśniętym przycisku myszy można zamaskować obszary, które nie mają być używane do obliczania modelu korekcji.
Domyślnie jest już zamaskowany obszar linii analizy (± 9 pikseli). Maskowanie innych obszarów może być konieczne, jeśli do rejestracji nie były dostępne czyste substancje i te zanieczyszczenia mogą występować w zmiennych proporcjach.
 - ▶ Aby zapisać model korekcji, kliknij  i nadaj mu nazwę. Zakończ proces za pomocą **Save**.
- Krok 4: Przejście linii analizy z modelem korekcji do metody
- ▶ Przenieś parametry linii analizy z modelem korekcji do bieżącej metody za pomocą **Accept in method**.
 - ✓ W oknie **Method | Evaluation** linia analizy w kolumnie **Correction** jest oznaczona jako **LSM** (model najmniejszych kwadratów).
- Po zapisaniu metody przyszłe pomiary są przeprowadzane przy użyciu tej metody z utworzonym modelem korekcji. Pomiary, które zostały już wykonane, można przeliczyć za pomocą nowej wersji metody, nie jest więc konieczne powtarzanie pomiaru.
- Modele korekcji widmowej i widma korekcyjne są zapisywane wraz z danymi wyników. Jeśli dane wyników zostaną przesłane do innego komputera, na którym nie są zapisane modele korekcji, modele zostaną zaimportowane po zapytaniu.

6.12.3.2 Znajdowanie linii - okno Edit spectra | Line identification

W oknie **Edit spectra | Line identification** można zidentyfikować linie w mierzonych widmach na podstawie bazy danych linii.

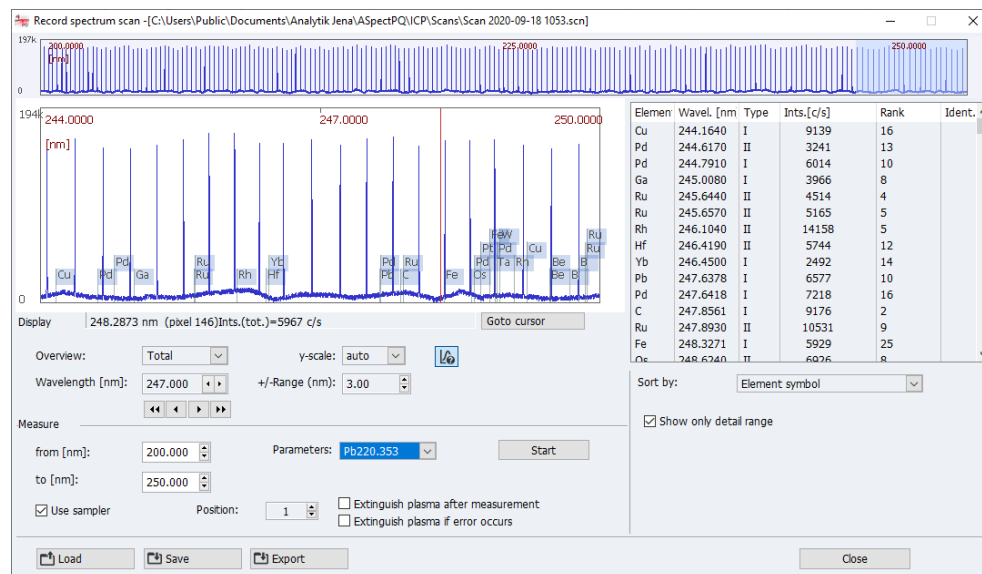


W tabeli pod widmem wyświetlane są wszystkie linie zidentyfikowane w odcinku widma.

- ▶ Aktywuj przycisk
- ▶ Kliknij interesujące piki w widmie
Najbliższa linia zostanie wyświetlona pod widmem i zaznaczona w tabeli.
- ▶ I odwrotnie, można również wybrać wiersz w tabeli, który zostanie następnie wyświetlony w widmie.

6.13 Rejestrowanie widma przeglądowego


Za pomocą pozycji menu **Method Development | Overview Scan** można zarejestrować widmo przeglądowe w określonym zakresie długości fal.



- ▶ Wybierz pozycję menu **Method Development | Overview Scan**.
- ▶ W obszarze **Measure** wprowadź żądany zakres długości fal (**from/to**).
- ▶ Jeśli została aktywowana metoda, można wybrać parametry linii metody dla skanu widma. Jeśli nie jest załadowana żadna metoda, używane są wstępnie ustawione parametry.
- ▶ Przygotuj próbkę. Aby pracować z autosamplerelem, aktywuj opcję **Use sampler** i wybierz pozycję próbki na autosamplerze.
- ▶ Rozpocznij skanowanie, klikając **Start**.
Po zakończeniu skanowania w górnej części okna wyświetlone zostanie widmo przeglądowe.
- ▶ Po kliknięciu odcinka w widmie przeglądu na wykresie zostanie wyświetlony szczegółowy obszar z wybraną linią. Ustaw szerokość szczegółowego obszaru na liście **+/- Range**.
- ▶ Znalezione linie są wyświetlane w tabeli po prawej stronie. Można ograniczyć widok do pokazanego zakresu widmowego za pomocą opcji **Show only detail range**.

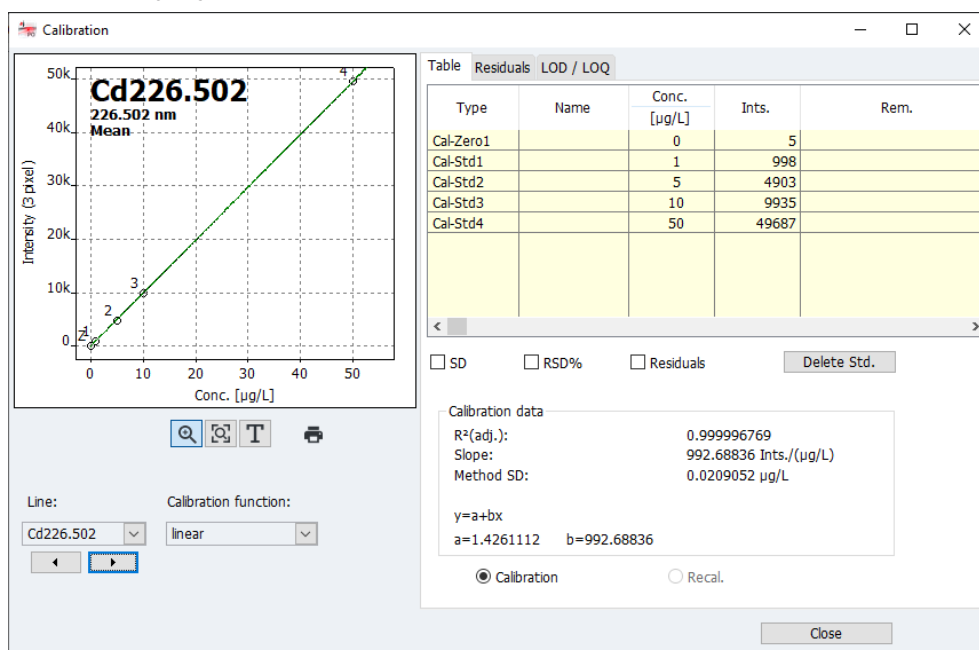
7 Kalibracja

Kalibracja odbywa się podczas pomiaru zgodnie z ustawieniami w sekwencji. Krzywe i funkcje kalibracji mogą być wyświetlane i edytowane po pomiarze.

- ▶ Otwórz okno **Calibration**, klikając  na pasku symboli.
Alternatywnie kliknij dwukrotnie jeden z wierszy sekwencji **Compute calib.** lub wybierz pozycję menu **Method Development | Calibration**.

Okno Calibration

W oknie **Calibration** wyświetlana jest krzywa kalibracji obliczona z uwzględnieniem parametrów krzywej.



Dla każdej linii analizy ustawionej w sekwencji okno zawiera następujące elementy:

- Widok graficzny krzywej kalibracji
- Tabela kalibracji
- Parametry
- Residua
- Granica wykrywalności i oznaczalności

Wybór linii

W polu listy **Line** można wybrać linię analizy do wyświetlenia kalibracji. Przyciskami strzałek pod listą można przechodzić między widokami poszczególnych linii.

Wybór funkcji kalibracji

Na liście **Calibration function** można wybierać możliwe obliczenia regresji krzywej kalibracji:

| Opcja kalibracji | Opis |
|------------------|---|
| linear | Liniowy postępowanie funkcji kalibracji $y = a + bx$ |
| nonlin. ratio. | Nieliniowy postępowanie funkcji kalibracji opisanej przez funkcję wymierną $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$ |
| nonlin. quadr. | Nieliniowy postępowanie funkcji kalibracji opisany przez funkcję kwadratową $y = a + bx + cx^2$ |

| Opcja kalibracji | Opis |
|------------------|---|
| automatically | Dla kalibracji obliczana jest funkcja liniowa i nieliniowa. Następnie przeprowadzany jest test Mandela, w którym porównywane są sumy kwadratów residuów. Jeśli suma dla funkcji nieliniowej jest znacznie niższa niż dla funkcji liniowej, wybierany jest nieliniowy postęp krzywej kalibracji, w przeciwnym razie używany jest liniowy postęp krzywej kalibracji. Funkcję nieliniową wybiera się w oknie Options Calibration . Domyślnym ustawieniem jest tutaj funkcja wymierna. |

Zobacz także

 Ustawienia ogólne kalibracji i korekty o wartość ślepej próby [▶ 134](#)

7.1 Widok krzywej kalibracji

Na widoku graficznym przedstawione są punkty pomiarowe, obliczona krzywa kalibracji i residua. Numery przy punktach pomiarowych odpowiadają numerom na karcie **Table**. Punkt zerowy kalibracji jest oznaczony jako Z (zero).

Kodowanie kolorami

Punkty pomiarowe są oznaczone w następujący sposób:

| Kolor | Znaczenie |
|------------|---|
| Czarny | Normalny punkt pomiarowy |
| Jasnoszary | Usunięty/wartości odstające (nieuwzględniony w obliczeniach) |
| Niebieski | Podejrzenie wartości odstającej (uwzględniony w obliczeniach) |



Również krzywe są oznaczone kolorami:

| Kolor krzywej | Znaczenie |
|---------------|---|
| Czarny | Krzywa kalibracji w prawidłowym zakresie kalibracji |
| Niebieski | Krzywa kalibracji poza prawidłowym zakresem kalibracji |
| Zielony | Dolna i górna granica zakresu prognozy w prawidłowym zakresie kalibracji |
| Jasnoszary | Dolna i górna granica zakresu prognozy poza prawidłowym zakresem kalibracji |

Uwaga dotycząca przedziału prognozy i przedziału ufności

Położenie pasma prognozy zależy od wybranej pewności statystycznej i jest miarą jakości kalibracji, od której ostatecznie zależy również pewność statystyczna pomiarów analizowanych próbek. Oprócz tego pasmo prognozy służy też do określania punktów kalibracji podejrzanych o wartości odstające. Pewność statystyczną wybiera się w oknie **Method | Statistics**. W oknie **Options | Calibration** można wybrać wyświetlanie pasma prognozy lub przedziału ufności.

Powiększanie krzywej kalibracji

Po kliknięciu  można powiększyć obszar graficzny, przytrzymując lewy przycisk myszy.  anuluje powiększenie.




Wstawianie notatki

Do wykresu można wstawić pole tekstowe na notatkę.

- ▶ Kliknij **T**.
- ▶ Przytrzymaj lewy przycisk myszy i rozciągnij ramkę pola tekstowego na wykresie.
- ▶ W otwartym oknie wprowadzania kliknij **Font**, aby wybrać czcionkę.
- ▶ Wpisz tekst i kliknij **OK**.
 - ✓ Tekst jest wyświetlany na wykresie.

Drukowanie krzywej kalibracji Krzywa kalibracji i dane kalibracji są drukowane po kliknięciu przycisku .

Zobacz także

-  Ustawienia ogólne kalibracji i korekty o wartość ślepej próby [▶ 134]
-  Definiowanie ocen statystycznych (okno Method | Statistics) [▶ 43]
-  Drukowanie wyników analiz [▶ 114]

7.2 Wyświetlanie wyników kalibracji

Wyniki kalibracji są wyświetlane po prawej stronie okna **Calibration** na 3 kartach.

Zobacz także

-  Ustawienia ogólne kalibracji i korekty o wartość ślepej próby [▶ 134]

7.2.1 Kalibracja - karta Table

W oknie **Calibration** na karcie **Table** wyświetlane są pary wartości wzorców (obliczone stężenie / zmierzona wartość).

Jeśli wzorce zostały zmierzone wiele razy i w metodzie zdefiniowano ocenę statystyczną, przez aktywację odpowiednich pól wyboru można wyświetlić odchylenie standardowe (SD) i względne odchylenie standardowe (RSD%) lub zakres (R) i względny zakres (R%).

Aby wykluczyć poszczególne wzorce kalibracyjne z obliczeń, należy zaznaczyć wzorzec w tabeli kliknięciem myszy, a następnie kliknąć **Delete Std..**

Zmierzona wartość nie zostaje trwale usunięta i może zostać ponownie aktywowana w dowolnym momencie.

Pod tabeli zmierzonych wartości wyświetlane są dane kalibracyjne, o ile są możliwe do sensownego obliczenia:

| Parametr | Znaczenie |
|-----------------------|---|
| R ² (adj.) | Współczynnik determinacji |
| Slope | Nachylenie funkcji kalibracji |
| Method SD | Odchylenie standardowe procedury |
| BEC | Wartość BEC (równoważne stężenie w tle) to stężenie analitu, które wytwarza intensywność równoważną tłu. Niższa wartość odpowiada tym samym wyższej czułości. |

7.2.2 Kalibracja - karta Residuals

W oknie **Calibration**, na wykresie a karcie **Residuals** przedstawione są odchylenia punktów kalibracji od obliczonej krzywej kalibracji i granice pasma prognozy.

7.2.3 Kalibracja - karta LOD/ LOQ

W oknie **Calibration**, na karcie **LOD/ LOQ** wyświetlane są granice wykrywalności i oznaczalności urządzenia ICP-OES. Są one obliczane na podstawie bieżących wyników kalibracji. Wartości dla metody wartości ślepej próby i metody krzywej kalibracji są wyświetlane w tym obszarze tylko wtedy, jeśli urządzenie zostało już skalibrowane.

| Parametr | Znaczenie |
|--------------------------------|--|
| Limit of detection | Masa (stężenie) analizowanego pierwiastka, którą można jeszcze wykryć z zadaną pewnością statystyczną. |
| Limit of quantification | Najmniejsza masa (stężenie) analizowanego pierwiastka, którą można jeszcze oznaczyć z zadaną pewnością statystyczną. |
| SD Blank (DL) | Tylko dla metody wartości ślepej próby Zmierzone odchylenie standardowe wartości ślepej próby (próbka IDL) |

Za pomocą **calculate** uruchamia się obliczanie granic wykrywalności i oznaczalności.

Metoda krzywej kalibracji

Do obliczania granicy wykrywalności i granicy oznaczalności przy użyciu metody krzywej kalibracji wymagana jest liniowa krzywa kalibracji. Kalibracja powinna się odbyć w dolnym zakresie stężeń. Parametry kalibracji istotne dla wyniku obliczeń:

- Liczba i położenie punktów kalibracji
- Liczba powtórnych pomiarów na wzorzec
- Jakość wyrównania
- Nachylenie krzywej kalibracji
- Względna pewność statystyczna (poziom prawdopodobieństwa)

Wartości z metody krzywej kalibracji można uznać za miarodajne tylko wtedy, gdy kalibracja została przeprowadzona w dolnym zakresie stężeń.

Metoda wartości ślepej próby

Odchylenie standardowe wartości ślepej próby jest wyznaczane w ramach pomiaru. W tym celu do sekwencji dodawany jest pomiar wartości ślepej próby (**QC blank DL**).

Dla metody wartości ślepej próby stosowana jest następująca reguła obliczeniowa:

- Wartość ślepej próby jest mierzona 11 razy.
- Na podstawie tych wartości wyznaczane jest bezwzględne odchylenie standardowe **SD** wartości ślepej próby.
- Do obliczania granicy wykrywalności i oznaczalności stosowane są następujące wzory:

Granica wykrywalności (**LOD**)

$$\text{LOD} = 3 * \text{SD} / (\text{nachylenie krzywej kalibracji})$$

Granica oznaczalności (**LOQ**)

$$\text{LOQ} = 9 * \text{SD} / (\text{nachylenie krzywej kalibracji})$$

Zobacz także

 Definiowanie pomiarów i działań w sekwencji [▶ 55]

7.2.4 Kalibracja - karta LOD/ LOQ

W oknie **Calibration**, na karcie **LOD/ LOQ** wyświetlane są granice wykrywalności i oznaczalności urządzenia ICP-OES. Są one obliczane na podstawie bieżących wyników kalibracji. Wartości dla metody wartości ślepej próby i metody krzywej kalibracji są wyświetlane w tym obszarze tylko wtedy, jeśli urządzenie zostało już skalibrowane.

| Parametr | Znaczenie |
|--------------------------------|--|
| Limit of detection | Masa (stężenie) analizowanego pierwiastka, którą można jeszcze wykryć z zadaną pewnością statystyczną. |
| Limit of quantification | Najmniejsza masa (stężenie) analizowanego pierwiastka, którą można jeszcze oznaczyć z zadaną pewnością statystyczną. |
| SD Blank (DL) | Tylko dla metody wartości ślepej próby Zmierzone odchylenie standardowe wartości ślepej próby (próbka IDL) |

Za pomocą **calculate** uruchamia się obliczanie granic wykrywalności i oznaczalności.

Metoda krzywej kalibracji

Do obliczania granicy wykrywalności i granicy oznaczalności przy użyciu metody krzywej kalibracji wymagana jest liniowa krzywa kalibracji. Kalibracja powinna się odbyć w dolnym zakresie stężeń. Parametry kalibracji istotne dla wyniku obliczeń:

- Liczba i położenie punktów kalibracji
- Liczba powtórnych pomiarów na wzorzec
- Jakość wyrównania
- Nachylenie krzywej kalibracji
- Względna pewność statystyczna (poziom prawdopodobieństwa)

Wartości z metody krzywej kalibracji można uznać za miarodajne tylko wtedy, gdy kalibracja została przeprowadzona w dolnym zakresie stężeń.

Metoda wartości ślepej próby

Odchylenie standardowe wartości ślepej próby jest wyznaczane w ramach pomiaru. W tym celu do sekwencji dodawany jest pomiar wartości ślepej próby (**QC blank DL**).

Dla metody wartości ślepej próby stosowana jest następująca reguła obliczeniowa:

- Wartość ślepej próby jest mierzona 11 razy.
- Na podstawie tych wartości wyznaczane jest bezwzględne odchylenie standardowe **SD** wartości ślepej próby.
- Do obliczania granicy wykrywalności i oznaczalności stosowane są następujące wzory:

Granica wykrywalności (**LOD**)

$$\text{LOD} = 3 * \text{SD} / (\text{nachylenie krzywej kalibracji})$$

Granica oznaczalności (**LOQ**)

$$\text{LOQ} = 9 * \text{SD} / (\text{nachylenie krzywej kalibracji})$$

Zobacz także

- 📖 Definiowanie pomiarów i działań w sekwencji [▶ 55]


7.3 Edycja krzywej kalibracji

Istniejącą krzywą kalibracji można edytować w oknie **Calibration** w następujący sposób:

- Zmiana używanej funkcji kalibracji
- Aktywacja/dezaktywacja wzorców
- Zastąpienie zmierzonego wzorca

Funkcję kalibracji można zmienić, wybierając nowy model w polu listy **Calibration function**.

Wzorzec można wykluczyć z obliczeń, wybierając go na karcie **Table**, a następnie naciskając **Delete Std.**. Zmierzona wartość nie zostaje trwale usunięta i może zostać ponownie aktywowana w dowolnym momencie.

Zmienione parametry kalibracji są stosowane do wyników podczas ponownego obliczania wyników. W tym celu wybierz pozycję menu **Routine | Reprocess results** lub kliknij  na pasku narzędzi.

Wzorzec może również zostać ponownie zmierzony, a wyniki ponownie obliczone.

Zobacz także

- 📖 Ponowne obliczenie wyników analizy [▶ 69]


8 Kontrola jakości

Kontrola jakości służy do monitorowania wyników pomiarów metody w dłuższym okresie czasu. W tym celu w metodzie zdefiniowane są specjalne próbki QC różnych typów, które są również przenoszone w sekwencji.

Ocena jest podawana na kartach kontroli jakości (kartach QC) i zapisywana wraz z metodą. Karty QC są dostępne przy każdym wywołaniu metody i są aktualizowane przy następnym uruchomieniu pomiaru.

Typ próbek QC i ich parametry ustawia się w oknie **Method | QCS**, a w sekwencji przenoszenie próbki QC.

Karty QC załadowanej (aktywnej) metody można zobaczyć w oknie **QC**. Definiuje się tam również parametry dotyczące zawartości i wyglądu kart QC.

- ▶ Otwórz okno **QC**, klikając  na pasku narzędzi lub wybierz pozycję menu **Method Development | QC**.

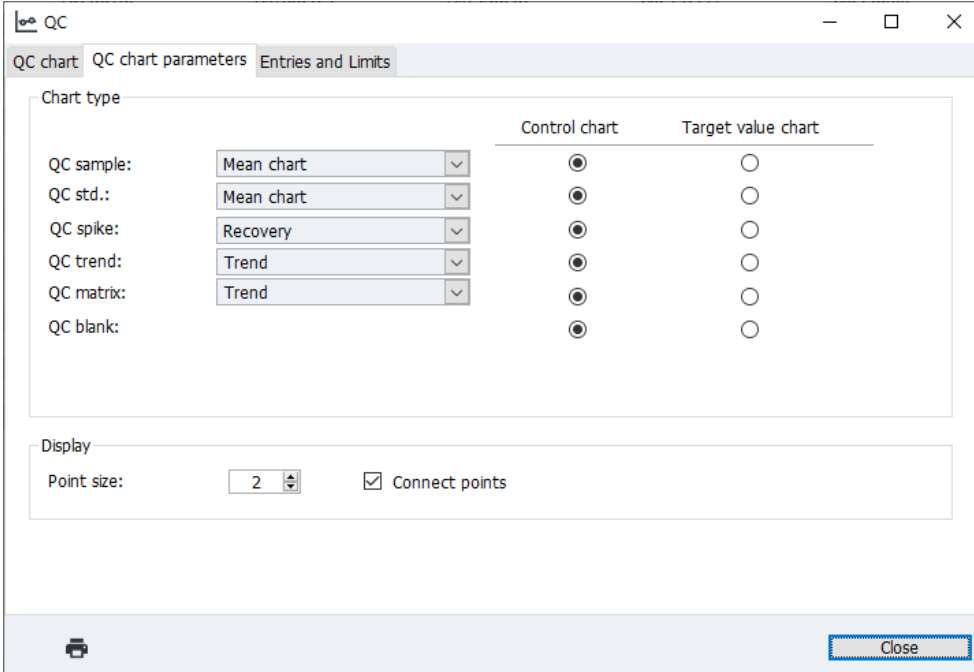
Zobacz także

- 📖 Definiowanie kontroli jakości (okno Method | QCS) [▶ 45]
- 📖 Definiowanie pomiarów i działań w sekwencji [▶ 55]

8.1 Parametry kart QC

Typ i sposób wyświetlania kart QC definiuje się w oknie **QC | QC chart parameters**.

Okno QC | QC chart parameters



| Chart type | Control chart | Target value chart |
|-----------------------|----------------------------------|-----------------------|
| QC sample: Mean chart | <input checked="" type="radio"/> | <input type="radio"/> |
| QC std.: Mean chart | <input checked="" type="radio"/> | <input type="radio"/> |
| QC spike: Recovery | <input checked="" type="radio"/> | <input type="radio"/> |
| QC trend: Trend | <input checked="" type="radio"/> | <input type="radio"/> |
| QC matrix: Trend | <input checked="" type="radio"/> | <input type="radio"/> |
| QC blank: Trend | <input checked="" type="radio"/> | <input type="radio"/> |

Display

Point size: 2 Connect points

Close

Typy próbek QC i oceny

Dla różnych typów próbek QC można wybrać następujące oceny:

| Typ próbki QC | Rodzaj oceny QC |
|---------------|---|
| QC sample | Mean chart |
| QC std. | Mean chart (norm.) - nie dla karty wartości docelowej |

| Typ próbki QC | Rodzaj oceny QC |
|---------------|--|
| | Recovery |
| QC spike | Recovery |
| QC trend | Trend |
| QC matrix | Ranges - nie dla karty wartości docelowej Precisions - nie dla karty wartości docelowej |
| QC blank | Brak możliwości wyboru. Wyświetlana jest intensywność wartości ślepej próby. |

W przypadku typu karty **Control chart** (karta regulacji procesu) parametry docelowe oraz granice kontrolne (K) i granice ostrzegawcze (W) są obliczane na podstawie średniej i rozrzutu wartości z poprzedniego okresu. W przypadku typu **Target value chart** wartości docelowe i granice wykluczenia są definiowane na podstawie podanych oczekiwanych wartości i granic próbek kontroli jakości.

Widok

Na potrzeby widoku graficznego można ustawić rozmiar punktów i połączenie punktów linią łamaną.

| Opcja | Opis |
|----------------|---|
| Point size | Poszczególne punkty są przedstawiane jako okręgi. Im wyższa wartość, tym większy okrąg. |
| Connect points | Łączenie punktów na wykresie linią łamaną. |

8.2 Wpisy i granice kart QC

Zawartość kart QC definiuje się w oknie **QC | Entries and Limits** i można ją dostosować do wymagań laboratorium w zakresie częstotliwości wpisów.

The screenshot shows the 'QC | Entries and Limits' dialog box. The 'Entries and Limits' tab is selected. The 'Entry scheme' is set to 'all values'. The 'Number prep. period' is set to 30. The 'Factor' is set to 1.00. The 'Update chart display' section has a dropdown menu set to 'Accept prep. period, delete remain' and a 'Process' button. A 'Close' button is at the bottom right.

| Opcja | Opis |
|---|--|
| Entry scheme | <p>all values Wprowadzanie każdej wykonanej kontroli QC.</p> <p>1 value/day Wprowadzanie tylko ostatniej kontroli QC w danym dniu.</p> <p>2 values/day Wprowadzanie tylko pierwszej i ostatniej kontroli QC w danym dniu.</p> <p>Uwaga „Dzień” odpowiada dniowi według zegara komputera, tzn. w ciągu dnia wcześniejszy wpis na karcie QC jest zastępowany nową wartością QC, zaś na początku nowego dnia tworzony jest nowy wpis.</p> |
| Number prep. period | <p>Dla Control chart: Poprzedni okres to liczba wpisów na karcie QC, które są używane do obliczania granic kontrolnych (K) i ostrzegawczych (W). Poprzedni okres zawiera zawsze starsze wpisy na karcie. Jeśli wartość wynosi 0 (brak poprzedniego okresu), wszystkie wprowadzone dane QC są używane do obliczenia granic kontroli i błędów.</p> |
| Exclusion limits for target value charts | <p>Tylko Target value chart: Granice wykluczenia są obliczane na podstawie granic zdefiniowanych dla próbek kontroli jakości pomnożonych przez Factor (ustawienie domyślne to 1).</p> |

Tworzenie nowych kart

Należy zdecydować, co ma się dzieć w przypadku (prawie) pełnych kart. W tym celu wybierz z listy jedną z opcji:

| Opcja | Opis |
|---|--|
| Accept prep. period, delete remain | <p>Dla Control chart: Poprzedni okres zostaje przejęty i stanowi poprzedni okres nowej karty.</p> |
| Last values -> new prep. period | <p>Dla Control chart: Ostatnie zmierzone wartości starej karty tworzą poprzedni okres nowej karty, wszystkie pozostałe wartości są usuwane z karty. Nowe zmierzone wartości są oceniane z nowo utworzonym poprzednim okresem.</p> |
| Delete all, new prep. period | <p>Wszystkie wartości zostają skasowane. Dla Control chart: Nowe zmierzone wartości wypełniają najpierw poprzedni okres.</p> |


Kliknięcie **Process** tworzy nowe karty QC zgodnie z opcją wybraną powyżej.

8.3 Wyświetlanie kart QC

Karty QC są wyświetlane w oknie **QC | QC chart**. Istnieje osobna karta dla każdego typu próbki QC ustawionej w metodzie i każdej uwzględnionej tam linii pierwiastka.

Opcje/wskazania

| Opcje/wskazania | Opis |
|-------------------------|--|
| Control sample | Wybierz typ próbki QC do wyświetlenia. |
| Line | Wybierz linię pierwiastka do wyświetlenia. |
| Displayed values | Liczba wyświetlonych wartości oraz data pierwszej i ostatniej wyświetlonej wartości |
| Saved values | Całkowita liczba wpisów na bieżącej karcie QC oraz data pierwszej i ostatniej wartości |

| Opcje/wskazania | Opis |
|---|--|
| x(min) / x(max) | Ustawienie wpisu początkowego i liczby wpisów, które mają być wyświetlane na wykresie. |
| y-scale | <p>Entries Maksimum osi y jest skalowane zgodnie z najwyższym wpisem.</p> <p>Control limits Maksimum osi y jest skalowane zgodnie z granicą kontrolną lub granicą wykluczenia.</p> |
|  | Drukowanie wykresu QC łącznie z danymi alfanumerycznymi i zmierzonymi wartościami. |

Obszar wykresu

| Kolor/znaczenie | Znaczenie |
|--------------------------|---|
| Żółty obszar | Tylko karta kontrolna: Poprzedni okres |
| Jasnoszara pozioma linia | Tylko karta kontrolna: Średnia obliczona z poprzedniego okresu Tylko karta wartości docelowych: Wartość docelowa |
| Czerwone poziome linie | Tylko karta kontrolna: Górna i dolna granica kontrolna (K) obliczona na podstawie poprzedniego okresu (3 sigma) Tylko karta wartości docelowej: Górna i dolna granica wykluczenia (AO, AU) zgodnie z granicami próbki kontroli jakości |
| Zielone poziome linie | Tylko karta kontrolna: Obliczone granice ostrzegawcze (W; 2 sigma) |
| Małe okręgi | Punkty pomiarowe (czarny: aktywny punkt pomiarowy; szary: nieaktywny punkt pomiarowy) |

Kliknięcie zmierzonej wartości na wykresie powoduje otwarcie okna z następującymi informacjami na temat tej zmierzonej wartości.

| Opcja | Opis |
|-------------------------------|--|
| Number | Numer zmierzonej wartości w serii QC |
| Value | Zmierzona wartość (przeliczona zgodnie z formatem wyświetlania karty QC) |
| Date / Time | Czas pomiaru |
| Operator | Użytkownik zalogowany w momencie pomiaru |
| Version | Wersja użytej metody |
| Delete entry / Activate entry | Oznaczanie zmierzonej wartości jako usuniętej lub ponowne aktywowanie |
| Add comment | Wpisywanie komentarza do punktu pomiarowego, np. powodu usunięcia |


9 Sterowanie urządzeniem i akcesoriami i monitorowanie ich

9.1 Spektrometr

Okno **Spectrometer** służy do sprawdzania funkcji spektrometru i ustawiania jego parametrów.

Następujące dane mogą być ustawiane lub sprawdzane:

- Dane urządzenia
- Parametry odczytane z czujnika
- Uruchamianie pomiarów w celu optymalizacji urządzenia

Okno **Spectrometer** można otworzyć, klikając  lub za pomocą pozycji menu **Method Development | Spectrometer**.

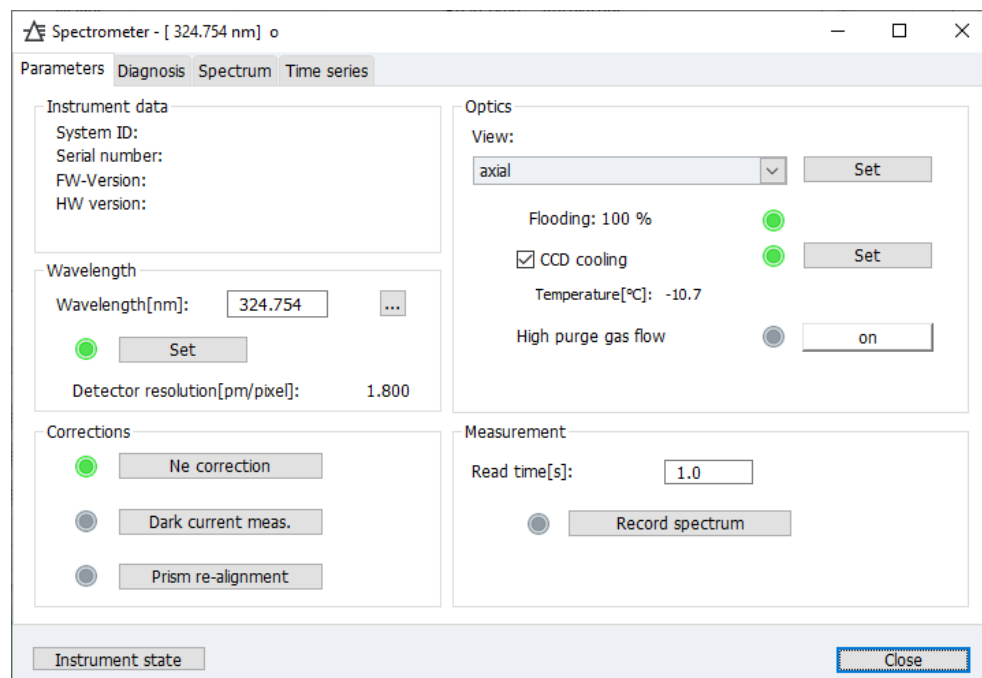
Kliknięcie **Instrument state** wyświetla grafikę urządzenia, na której wyświetlane są komunikaty z czujników bezpieczeństwa. Jeśli wystąpią problemy z plazmą, można tutaj zobaczyć komunikaty o błędach z czujników.

9.1.1 Ustawianie parametrów spektrometru i testowanie funkcji


Okno **Spectrometer | Parameters** zawiera następujące funkcje:

- Kontrola podstawowych funkcji urządzenia
- Uruchamianie automatycznych korekt systemu optycznego
- Uruchamianie pomiaru testowego przy wybranej długości fali

Elementy okna Spectrometer | Parameters



| Parametr | Opis |
|------------------------|---|
| Instrument data | W grupie Instrument data wyświetlane są różne numery usług i wersji, które są wymagane do serwisowania urządzenia. |



| Parametr | Opis |
|----------------------------|---|
| Wavelength | W polu Wavelength wyświetlana jest wybrana długość fali. Długość fali można ustawić po kliknięciu  w oknie Select element/line . Kliknięcie Set przemieszcza spektrometr na wybraną długość fali. |
| Ne correction | Przeprowadzanie kalibracji długości fali detektora |
| Dark current meas. | Korekcja sygnału ciemności |
| Prism re-alignment | Optymalizacja obrazu rzędu dyspersji na detektorze poprzez regulację pryzmatu (regulacja do maksimum energii). |
| View | Wybór kierunku obserwacji plazmy w polu listy (axial - z góry, radial - z boku). |
| CCD cooling | Jeśli pole wyboru jest zaznaczone, za pomocą Set można rozpocząć chłodzenie detektora CCD. Chłodzenie zostaje zatrzymane przy dezaktywacji pola wyboru. Chłodzenie CCD jest uruchamiane automatycznie po zapłonie plazmy. Sterowanie ręczne jest konieczne tylko w wyjątkowych przypadkach, np. po wystąpieniu komunikatu o błędzie podczas automatycznego uruchamiania. W polu Operating temperature wyświetlana jest bieżąca temperatura detektora CCD. |
| High purge gas flow | Płukanie spektrometru ze zwiększonym przepływem argonu |
| Measurement | Aby rozpocząć pomiar przy wybranej długości fali, w punkcie Measurement należy wprowadzić całkowity czas pomiaru. Kliknięcie Record spectrum uruchamia pomiar. Do pomiaru używane są domyślne ustawienia plazmy. Próbka musi być doprowadzana ręcznie. Autosampler nie jest używany. |

Pomiar pików widma w wybranej linii analizy

Pomiar testowy wybranej linii analizy uruchamia się w oknie **Spectrometer | Parameters**.

- ▶ Zapal plazmę.
- ▶ W obszarze **Wavelength** za pomocą  otwórz okno **Select element/line** i ustaw żądaną linię.
Alternatywnie wprowadź wartość bezpośrednio w polu wprowadzania **Wavelength**.
- ▶ Za pomocą **Set** przemieść spektrometr na żądaną długość fali.
Po pomyślnym zakończeniu ustawiania znacznik obok ustawienia będzie zielony.
- ▶ Rozpocznij pomiar prądu ciemnego za pomocą **Dark current meas.**
- ▶ Dla kolejnego pomiaru wybierz kierunek obserwacji **axial** lub **radial**.
- ▶ Ustaw **Read time**.
- ▶ Przygotuj próbkę i zanurz w niej wąż ssawny.
- ▶ Poczekaj przez odpowiedni czas, aż próbka zostanie stabilnie rozpylona. Rozpocznij pomiar za pomocą **Record spectrum**.
 - ✓ Następuje pomiar i jego wyniki są wyświetlane w oknie **Edit spectra**.

Zobacz także

-  Wstawianie linii analizy do tabeli linii [▶ 27]
-  Wyświetlanie i edycja widm intensywności [▶ 79]

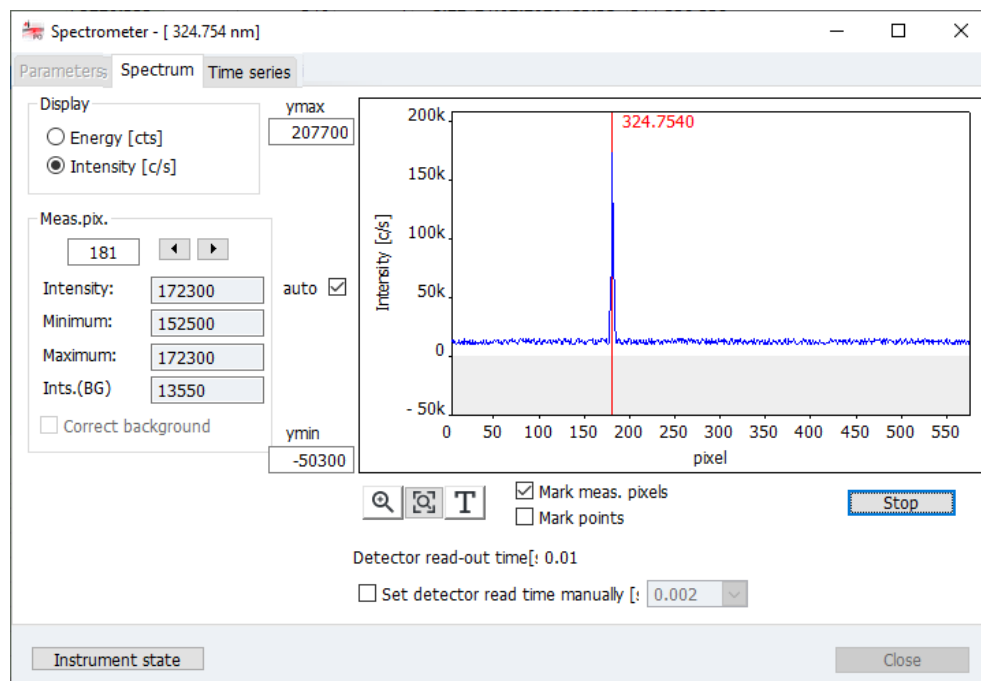
9.1.2 Diagnostyka parametrów urządzenia

W oknie **Spectrometer | Diagnosis** wyświetlane są parametry istotne dla serwisu.



9.1.3 Wykonywanie ciągłego pomiaru piksu

W oknie **Spectrometer | Spectrum** uruchamia się ciągły pomiar przy określonej długości fali. Pomiar ciągły są wykorzystywane do optymalizacji urządzenia podczas serwisowania.

Widok graficzny i cyfrowa ocena



| Opcja | Opis |
|--|---|
| Display | <p>Opcje wyświetlania widma:</p> <p>Energy Wyświetlanie widma energii, jednostka miary: cts (zliczenia) Aby uzyskać wyniki pomiarów z jak najmniejszym szumem, czasy całkowania dla detektora są tak dobrane, aby maksimum energii znajdowało się przy ok. 30000 cts.</p> <p>Intensity Widok energii na jednostkę czasu, jednostka miary: cts/s (zliczenia na sekundę) Na podstawie intensywności można porównywać różne piksy niezależnie od czasu całkowania.</p> |
| Meas.pix. | <p>Wybór piksela, którego wartości są na bieżąco wyświetlane w polu Energy lub Intensity. W polach Maximum i Minimum wyświetlane są odpowiednie wyniki pomiaru ciągłego.</p> |
| Mark meas. pixels | Zaznaczanie ustawionego piksela pomiarowego pionową czerwoną linią na wykresie |
| Mark points | Zaznaczanie kropką na wykresie zmierzonych wartości dla każdego piksela |
| Set detector read time manually | <p>Wybór z pola listy czasu odczytu dla detektora CCD Dłuższe czasy odczytu prowadzą do wyższych wartości energii.</p> |

| Opcja | Opis |
|--------------------|--|
| | Ustawienie wstępne czasu odczytu detektora CCD jest to 0,01 s. |
| Skalowanie wykresu | Wprowadź wartości dla punktu początkowego i końcowego rzędnej bezpośrednio w polach wprowadzania przy osiach. Alternatywnie po aktywacji trybu powiększenia  wybierz obszar do wyświetlenia, trzymając wciśnięty lewy przycisk myszy. Cofnij skalowanie, aktywując opcję auto lub klikając  . |

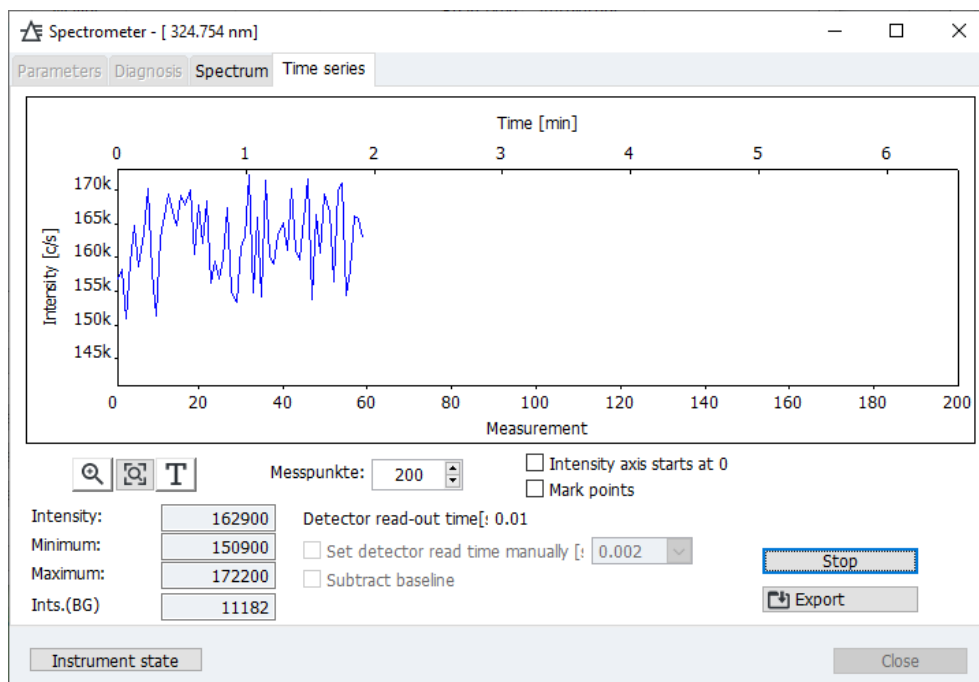
Uruchamianie pomiaru pików

- ▶ W oknie **Spectrometer | Parameters** ustaw długość fali i kierunek obserwacji.
- ▶ Przejdź do karty **Spectrum**.
- ▶ Uruchom pomiar ciągły, klikając **Start**.

Zmierzone wartości są rejestrowane z ustawionymi parametrami i powtarzane w sposób ciągły do momentu naciśnięcia **Stop**.



9.1.4 Rejestrowanie krzywej sygnału

W oknie **Spectrometer | Time series** rejestruje się krzywą sygnału intensywności dla długości fali aktualnie ustawionej w spektrometrze w wybranej liczbie punktów pomiarowych.



Oprócz widoku graficznego wyświetlane są cyfrowe wartości aktualnej intensywności, osiągnięta intensywność maksymalna i minimalna oraz intensywność tła.


Można ustawić następujące parametry rejestrowania krzywej sygnału:

| Opcja | Opis |
|----------------------------|--|
| Scaling | Po aktywacji trybu powiększenia  wybór obszaru do wyświetlenia przy wciśniętym lewym przycisku myszy Cofnięcie skalowania przez kliknięcie  . |
| Intensity axis starts at 0 | Skalowanie osi y nie jest ustawiane automatycznie, lecz zaczyna się ona od „0” |
| Messpunkte | Wybór liczbę punktów pomiarowych z listy |

| Opcja | Opis |
|---------------------------------|--|
| Mark points | Zaznaczanie punktów pomiarowych kropką na wykresie |
| Set detector read time manually | Wybór czasu odczytu detektora CCD z pola listy |
| Subtract baseline | Wyświetlanie wartości intensywności z korekcją tła |

9.2 Plazma

Okno **Plasma** zawiera następujące funkcje:

- Zapalanie/gaszenie plazmy
 - Kontrola generatora HF
 - Ustawianie przepływu gazu
 - Kontrola pompy analizatora
 - Regulacja transferowego układu optycznego
 - Automatyczna optymalizacja przepływu gazu rozpylającego i mocy plazmy
- Otwórz okno **Plasma**, klikając  na pasku narzędzi lub wybierz pozycję menu **Method Development | Plasma**.

Za pomocą **Instrument state** wyświetlana jest grafika urządzenia, na której wyświetlane są komunikaty z czujników bezpieczeństwa urządzenia ICP-OES. Jeśli wystąpią problemy z plazmą, można tutaj zobaczyć komunikaty o błędach z czujników.

9.2.1 Zapłon plazmy i ustawienie warunków plazmy

W oknie **Plasma | Control** zapala i gasi się plazmę oraz ustawia przepływy gazu w urządzeniu.

Funkcje w oknie Plasma | Control

| Opcja | Opis |
|-------------------------------------|--|
| Plasma conditions | Wybór warunków plazmy (moc plazmy i przepływ gazu). |
| Ignite plasma/ Extinguish plasma | Zapalanie i gaszenie plazmy, gdy urządzenie ICP-OES jest przygotowane. |

| Opcja | Opis |
|----------------------------|---|
| RF generator | Ustawianie użytecznej mocy plazmy. Moc plazmy definiuje temperaturę plazmy. Za pomocą oprogramowania układowego urządzenia prąd generatora regulowany jest w taki sposób, aby uzyskać użyteczną moc plazmy. |
| Gas flows | Włączanie i ustawianie przepływu gazu. Plasma gas Gaz plazmowy przepływa wzdłuż rurki zewnętrznej i służy do wytwarzania plazmy. Nebulizer gas Gaz rozpylający rozpyla próbkę i przenosi próbkę w aerozolu do plazmy. Jest on podłączony do rozpylacza. Wartość procentowa w wierszu gazu rozpylającego informuje o stopniu przepuszczalności/czystości rozpylacza (patrz poniżej) Aux. gas Gaz pomocniczy odpycha plazmę od wtryskiwacza i przepływa między rurką wewnętrzną a wtryskiwaczem. Cone gas Gaz stożkowy usuwa „zimny” ogon plazmy, aby wyeliminować zakłócenia spowodowane rekombinacją plazmy w osiowym kierunku obserwacji. Jednocześnie gaz stożkowy wspomaga chłodzenie stożka. Oxygen Tlen może być dodawany do gazu rozpylającego jako dodatkowy gaz do wybranych zastosowań. Przepływ tlenu należy aktywować za pomocą pola wyboru przed ustawieniem gazu, zanim będzie można go zmienić. |
| Shut off gas flows | Zamknięcie wszystkich zaworów gazowych. |
| Purge spray chamber | Gaz rozpylający jest włączany na 1 minutę w celu usunięcia powietrza z komory rozpylania. Ułatwia to zapłon plazmy po przerwie w działaniu. W tym czasie wyświetlane jest odliczanie. |
| Suction power | Obwód bezpieczeństwa sprawdza, czy moc podłączonego wyciągu jest wystarczająca do działania urządzenia ICP-OES. Jeśli tak jest, lampka kontrolna świeci się na zielono. |

Przyciskami **Set** ustawić się zmienione parametry (moc plazmy i przepływ gazu) na urządzeniu ICP-OES.

Ocena działania rozpylacza

Rozpylacz musi zostać wyczyszczony, jeśli zatka się cząstkami próbki lub z powodu wysokiego stężenia soli w próbce. Oznaką zatkania rozpylacza jest zwiększone ciśnienie gazu rozpylającego.

Porównaj bieżącą wartość procentową (ciśnienie) parametru **Nebulizer gas** z wartością uzyskaną po montażu nowego lub wyczyszczonego rozpylacza.

Wyczyść rozpylacz zgodnie z opisem w instrukcji obsługi urządzenia ICP-OES, jeśli wartość procentowa gwałtownie wzrosła (o ponad połowę wartości początkowej), a najpóźniej do wartości 75%.

Wybór warunków plazmy

Lista **Plasma conditions** zawiera zapisane parametry plazmy dla różnych macierzy próbek oraz, jeśli załadowana jest metoda, parametry specyficzne dla linii metody.

Kliknięcie **...** otwiera menu kontekstowe z funkcjami zarządzania parametrami wybranymi na liście:

| Funkcja | Opis |
|--------------------------------|--|
| Save current plasma parameters | Zapisywanie ustawionych warunków plazmy (mocy plazmy i przepływu gazu) i dodawanie ich do listy |
| Delete entry | Usuwanie wybranego wpisu Nie można usunąć ustawień wstępnych Standard, Kerosine i Hydride technique . |
| Set plasma conditions | Ustawianie parametrów plazmy wybranego wpisu w urządzeniu ICP-OES |
| Copy to method line | Dostępne, jeśli na liście wybrany jest wiersz metody Przenosi warunki plazmy do parametrów metody wybranej linii. |
| Copy to all method lines | Dostępne, jeśli na liście wybrany jest wiersz metody Przenosi warunki plazmy do parametrów metody wszystkich linii. |
| Set as method defaults | Zapisanie bieżących warunków plazmy jako wartości domyślnych dla nowych linii wstawianych do metody (nie dotyczy ulubionych linii) |

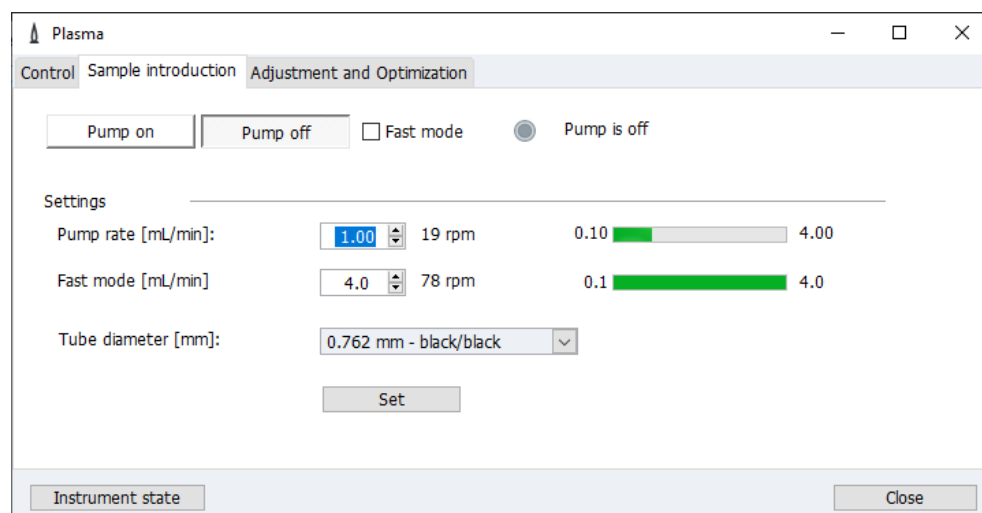
Zobacz także

 Włączanie spektrometru i zapalanie plazmy [▶ 63]

9.2.2 Kontrola doprowadzania próbki przez pompę

W oknie **Plasma | Sample introduction** kontroluje się działanie pompy perystaltycznej w urządzeniu ICP-OES.

Funkcje w oknie Plasma | Sample introduction



| Funkcja / parametr | Opis |
|---------------------------------|--|
| Pump on/ Pump off | Włączanie i wyłączanie pompy. W stanie podstawowym po włączeniu urządzenia ICP-OES pompa jest włączona. |
| Fast mode | Przełączanie pompy ręcznie na szybkie działanie Funkcja ta może być używana do ręcznego przepłukiwania systemu doprowadzania próbek. Po przepłukaniu pole wyboru musi zostać dezaktywowane, aby przełączyć pompę z powrotem na transport próbek. |
| Pump is running/ Pump is off | Status pompy Bieżąca prędkość pompy jest wyświetlana w obrotach na minutę. |
| Pump rate | Ustawianie wydajności pompy do transportu próbki podczas pomiaru |
| Fast mode | Ustawienie wydajności pompy dla szybkiego działania |

| Funkcja / parametr | Opis |
|--------------------|--|
| | Szybkie działanie optymalizuje czas transportu podczas zmiany próbki lub czas transportu roztworu płuczącego do rozpylacza. |
| Tube diameter | Wybór używanego typu węża Na podstawie informacji o prędkości pompy i średnicy rurki obliczana jest ilość transportowanej próbki (wydajność pompy). Węże są oznaczone kolorowymi stoperami. Wybierz z listy kombinację stoperów używanego węża. |
| Set | Zastosowanie ustawień |

9.2.3 Regulacja i optymalizacja plazmy

W oknie **Plasma | Adjustment and Optimization** dokonuje się następujących regulacji:

- Wyrównanie transferowego układu optycznego względem osi optycznych spektrometru
- Obliczanie wartości przesunięcia transferowego układu optycznego dla linii analitycznej z metody
- Optymalizacja mocy plazmy i przepływu gazu rozpylającego

Dostępne są dwie metody regulacji i optymalizacji, które można wybrać, klikając **Parameters**:

| Metoda | Opis |
|----------------------|---|
| Grid search | Obszar jest skanowany zgodnie z siatką. Spośród liczby punktów pomiarowych określany jest ten o najwyższej intensywności. Regulacja jest dokładna, ale zajmuje dużo czasu ze względu na dużą liczbę punktów pomiarowych. |
| Simplex optimization | Energia maksymalna jest wyznaczana iteracyjnie. Zaczynając od początkowego punktu pomiarowego określany jest punkt pomiarowy o najwyższej wartości. Począwszy od tego punktu pomiarowego określany jest punkt pomiarowy o najwyższej energii. Proces ten jest kontynuowany do momentu znalezienia maksimum energii. |

| Metoda | Opis |
|--------|--|
| | <p>Metoda ta jest szybsza niż wyszukiwanie siatkowe, ale nieco mniej niezawodna. W różnych gorących strefach plazmy może występować kilka maksimum energii, a zatem jeśli punkt początkowy jest niekorzystny, można znaleźć niewłaściwe maksimum energii.</p> <p>W przypadku metody sympleks należy określić wartość Stopping criterion jako wartość procentową. Jeśli 3 kolejne wartości nie różnią się od siebie o więcej niż ten procent, regulacja zostaje zakończona.</p> <p>Jeśli aktywna jest opcja Start with optimized values zoptymalizowane parametry ostatniej regulacji/optimalizacji są używane jako wartości początkowe dla bieżącej optymalizacji.</p> |

Intensywność sygnału jest wykorzystywana jako kryterium regulacji transferowego układu optycznego (urządzenia).

Kryterium optymalizacji jest ustawiane automatycznie w zależności od długości fali linii analizy, ale można je zmienić ręcznie:

| Kryterium | Zakres długości fali linii analizy |
|----------------------------------|------------------------------------|
| Signal intensity | < 200 nm |
| Signal/background | 200 do 350 nm |
| Signal/square root of background | > 350 nm |

Regulacja transferowego układu optycznego względem osi optycznych (środku plazmy)

Transferowy układ optyczny jest dostosowywany do osi optycznych przy użyciu roztworu Mn. Przygotuj na potrzeby regulacji roztwory Mn o następującym stężeniu:

| Kierunek obserwacji | Roztwór Mn |
|---------------------|------------|
| axial | 1 mg/L |
| radial | 10 mg/L |

- ▶ Aktywuj opcję **Adjust transferoptics (instrument)**.
 - ✓ Linia analizy Mn jest automatycznie ustawiana na liście **Line**.
- ▶ W punkcie **Parameters** wybierz procedurę regulacji (patrz wyżej).
- ▶ Wybierz kierunek obserwacji:

| Opcja | Opis |
|-------------------|--|
| axial | Obserwacja z góry |
| radial | Obserwacja z boku |
| attenuated axial | Obserwacja tłumionej energii z góry |
| attenuated radial | Obserwacja tłumionej energii z boku |
| closed | Obserwacja przy zamkniętej przysłonie (do celów serwisowych) |

- ▶ Zanurz wąż ssawny w próbce. W przypadku korzystania z autosamplera ustaw pozycję na statywie na próbki.
- ▶ Kliknij **Start**.
 - ✓ Transferowy układ optyczny jest regulowany automatycznie. Na końcu regulacji wyświetlane są nowe dane.
- ▶ Przejmij nowe wartości regulacji, klikając **OK**.

Optymalizacja pozycji obserwacji dla linii analizy aktywnej metody

Plazma ma różne gorące strefy. Podczas tej optymalizacji określany jest punkt obserwacji w plazmie, w którym analit wykazuje najwyższą intensywność sygnału. Wartości są zapisywane w metodzie jako **Offset**.

- ▶ Wybierz z listy **Line** linię analizy z metody.
- ▶ Aktywuj opcję **Optimize plasma view position**. Informacja o kierunku obserwacji jest automatycznie przejmowana z metody i ustawiane jest kryterium optymalizacji (patrz wyżej).
- ▶ Po kliknięciu **Parameters** wybierz metodę regulacji (patrz wyżej).
- ▶ Zanurz wąż ssawny w próbce. W przypadku korzystania z autosamplera ustaw pozycję na statywie na próbki.
- ▶ Kliknij **Start**.
 - ✓ Pozycja obserwacji jest optymalizowana automatycznie. Na końcu wyświetlane są zoptymalizowane wartości przesunięcia.
- ▶ Przejmij nowe wartości przesunięcia do metody, klikając **OK**.

Optymalizacja warunków plazmy dla próbki

Po określeniu pozycji obserwacji analitów w próbce można zoptymalizować warunki plazmy (moc plazmy i przepływ gazu rozpylającego).

- ▶ Aktywuj opcję **Optimize plasma power and nebulizer gas flow**.
- ▶ Wybierz z listy **Line** linię analizy z metody.
 - ✓ Automatycznie z metody przejmowane są dotychczasowe warunki plazmy i ustawiane jest kryterium optymalizacji (patrz wyżej).
- ▶ W punkcie **Set** wybierz procedurę regulacji (patrz wyżej).
- ▶ Zanurz wąż ssawny w próbce. W przypadku korzystania z autosamplera ustaw pozycję na statywie na próbki.
- ▶ Kliknij **Start**.
 - ✓ Moc plazmy i przepływ gazu rozpylającego są optymalizowane automatycznie. Na końcu wyświetlane są zoptymalizowane wartości.
- ▶ Przejmij nowe wartości do metody, klikając **OK**.


9.3 Autosampler

Autosampler jest akcesorium opcjonalnym. Autosampler jest wykrywany podczas inicjalizacji w oknie **Quick Start** po uruchomieniu programu ASpect PQ.

Okno **Autosampler** zawiera następujące funkcje:

- Wyświetlanie typu podłączonego autosamplera
- Konfiguracja autosamplera
- Regulacja autosamplera
- Dodatkowe płukanie ścieżek próbki
- Ponowna inicjalizacja autosamplera
- Przeprowadzanie autotestu

Parametry bezpośrednio dotyczące analizy (miejsca na statywach na próbki i etapy płukania) definiuje się w metodzie, sekwencji i danych identyfikacyjnych próbki (identyfikator próbki).

Okno **Autosampler** otwiera się, klikając  na pasku symboli lub za pomocą pozycji menu **Method Development | Autosampler**.

Inicjalizacja autosamplera

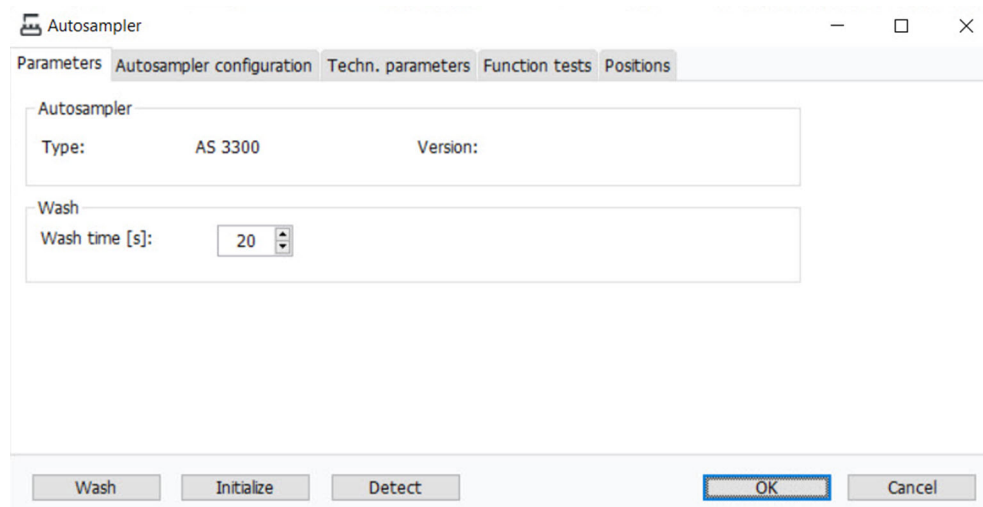
Autosampler jest zawsze inicjowany przy włączeniu przełącznika zasilania. Ponowna inicjalizacja może być konieczna, jeśli autosampler stracił orientację, np. w wyniku uderzenia mechanicznego. Powoduje ona przywrócenie połączenia między autosamplerelem, urządzeniem ICP-OES i komputerem.

- ▶ Kliknij **Initialize**, aby ponownie zainicjować autosampler bez ponownego uruchamiania programu ASpect PQ.
- Rozpoznawanie autosamplera
- Jeśli autosampler został włączony dopiero po uruchomieniu ASpect PQ, stosowanie autosamplera musi zostać zarejestrowane w programie.
- ▶ W tym celu kliknij **Detect**, a następnie **Initialize**.
- Wskazówka:** Jeśli stosowany jest Cetac ASX-560 z układem rozcieńczania, przycisk **Detect** nie jest wyświetlany.
- Płukanie ścieżek próbki
- ▶ W oknie **Autosampler | Parameters** ustaw wartość **Wash time**. Domyślne ustawienie czasu płukania jest przejmowane z bieżącej metody.
 - ▶ Kliknij **Wash**. Alternatywnie wybierz pozycję menu **Routine | Wash**.
 - ✓ Ścieżki próbki (węże-rozpylacz-komora rozpylania-palnik) są płukane przez określony czas płukania przez pompę pracującą w trybie szybkiego działania.

9.3.1 Wyświetlanie podłączonego autosamplera

W oknie **Autosampler | Parameters** wyświetlane lub konfigurowane są następujące parametry:

- Typ autosamplera
- Parametry płukania



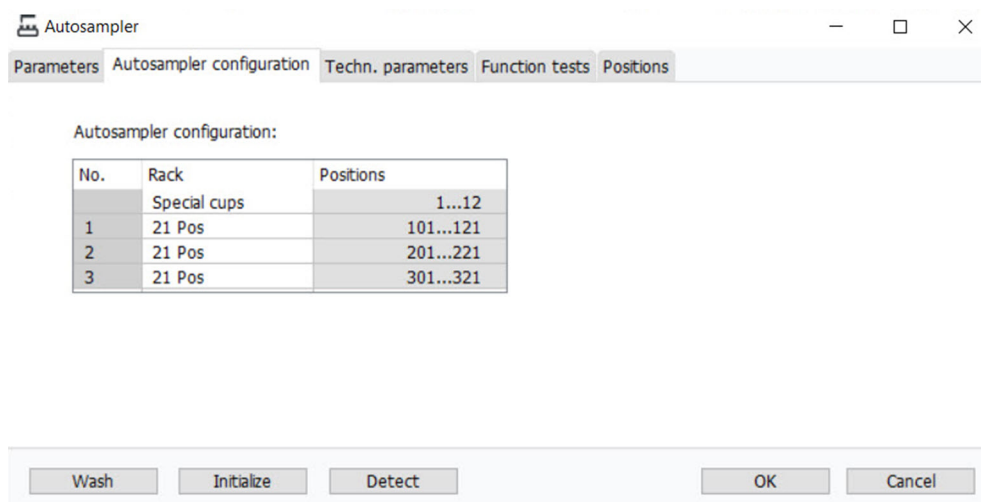
- Typ autosamplera
- W oknie **Autosampler | Parameters** wyświetlany jest typ autosamplera wykryty podczas inicjalizacji oraz wersja oprogramowania sprzętowego samplera.
- Parametry płukania
- Czas płukania systemu ścieżki próbki od pojemnika z próbką do palnika jest przejmowany z bieżącej metody. Zmiany w oknie **Autosampler | Parameters** nie mają jednak wpływu na wpisy w metodzie. Podczas płukania systemu przy użyciu autosamplera roztwór płuczący jest pobierany z naczynia do płukania autosamplera.

Zobacz także

- 📄 Definiowanie doprowadzania próbki (okno Method | Sample delivery) [▶ 33]

9.3.2 Konfiguracja statywu autosamplera

W oknie **Autosampler | Autosampler configuration** ustawia się statywy na próbki używane w autosamplerze.

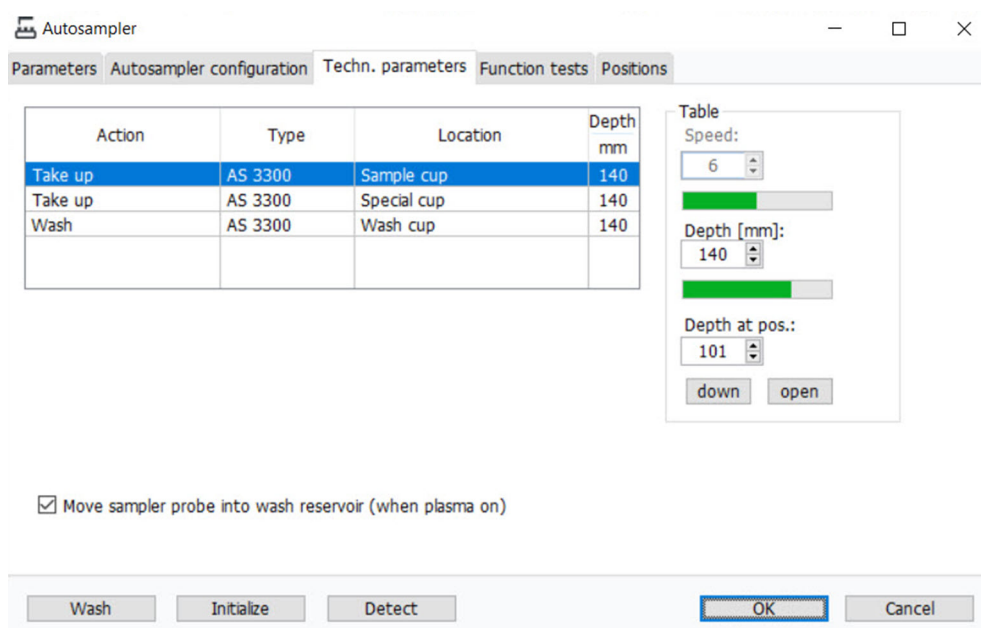


W zależności od używanego autosamplera można ustawić różne statywy na próbki i statywy z próbkami specjalnymi.

Statywy na próbki wybiera się w tabeli. Trzycyfrowe numery służą jako numery pozycji dla zmiennych statywów na próbki. Pierwsza cyfra wskazuje położenie statywu na próbki na autosamplerze, a dwie pozostałe pozycję na statywie na próbki. Na przykład numer 113 oznacza pozycję 13 na statywie na próbki 1. Zmienny statyw na próbki 1 znajduje się na autosamplerze przed naczyniem do płukania, a za nim znajdują się statywy na próbki 2 i 3.

9.3.3 Parametry techniczne autosamplera

W oknie **Autosampler | Techn. parameters** definiuje się głębokość zanurzenia kaniuli w różnych naczyniach.



Następujące działania są brane pod uwagę dla poszczególnych typów naczyń:

| Naczynie | Działanie |
|--------------|---|
| Sample cups | Zasysanie próbek przez pompę perystaltyczną. |
| Special cups | Zasysanie próbek specjalnych za pomocą pompy perystaltycznej. |
| Wash cup | Płukanie kaniuli i ścieżki zasysania. |

Elementy tabeli działań

| Opcja | Opis |
|----------|---|
| Action | Możliwe działania: Take up Pobranie próbki z naczynia w celu przetransportowania do palnika. Wash Pobranie roztworu płuczającego. |
| Type | Podłączony typ autosamplera |
| Location | Naczynie, którego dotyczy działanie |
| Depth | Głębokość zanurzenia kaniuli w mm |

Obszar tabeli

Za pomocą elementów sterujących w obszarze **Table** można zmienić parametry wybranego wiersza tabeli.

| Opcja | Opis |
|---------------|---|
| Depth | Ustawianie głębokości zanurzenia kaniuli. Głębokość zanurzenia jest mierzona od najwyższego położenia ramienia autosamplera. |
| Depth at pos. | Położenie naczynia z próbką lub naczynia specjalnego, w którym sprawdzana jest głębokość zanurzenia. |
| Set | Gdy ta opcja jest aktywna, ramię autosamplera przesuwa się nad naczynie, względem którego ma zostać zmienione położenie. W przypadku naczyń z próbkami i naczyń specjalnych jest to pozycja próbki ustawiona w Depth at pos. Jeśli ta opcja nie jest aktywna, głębokość zanurzenia i prędkość są zmieniane bez konieczności przesuwania ramienia autosamplera nad naczynie. |

Dalsze opcje

Jeśli opcja **Move sampler probe into wash reservoir (when plasma on)** jest aktywna, po zamknięciu okna kaniula jest automatycznie zanurzana w naczyniu do płukania.

Tylko ASX-560: Ustawianie prędkości pompy płuczającej (stopnie: 0...99). Za pomocą **Set** ta wartość zostaje na stałe zapisana w autosamplerze.

9.3.4 Testowanie funkcji autosamplera

W oknie **Autosampler | Function tests** można sprawdzić, czy autosampler jest gotowy do pracy.

Okno Autosampler | Function tests

The screenshot shows the 'Autosampler' window with the 'Function tests' tab selected. The 'System status' section shows 'Autosampler is ready' with a green indicator and a 'Refresh' button. The 'Positions' section has 'Cup no' set to 1 and 'Wash position' selected. The 'Sampler arm' section shows 'Depth [mm]' set to 0. There are checkboxes for 'Wash pump' (unchecked) and 'Move sampler probe into wash reservoir (when plasma on)' (checked). At the bottom, there are buttons for 'Wash', 'Initalize', 'OK', and 'Cancel'.

Testowane są następujące funkcje autosamplera:

| Funkcja | Opis |
|----------------------|---|
| System status | Sprawdzanie gotowości do pracy. Za pomocą Update ponownie sprawdzana jest gotowość do pracy. |
| Positions | Po kliknięciu Set autosampler przesuwa się do wybranej pozycji. Cup no Autosampler przesuwa się do pozycji wybranej na liście. Wash position Autosampler przesuwa się do naczynia do płukania. |
| Sampler arm | Ramię autosamplera jest opuszczane do Depth ustawionej w polu listy. |
| Wash pump | Włączanie i wyłączanie pompy płuczającej. |

Wkładanie kaniuli autosamplera do naczynia do płukania

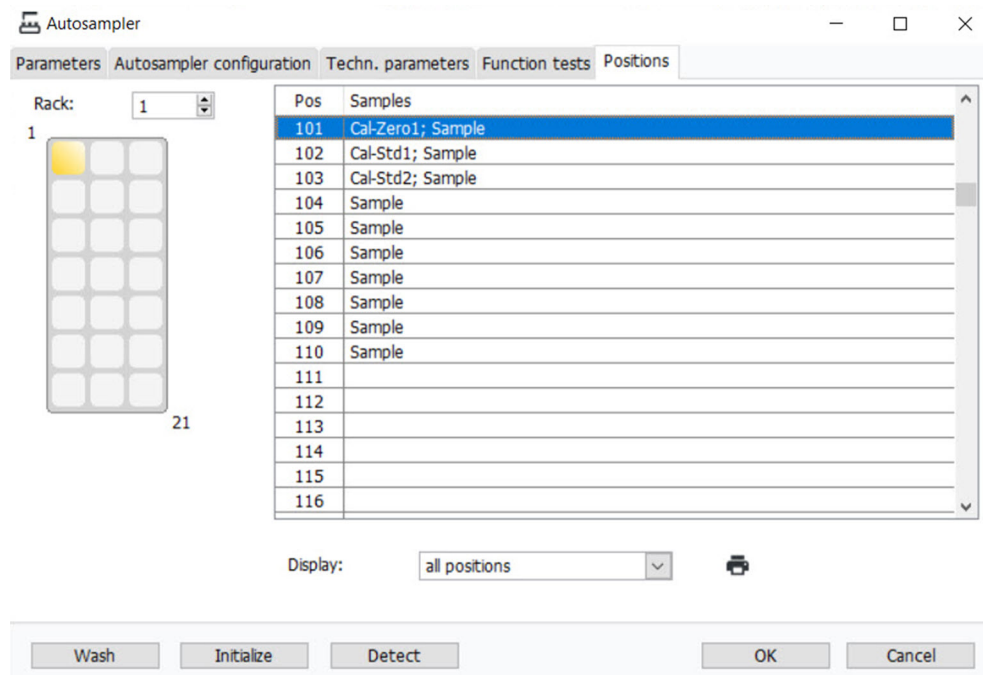
Jeśli pole wyboru **Move sampler probe into wash reservoir (when plasma on)** jest aktywne, kaniula zanurza się w naczyniu do płukania po zamknięciu okna **Autosampler**.

9.3.5 Wyświetlanie pozycji próbki na autosamplerze

W oknie **Autosampler | Positions** wyświetlane są pozycje talerza na próbki używane w bieżącej sekwencji.

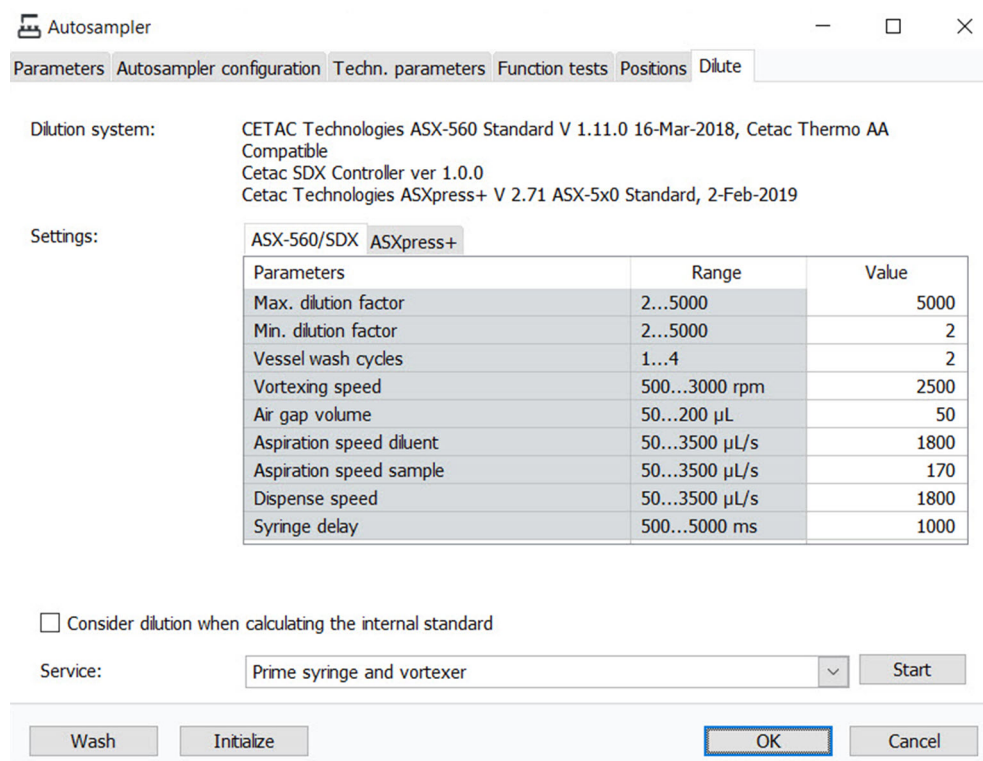
Do wyboru są opcje wyświetlania **all positions**, **only sample positions** i **only special positions**.

Obok tabeli przedstawiony jest schematyczny widok statywu na próbki z aktualnie zaznaczoną pozycją próbki. Pozycja próbki może zostać oznaczona zarówno na schemacie, jak i w tabeli.



9.3.6 Funkcja rozcieńczania

Parametry rozcieńczania próbek w przypadku korzystania z autosamplera Cetac ASX 560 z Cetac SDX_{HPLD} są wyświetlane w oknie **Autosampler / Dilute**.



Ustawienia

Parametry w obszarze **Settings** zawierają ustawienia domyślne, które dostarczają dobre wyniki rozcieńczania próbek. Podczas optymalizacji metody można zmieniać parametry w obszarach ustawień.

Consider dilution when calculating the internal standard

Jeśli pole wyboru jest zaznaczone, oprogramowanie uwzględni rozcieńczenie podczas obliczania wzorca wewnętrznego.

- Po dodaniu wzorca wewnętrznego do pierwotnej próbki również wzorec wewnętrzny jest rozcieńczany w próbce. Pole wyboru należy aktywować, aby uwzględnić rozcieńczenie w obliczeniach.
- Jeśli wzorec wewnętrzny zostanie również dodany do rozcieńczalnika lub doprowadzony do roztworu próbki za pomocą zestawu do wzorca wewnętrznego, wzorec wewnętrzny nie zostanie rozcieńczony. W takim przypadku nie należy zaznaczać pola wyboru.
- Również w przypadku użycia argonu jako wzorca wewnętrznego nie należy zaznaczać tego pola wyboru.

Serwis

Na liście **Service** można wybrać funkcje serwisowe w SDX_{HPLD} i wykonać je za pomocą **Start**:

| Opcja | Funkcja |
|---|--|
| Prime syringe and vortexer | Ciecz rozcieńczająca jest pompowana przez system za pomocą pompy strzykawkowej i dozowana do wortexera. W ten sposób z systemu usuwane są pęcherzyki powietrza i kondycjonowany jest wortexer. |
| Move syringe to removal position | Jeśli pompa strzykawkowa wymaga demontażu w ramach konserwacji, za pomocą tej funkcji należy najpierw ustawić tłok strzykawki w prawidłowej pozycji. |
| Re-home ASXpress+ after disassembly for cleaning | Tylko jeśli zainstalowany jest ASXpress+: po instalacji lub konserwacji zainicjuj ASXpress+. |

9.4 Chłodnica obiegowa

W obiegu chłodzenia urządzenia ICP-OES znajduje się zawór, który otwiera i zamyka obieg. Dlatego wymiana wody chłodzącej jest wspomagana przez kreator.



WSKAZÓWKA

Należy przestrzegać instrukcji dotyczących konserwacji chłodnicy obiegowej i przygotowania wody chłodzącej zawartych w instrukcji obsługi urządzenia ICP-OES.

- ▶ Wybierz pozycję menu **Extras | Maintenance**.
- ▶ W oknie **Maintenance** rozpocznij wymianę wody chłodzącej, klikając **Change**.
- ▶ Postępuj zgodnie z instrukcjami kreatora.

10 Zarządzanie danymi

W tym rozdziale znajdują się informacje dotyczące następujących kwestii

- Opcje drukowania
- Zarządzanie metodami i sekwencjami
- Zarządzanie danymi wyników
- Definiowanie jednostek stężeń i zawartości
- Zarządzanie danymi często używanych roztworów podstawowych i próbek QC

10.1 Funkcje drukowania w ASpect PQ

ASpect PQ obsługuje dużą liczbę formatów drukowania danych. Oprócz drukowania na drukarce dane mogą być eksportowane do formatu Excela, PDF, HTML, XML lub tekstowego lub zapisywane jako mapa bitowa bądź skalowalne grafiki.


Do drukowania wyników analizy i zawartości okien (np. okna **Method** lub **Sequence**) używane są szablony protokołów. Domyślnie zainstalowany jest zestaw szablonów protokołów. W razie potrzeby szablony te można dostosować za pomocą kreatora raportów „Moduł raportów/wydruków List & Label”.

10.1.1 Drukowanie wyników analiz

ASpect PQ oferuje różne możliwości drukowania danych wyników:

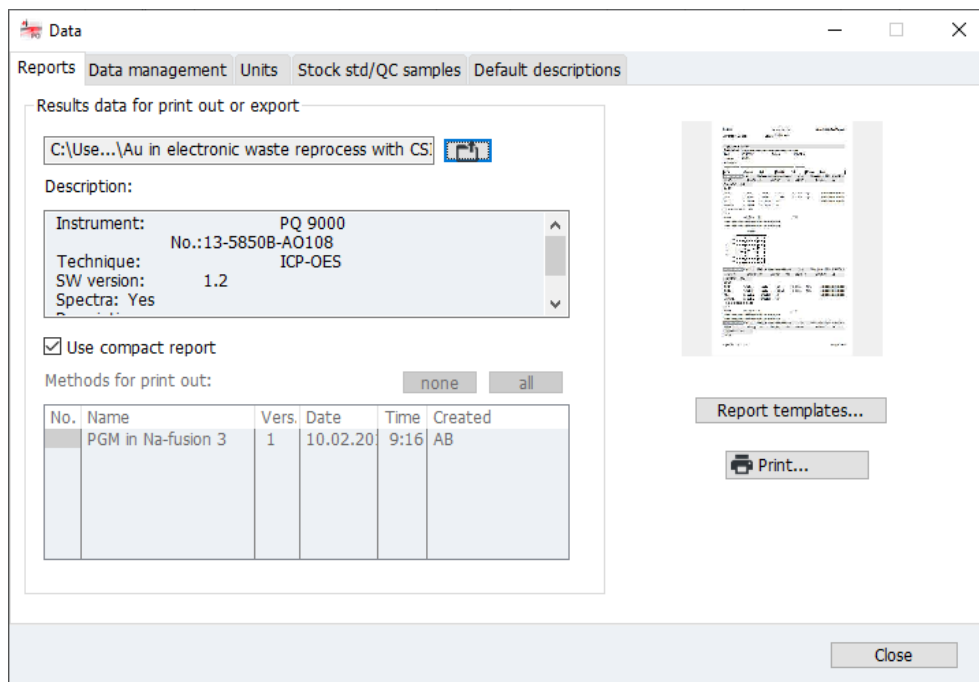
- Wydruk pełnego protokołu. Pełny protokół analizy zawiera parametry metody, kalibrację i wyniki analizy z poszczególnymi wartościami próbek (przebiegi statystyczne). Protokół można wydrukować z bieżących wyników okna głównego i z zapisanych danych.
- Drukowanie bieżących wyników. Ten wydruk umożliwia tylko wydrukowanie danych z okna głównego. Można wybrać wydruk pełny lub kompaktowy.
- Drukowanie wybranych danych z karty **Overview**. W przypadku tego wydruku można wybrać linie analizy i wyniki w oknie dialogowym.


Drukowanie pełnego protokołu Pełny protokół analizy zawiera parametry metody, kalibrację i wyniki analizy z poszczególnymi wartościami próbek (przebiegi statystyczne). Pełne protokoły mogą być drukowane zarówno z wyników w oknie głównym, jak i z zapisanych plików.

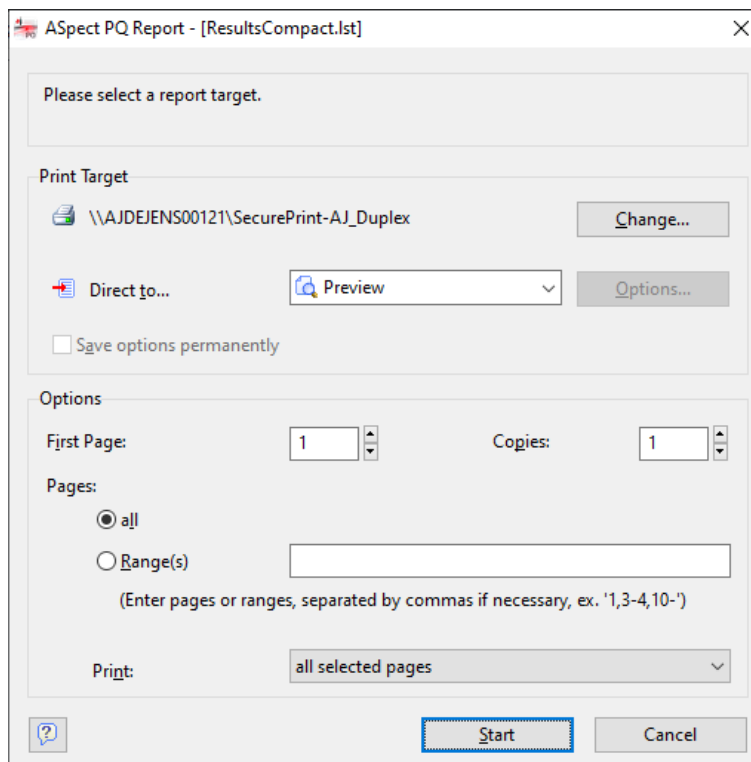
- ▶ Otwórz okno **Data | Reports** za pomocą ikony .
- ▶ Alternatywnie można otworzyć okno za pomocą menu **Extras | Data** lub **File | Print | Report**.

Wyświetlana jest nazwa bieżącego pliku, informacje o pliku (lista **Description**) i wszystkie wersje metod, które zostały użyte do wygenerowania bieżącego pliku wyników.

Okno Data | Reports z wyborem danych wyników do wydruku



- ▶ Aby wydrukować zapisany plik, otwórz za pomocą  standardowe okno **Otwórz** i wybierz plik.
- ▶ Aby wydrukować skrócony raport kompaktowy, aktywuj opcję **Use compact report**.
- ▶ Zaznacz w tabeli wszystkie wersje metody, które mają zostać wydrukowane. Przytrzymaj klawisz Shift lub Ctrl i kliknij wersję metody, którą chcesz zaznaczyć. Przyciskiem **all** można zaznaczyć wszystkie wersje, a przyciskiem **(none)** usunąć wszystkie zaznaczenia.
- ▶ Za pomocą **Print** otwórz okno **ASpect PQ Report** z wyborem formatów drukowania.



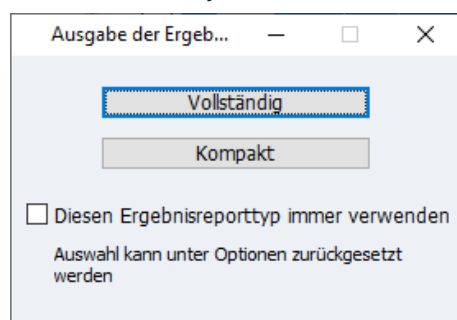
- ▶ W razie potrzeby zmień format drukowania na liście **Direct to** i ustaw specjalne parametry formatu drukowania za pomocą **Options**.

- ▶ Uruchom wydruk za pomocą **Start**.

i WSKAZÓWKA! Użyj do wydruku ustawienia **Drukuj do | Podgląd**. Po kliknięciu **Start** strony do wydrukowania zostają najpierw wyświetlone w podglądzie wydruku. Umożliwia to sprawdzenie przed wysłaniem na drukarkę, czy wydruk zawiera wszystkie wymagane dane lub czy nie zawiera niepotrzebnych danych.

Drukowanie bieżących wyników Wyniki wyświetlane w oknie głównym można wydrukować:


- ▶ Aktywuj kartę wyników w oknie głównym, której zawartość chcesz wydrukować.
- ▶ Uruchom wydruk za pomocą menu **File | Print | Active Window**.
 - ✓ Zostanie wyświetlone okno **Results report format**.

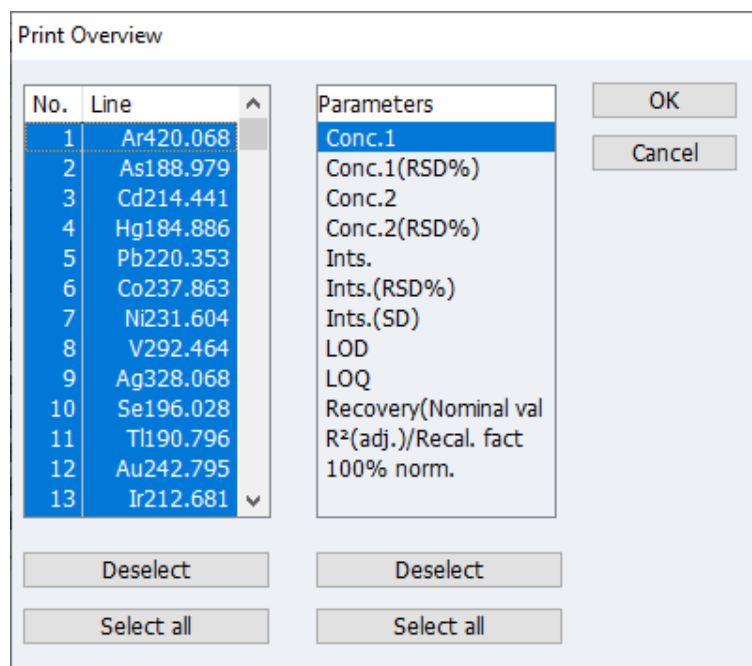


- ▶ Kliknij **Complete**, aby wydrukować wyniki z wykresami sygnału. Wybierz **compact**, aby wydrukować wyniki w kompaktowym zestawieniu.
- ▶ Postępuj dalej zgodnie z opisem w punkcie „Drukowanie pełnego protokołu” powyżej.

i WSKAZÓWKA! Jeśli aktywujesz pole wyboru **Always use this results report type** w oknie **Results report format**, a następnie klikniesz **Complete** lub **compact**, to okno nie pojawi się przy następnym drukowaniu wyników. Automatycznie zostanie użyty ostatni typ raportu wyników. Ustawienie to można zresetować w oknie **Options | View**.

Drukowanie wybranych danych ▶ Przejdź do karty **Overview** w oknie głównym.

- ▶ Kliknij  na dole tej karty lub wybierz menu **File | Print | Active Window**. Pojawi się okno **Print Overview**.




- ▶ Zaznacz wszystkie żądane linie i parametry wydruku i potwierdź wybór za pomocą **OK**.
Pojawi się okno **ASpect PQ Report**.
- ▶ Postępuj dalej zgodnie z opisem w punkcie „Drukowanie pełnego protokołu” powyżej.

Zobacz także

- 📄 Opcje widoku [▶ 130]

10.1.2 Drukowanie dalszych parametrów analizy i ustawień


Następujące parametry i ustawienia analizy można wydrukować z odpowiedniego okna:

- Metoda
- Sekwencja
- Dane wyników na karcie **Overview** w oknie głównym
- Identyfikator próbki
- QC (karty kontroli jakości)
- Kalibracja
- Pozycje autosamplera
- ▶ Aktywuj w interfejsie roboczym ASpect PQ okno, którego zawartość ma zostać wydrukowana.
- ▶ Uruchom drukowanie parametrów, klikając  w oknie.
- ▶ Alternatywnie można wywołać polecenie menu **File | Print | Active Window**.
 - ✓ Pojawia się okno **ASpect PQ Report**.
- ▶ W razie potrzeby zmień format wydruku na liście **Direct to** i ustaw specjalne parametry formatu wydruku za pomocą **Options**.
- ▶ Uruchom wydruk za pomocą **Start**.

10.1.3 Szablony protokołów

Używanie trybu wersji roboczej protokołu

Zainstalowane domyślnie szablony protokołów można dostosować do własnych potrzeb. Aby uzyskać lepszy przegląd, można edytować widoki protokołu z rzeczywistymi wartościami.

- ▶ Aktywuj pozycję menu **File | Report design mode**.
- ▶ Otwórz okno, którego szablon protokołu ma zostać zmieniony.
- ▶ Kliknij tam ikonę , jeśli jest. W innym razie wybierz pozycję menu **File | Print | Active Window**.
- ▶ Potwierdź zapytanie o edycję szablonu raportu, klikając **Yes**. Pojawia się kreator raportów.
- ▶ Wprowadź żądane zmiany i zapisz zmieniony szablon protokołu.
- ▶ Powiąż szablon protokołu z odpowiednią treścią wydruku (patrz „Zmiana przypisania” poniżej).

Krótkie wprowadzenie do kreatora raportów

Poszczególne elementy szablonu raportu nazywane są obiektami. Przykładowo tabela może składać się z obiektu nagłówka, obiektu wartości listy i obiektu grafiki.

Obiekty te z kolei zawierają informacje, które mają zostać wydrukowane, i mają przypisane właściwości układu, takie jak czcionki, wyrównania, podziałki, kolory itp.

Kreator raportów udostępnia różne typy obiektów, np. obiekty tekstowe, grafiki, kody kreskowe. Można je dowolnie rozmieszczać i zmieniać ich rozmiar w obszarze roboczym. W zależności od typu obiekt może przedstawiać różne informacje lub mieć różne właściwości.


Obiekty można z reguły rozciągać myszą w obszarze roboczym, a następnie dodawać do nich odpowiednie właściwości zawartości i układu. Alternatywnie można także przeciągnąć i upuścić zmienną z listy zmiennych na obszar roboczy. Jeśli w miejscu docelowym nie ma jeszcze żadnego obiektu, zostaje on automatycznie utworzony i zmienna zostaje przypisana do obiektu.

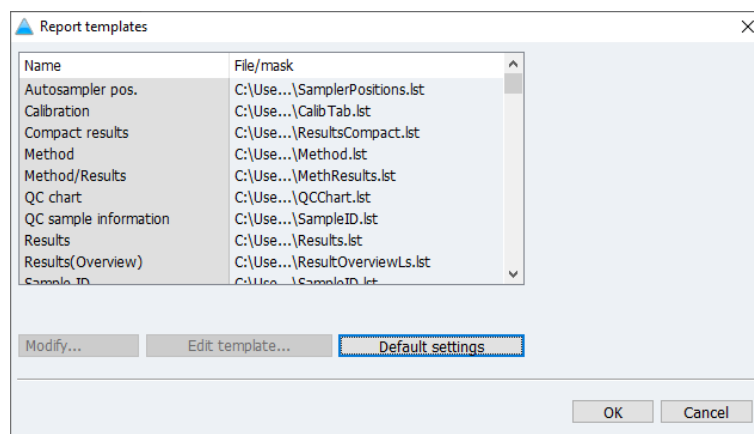
Aby edytować istniejący obiekt, należy go najpierw zaznaczyć. W tym celu należy kliknąć obiekt lewym przyciskiem myszy. Zaznaczony obiekt można rozpoznać po wyróżnionej ramce. Po utworzeniu nowego obiektu jest on automatycznie zaznaczony i można od razu zmienić jego rozmiar i położenie. Dwukrotne kliknięcie otwiera okno dialogowe, w którym można zmienić dalsze ustawienia.

Więcej informacji na temat obsługi i funkcji kreatora raportów można znaleźć w podręczniku „designer_enu.pdf” / „designer_eng.pdf” na płycie instalacyjnej CD z oprogramowaniem.

Okno Report templates

W oknie **Report templates** edytuje się szablony i przypisuje je do okien ASpect PQ. Za pomocą maski pliku można przypisać do okna wiele szablonów, z których przy uruchamianiu drukowania wybierany jest żądany szablon.

- ▶ Za pomocą ikony  otwórz okno **Data | Reports**.
- ▶ Kliknij **Report templates**.



Szablon protokołu musi być dostępny dla następujących okien:


| Nazwa | Opis |
|------------------------------|---|
| Results | Zawartość karty Results w oknie głównym |
| Compact results | Kompaktowy przegląd wyników |
| Results (Overview) | Zawartość karty Overview w oknie głównym |
| Calibration | Kalibracja analizy: Okna Calibration |
| Method | Parametry metody: Okna Method |
| Method/Results | Pełny protokół |
| Autosampler pos. | Przypisanie pozycji autosamplera: Okno Autosampler Positions |
| Sample ID | Pliki informacji o próbce: Okno Sample ID Sample Information |
| QC chart | Dane kart QC: Okna QC |
| QC sample information | Pliki informacji o próbkach QC: Okno Sample ID QC sample information |
| Sequence | Kolejność sekwencji: Okna Sequence |

| | |
|----------------------------------|--|
| Zmiana przypisania | <ul style="list-style-type: none"> ▶ W oknie Report templates zaznacz okno, którego szablon protokołu ma zostać zmieniony. ▶ Za pomocą Modify otwórz okno dialogowe do przypisywania plików. ▶ Jeśli ma zostać przypisany tylko jeden szablon protokołu, aktywuj opcję Use report template file (*.lst), a następnie wybierz żądany plik po kliknięciu . ▶ Jeśli kilka szablonów ma być oferowanych jednocześnie przy uruchamianiu drukowania, aktywuj opcję Allow file selection (mask, e.g. c:\Reports\Results*). Wprowadź w polu wprowadzania nazwę w postaci maski za pomocą symboli wieloznacznych. ▶ Potwierdź ustawienia za pomocą OK. |
| Edycja szablonu protokołu | <ul style="list-style-type: none"> ▶ W oknie Report templates zaznacz okno, którego szablon protokołu ma być edytowany. ▶ Za pomocą Edit template otwórz okno Report designer. |
| Przywracanie ustawień domyślnych | <p>Można przywrócić ustawienia do stanu po zainstalowaniu programu.</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Kliknij Default settings. |

10.2 Zarządzanie danymi dla wszystkich typów danych w ASpect PQ

Następujące dane są generowane w ASpect PQ:

- Metody
- Sekwencje
- Dane wyników
- Plik linii/długości fali
- Modele korekcji
- Widma korekcyjne
- Szablony protokołów
- Ulubione linie
- Arkusze robocze

Typy danych wymienione powyżej organizuje się w oknie **Data | Data management**. Okno to pojawia się po kliknięciu  lub po wybraniu polecenia menu **Extras | Data**.

10.2.1 Zarządzanie metodami i sekwencjami

Metody, sekwencje i modele korekcji są przechowywane oddzielnie w bazie danych. Baza danych metod nosi nazwę „method.tps”. Baza danych sekwencji nosi nazwę „sequ.tps”. W dalszej części rozdziału metody i sekwencje są określane jako „zestawy danych”.

| | |
|------------------------------|---|
| Elementy w oknie bazy danych | Podczas zapisywania, otwierania, usuwania i importowania lub eksportowania metod bądź sekwencji otwierane są okna bazy danych z tymi samymi elementami. |
|------------------------------|---|

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:


| Opcja/widok | Opis |
|-----------------------------|---|
| Name | Wprowadzanie nazwy metody/sekwencji lub wyświetlanie wybranej metody/sekwencji |
| Cat. | Dodatkowa cecha wyszukiwania metody/sekwencji w bazie danych Jako nazwę kategorii można wprowadzić maksymalnie 3 znaki. Można ograniczyć wyświetlanie listy, wprowadzając nazwę kategorii w polu Cat. . Aby wyświetlić rekordy danych ze wszystkich kategorii, usuń wpis w polu Cat. . |
| Lista rekordów danych | Zapisane metody/sekwencje z nazwą, wersją, datą, godziną, kategorią i użytkownikiem |
| Sort by | Sortowanie listy według różnych cech Sortowanie może odbywać się w porządku rosnącym lub malejącym, w zależności od wybranej opcji. |
| Description | Wprowadzanie lub wyświetlanie dodatkowych uwag, np. dotyczących użycia rekordów danych Wstępnie zdefiniowane uwagi można utworzyć w oknie Data Default descriptions. |
| Current version only | Jeśli utworzono kilka wersji rekordu danych z tą samą nazwą, wyświetlany jest tylko rekord danych o najwyższym numerze wersji. |
| Predefined methods | Zapisywanie istniejących krzywych kalibracji z metodą Krzywe kalibracji mogą być wykorzystane do dalszych analiz. |

W oprogramowaniu rekordy danych o tej samej nazwie nie są nadpisywane, lecz tworzona jest kolejna wersja i numer wersji jest zwiększany o 1.


W bazie danych metod/sekwencji można importować, eksportować lub usuwać rekordy danych poszczególnych metod/sekwencji.

Uwaga

Aby zaznaczyć wiele rekordów danych w oknie bazy danych, podczas zaznaczania myszą przytrzymaj klawisz Ctrl lub Shift.

- | | |
|--|---|
| Otwieranie zarządzania danymi | <ul style="list-style-type: none"> ▶ Otwórz okno Data Data management, klikając . ▶ Wybierz z listy Type typ danych, który ma być edytowany: Method albo Sequence. |
| Eksportowanie rekordów danych | <p>Za pomocą eksportu można udostępniać rekordy danych innym urządzeniom/komputerom. Można wyeksportować jednocześnie wiele rekordów danych do wspólnego pliku. Pliki eksportu otrzymują następujące rozszerzenia: rekordy danych metod „.met”, rekordy danych sekwencji „.seq”.</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Otwórz okno bazy danych za pomocą Export. ▶ Wybierz rekordy danych i kliknij Export. ▶ Wprowadź nazwę pliku w standardowym oknie Zapisz jako i potwierdź przyciskiem Zapisz. <ul style="list-style-type: none"> ✓ Wyświetlone zostanie okno bazy danych z wyeksportowanymi plikami. ▶ Zamknij okno bazy danych, klikając Close. |
| Importowanie rekordów danych | <p>Importowanie umożliwia załadowanie do bazy danych rekordów danych z innych urządzeń/komputerów. Plik importu może zawierać wiele rekordów danych, z których należy wybrać rekordy danych, które mają zostać załadowane.</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Za pomocą Import otwórz okno Select the method file for import lub Select the sequence file for import) ze standardowymi funkcjami otwierania plików. ▶ Wybierz plik do zaimportowania. <ul style="list-style-type: none"> ✓ Otworzy się okno bazy danych z nazwą, datą utworzenia i kategorią rekordów danych zawartych w pliku. Nazwa pliku importu jest wyświetlana na pasku tytułu okna. ▶ Wybierz rekordy danych do importu w oknie bazy danych i kliknij Import. Rekordy danych zostaną zaimportowane do bazy danych. Jeśli rekord danych o tej samej nazwie już istnieje, tworzona jest jego nowa wersja. W oknie bazy danych pojawiają się aktualne wersje istniejących rekordów danych. ▶ Zamknij okno bazy danych za pomocą Close i wróć do okna Data. |
| Usuwanie rekordów danych | <p>Funkcja usuwania służy do trwałego usuwania kompletnych rekordów danych z bazy danych.</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Otwórz okno bazy danych za pomocą Delete. ▶ Wybierz rekordy danych do usunięcia. ▶ Kliknij Delete. <ul style="list-style-type: none"> ✓ Okno bazy danych zostaje odświeżone i wyświetla tylko pozostałe rekordy danych. W przypadku rekordów danych o tej samej nazwie numer wersji zostaje zmniejszony o 1. |
| Usuwanie rekordów danych za pomocą menu File | <ul style="list-style-type: none"> ▶ Alternatywnie można otworzyć okna bazy danych Delete method lub Delete sequence za pomocą polecenia menu File Delete Method lub File Delete Sequence. ▶ Następnie postępuj zgodnie z opisem powyżej. |

10.2.2 Zarządzanie plikami wyników

| | |
|--|--|
| | <p>Dane wyników są zapisywane w bazie danych podczas pomiaru. Baza danych z danymi wyników może zostać skopiowana lub usunięta.</p> <ul style="list-style-type: none">▶ Otwórz okno Data Data management za pomocą pozycji menu Extras Data lub klikając .▶ Z listy Type wybierz opcję Results. |
| Importowanie danych wyników | <p>Dane wyników można zaimportować do oprogramowania. Podczas tego procesu dane są umieszczane w folderze wyników w strukturze plików oprogramowania.</p> <ul style="list-style-type: none">▶ Kliknij Import.<ul style="list-style-type: none">✓ Zostanie wyświetlone okno Select results files.▶ Zaznacz pliki TPS i kliknij Open.▶ Wybierz podfolder do zapisu wyników i kliknij OK.<ul style="list-style-type: none">✓ Pliki TPS i przynależne pliki SPK (jeśli istnieją) są kopiowane do wybranego folderu wyników. |
| Eksportowanie danych wyników | <p>Za pomocą tego polecenia można wyeksportować jedną lub więcej baz danych i istniejące pliki widma do innego folderu.</p> <ul style="list-style-type: none">▶ Kliknij Export. Pojawi się okno Export z przeglądem istniejących baz danych wyników.▶ Klikając myszą, zaznacz bazy danych wyników, które mają zostać skopiowane. Trzymając wciśnięty klawisz Ctrl lub Shift, można zaznaczyć wiele baz danych.▶ Kliknij Export, aby otworzyć okno Wyszukaj folder.▶ Wybierz folder docelowy i kliknij OK.<ul style="list-style-type: none">✓ Pliki TPS i SPK są kopiowane do folderu docelowego. |
| Usuwanie danych wyników | <p>Dane wyników można trwale usunąć.</p> <ul style="list-style-type: none">▶ Kliknij Delete.▶ W oknie Delete results files wybierz kliknięciem myszy bazę danych wyników, która ma zostać usunięta.▶ Kliknij Delete i potwierdź pytanie o usunięcie, wybierając OK.<ul style="list-style-type: none">✓ Dane zostają trwale usunięte. |
| Wyszukiwanie wyników poszczególnych próbek | <p>W bazach danych można wyszukiwać pojedyncze próbki o znanych nazwach.</p> <ul style="list-style-type: none">▶ W oknie Data Data management kliknij Search for sample. Alternatywnie wybierz pozycję menu Extras Search Sample. |

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 |

- ▶ Wprowadź nazwę próbki w polu wprowadzania **Sample**.
- ▶ Jeśli wprowadzony ciąg znaków jest tylko częścią nazwy próbki, aktywuj pole wyboru **Substring search**.
- ▶ Aktywacja pola wyboru **Date between** powoduje ograniczenie czasu pomiaru.
- ▶ Rozpocznij wyszukiwanie za pomocą **Start**.
 - ✓ W tabeli wyświetlone zostają wszystkie wyniki zawierające próbki o wprowadzonej nazwie.
- ▶ Aby otworzyć jedną z wyświetlanych baz danych wyników, zaznacz tę bazę na liście i naciśnij **Open**.
 - ✓ Wyniki są wyświetlane w oknie głównym.


10.2.3 Eksportowanie plików linii/długości fali

Plik linii/długości fali z liniami analizy i zapisanymi środkami ciężkości pików jest specyficzny dla urządzenia. Jest on przechowywany na komputerze używanym do sterowania urządzeniem ICP-OES. Aby użyć pliku linii/długości fali na innym komputerze, wykonaj następujące czynności:

- ▶ Otwórz okno **Data | Data management** za pomocą polecenia menu **Extras | Data management** lub klikając ikonę .
- ▶ Z listy **Type** wybierz opcję **Lines/wavelength file** i kliknij **Export**.
- ▶ Wybierz folder do zapisania pliku i kliknij **OK**.
 - ✓ Plik o nazwie „lines.dat” zostanie zapisany w wybranym folderze.

10.2.4 Zarządzanie modelami korekcji

Modele korekcji są używane do korekt widmowych. Można je przenosić między urządzeniami. Pliki modeli korekcji mają rozszerzenie MOD.

- ▶ Otwórz okno **Data | Data management** za pomocą polecenia menu **Extras | Data management** lub klikając ikonę .
- ▶ Z listy **Type** wybierz opcję **Correction models**.

Importowanie modeli korekcji

To polecenie służy do importowania modeli korekcji do ASpect PQ.

- ▶ Kliknij **Import**.
- ▶ Wybierz plik modelu korekcji do zaimportowania i kliknij **Open**. Pojawi się okno bazy danych **Import Correction model**.
- ▶ Kliknij **Import**.
 - ✓ Model korekcji zostaje przesłany do bazy danych.

Eksportowanie modeli korekcji To polecenie służy do eksportowania modelu korekcji w celu użycia go na innym komputerze.

- ▶ Kliknij **Export**.
- ▶ Zaznacz model w oknie bazy danych **Export Correction model**. Możliwy jest wybór wielokrotny.
- ▶ Kliknij **Export**.
- ▶ W oknie **Zapisz jako** wprowadź nazwę i ścieżkę zapisu i kliknij **Zapisz**.
 - ✓ Plik z modelem korekcji zostaje zapisany.

Usuwanie modeli korekcji To polecenie służy do usuwania niepotrzebnych modeli korekcji.

- ▶ Kliknij **Delete**.
- ▶ Zaznacz model w oknie bazy danych **Correction models**.
- ▶ Kliknij **Delete**.
 - ✓ Model korekcji zostaje usunięty z bazy danych.



WSKAZÓWKA

Usunięcie modeli korekcji może spowodować, że metody staną się bezużyteczne


Pamiętaj, że system nie sprawdza, czy model korekcji jest używany w jakiejś metodzie.

Zobacz także

- 📖 [Usuwanie zakłóceń widmowych - okno Edit spectra | Spectral corrections](#) [▶ 84]


10.2.5 Usuwanie widm korekcyjnych

Niepotrzebne widma korekcyjne można usunąć z bazy danych.

- ▶ Otwórz okno **Data | Data management**, klikając ikonę .
- ▶ Z listy **Type** wybierz opcję **Correction spectra** i kliknij **Delete**.
- ▶ W oknie bazy danych **Correction spectra** wybierz widmo do usunięcia i kliknij **Delete**.
 - ✓ Przeprowadzana jest kontrola w celu określenia, czy widmo jest używane w jakimś modelu korekcji. Jeśli tak nie jest, widmo korekcyjne jest usuwane.

10.2.6 Importowanie szablonów protokołów

Szablony drukowanych protokołów, które zostały utworzone zewnętrznie, muszą zostać zaimportowane do ASpect PQ poprzez zarządzanie danymi:

- ▶ Otwórz okno **Data | Data management**, klikając .
- ▶ Z listy **Type** wybierz opcję **Report templates** i kliknij **Import**.

- ▶ W oknie **Open** wybierz plik i kliknij **Open**.
Pliki protokołu mają rozszerzenie „.lst”.
 - ✓ Szablon protokołu zostaje zaimportowany do ASpect PQ. Teraz przypisz szablon protokołu do zawartości do druku.

Zobacz także

 Szablony protokołów [▶ 117]

10.2.7 Zarządzanie ulubionymi liniami

Ulubione linie można zdefiniować w oknie **Method**. Zawierają one linię analizy używaną w konkretnym zastosowaniu oraz parametry metody zależne od linii. Pliki ulubionych linii mają rozszerzenie „.fav”.

- ▶ Otwórz okno **Data | Data management**, klikając .
- ▶ Z listy **Type** wybierz opcję **Favorites**.

Importowanie ulubionych linii To polecenie służy do importowania rekordu danych ulubionych do ASpect PQ.

- ▶ Kliknij **Import**.
- ▶ W oknie bazy danych kliknij **Favorites details** na **Import**.
- ▶ Wybierz plik ulubionych linii do zaimportowania i kliknij **Open**.
 - ✓ Po zapytaniu rekord danych ulubionych zostaje dodany do ulubionych linii.

Eksportowanie ulubionych linii

- ▶ Kliknij **Export**.
- ▶ Zaznacz żądany rekord danych w oknie bazy danych **Favorites details**. Możliwy jest wybór wielokrotny.
- ▶ Kliknij **Export**.
- ▶ Wprowadź nazwę i ścieżkę zapisu w oknie **Targetfile (new or existing file)'** i kliknij **Save**.
Jako pliku docelowego można również użyć istniejącego pliku. W tym przypadku rekord danych zostanie zintegrowany z tym plikiem.
 - ✓ Plik z rekordem danych ulubionych linii zostaje zapisany.

Usuwanie ulubionych linii


- To polecenie służy do usuwania niepotrzebnych ulubionych linii.
- ▶ Kliknij **Delete**.
 - ▶ Zaznacz rekord danych w oknie bazy danych **Favorites details**.
 - ▶ Kliknij **Delete**.
 - ✓ Zaznaczony rekord danych zostaje usunięty z bazy danych.

Zobacz także

 Definiowanie swoich ulubionych linii [▶ 31]

10.2.8 Importowanie, eksportowanie i usuwanie arkuszy roboczych

Arkusze robocze można importować, eksportować i usuwać w oknie **Data | Data management**. Opcjonalnie podczas eksportu można dołączyć zapisane metody i sekwencje. Arkusze robocze mają rozszerzenie WST.

- ▶ Otwórz okno **Data | Data management** za pomocą polecenia menu **Extras | Data management** lub klikając ikonę .

| | |
|---------------------------------|--|
| | <ul style="list-style-type: none">▶ Z listy Type wybierz opcję Worksheet. |
| Eksportowanie arkusza roboczego | <ul style="list-style-type: none">▶ Kliknij Export.▶ Zaznacz odpowiedni arkusz roboczy w oknie Export Worksheet. Aby wyeksportować metody i sekwencje zawarte w arkuszu roboczym, aktywuj opcję including sequence and method(s).▶ Kliknij Export i wprowadź folder oraz nazwę pliku eksportu.▶ Potwierdź wprowadzenia za pomocą Save.<ul style="list-style-type: none">✓ Arkusz roboczy zostaje wyeksportowany z rozszerzeniem WST. |
| Importowanie arkusza roboczego | <ul style="list-style-type: none">▶ Kliknij Import.▶ W oknie Import Worksheet wybierz arkusz roboczy i kliknij Import. Aby zaimportować również metody i sekwencje zawarte w arkuszu roboczym, aktywuj opcję including sequence and method(s).▶ Wybierz arkusz roboczy w oknie standardowym i kliknij Open.<ul style="list-style-type: none">✓ Arkusz roboczy zostaje zaimportowany. |
| Usuwanie arkuszy roboczych | <ul style="list-style-type: none">▶ Kliknij Delete.▶ W oknie Delete wybierz arkusz roboczy i kliknij Delete. |

10.3 Zapisywanie wyników w formacie ASCII/CSV

Wyniki pomiarów i analiz mogą być zapisywane zarówno automatycznie, jak i ręcznie w formacie ASCII/CSV. Parametry separatora dziesiętnego i separatora kolumn ustawia się dla obu form eksportu w oknie **Options | ASCII/CSV export**.

| | |
|------------------------------------|---|
| Automatyczny ciągły eksport danych | Przy automatycznym ciągłym eksporcie danych każdy wpis w tabeli wyników jest od razu przesyłany do zdefiniowanego pliku ASCII. Nazwę pliku ASCII określa się w oknie Options Continuous ASCII export . |
| Ręczny eksport danych | <p>W przypadku ręcznego eksportu danych można wybrać w tabeli wyników wiersze próbek do wyeksportowania.</p> <ul style="list-style-type: none">▶ Zaznacz próbki na liście wyników. Przytrzymaj klawisz Ctrl lub Shift i wybierz próbki, klikając wiersze próbek. Wszystkie wiersze próbek można zaznaczyć za pomocą polecenia menu Edit Select All.▶ Za pomocą pozycji menu Edit Save Selection otwórz okno standardowe Zapisz jako. Alternatywnie można również kliknąć prawym przyciskiem myszy wybrane linie i wybrać odpowiednie polecenie w menu kontekstowym.▶ Wprowadź nazwę pliku i potwierdź przyciskiem OK. Dane są zapisywane w formacie odczytywanym przez arkusze kalkulacyjne z rozszerzeniem „.csv”. |

Zobacz także

📖 Opcje eksportu [▶ 132]

📖 Opcje ciągłego eksportu ASCII [▶ 132]

10.4 Definiowanie jednostek

Jednostkami dostępnymi w całym programie zarządza się w oknie **Data | Units**.

- ▶ Otwórz okno **Data | Units**, klikając ikonę .

Dostępne są 3 preferowane warianty (dla roztworów: mg/L, µg/L, ng/L, mg/kg(liq); dla próbek stałych: mg/kg, µg/kg, ng/kg, m-%). Jednostki te nie mogą być zmieniane przez użytkownika. Można dowolnie zdefiniować inne jednostki. W przypadku własnej definicji wprowadź współczynnik przeliczania w polu Faktor:


| Opcja | Opis |
|----------------|---|
| Unit | Nazwa jednostki (maks. 10 znaków) |
| Comment | Uwagi (maks. 20 znaków) |
| Factor | Współczynnik 1 odpowiada 1 µg/L lub µg/kg, współczynnik 1000 odpowiada 1 ng/L lub ng/kg. |
| Type | <p>solid Jednostka związana z próbką stałą</p> <p>liquid Jednostka związana z próbką ciekłą (roztworem)</p> <p>liquid grav. Jednostka związana z ważoną próbką cieczy, np. oleju</p> |

Za pomocą przycisków można zarządzać własnymi wpisami.

| Przycisk | Opis |
|---------------|--|
| Append | Dodanie nowego wiersza na końcu listy |
| Insert | Wstawienie nowego wiersza powyżej aktualnie zaznaczonego wiersza |
| Delete | Tylko jednostki zdefiniowane przez użytkownika, jednostek preferowanych nie można usunąć |
| Save | Zapisywanie zmian i wpisów |

10.5 Zarządzanie bazami danych wzorców podstawowych zapasów i próbek QC

Bazy danych z często używanymi wzorcami podstawowymi i próbkami QC są zarządzane w oknie **Data | Stock std/QC samples**. Można dodawać, usuwać lub edytować wpisy w tych bazach danych. Wzorce podstawowe i próbki QC są dostępne podczas rozwoju metody.

- ▶ Otwórz okno **Data | Stock std/QC samples**, klikając ikonę .
- ▶ Wybierz opcję **Stock standard** lub **QC samples**.
- ▶ Wprowadź lub edytuj w tabeli parametry wzorców:

| Kolumna tabeli | Znaczenie |
|------------------------------------|--|
| Name | Wprowadzanie nazwy wzorca (maks. 20 znaków). |
| Unit | Wybór nazwy jednostki (maks. 10 znaków) wzorca. |
| Elements and concentrations | Stężenie pierwiastka wprowadza się w formie „symbol pierwiastka stężenie” w wybranej jednostce, np. Fe 0,5; Cu 10; Co 0,005. Alternatywnie za pomocą Concentrations można otworzyć pole wprowadzania Concentration entry , w którym można przypisać stężenie do każdego pierwiastka. |


Za pomocą przycisków można zarządzać wpisami:

| Przycisk | Funkcja |
|-----------------------|--|
| Append | Wstawianie nowego wiersza na końcu listy. |
| Insert | Wstawianie wiersza nad zaznaczonym wierszem na liście. |
| Delete | Usuwanie wybranego wiersza. |
| Save | Zapisywanie list wzorców podstawowych/próbek QC. |
| Concentrations | Otwieranie pole wprowadzania pierwiastka i stężenia zaznaczonego wzorca. |


10.6 Tworzenie predefiniowanych uwag

Dla następujących procesów użytkownik może wstępnie zdefiniować własne uwagi:

- Zapisywanie metody
- Zapisywanie sekwencji
- Uruchamianie ponownego obliczania
- Uruchamianie pomiaru

Uwagi zdefiniowane przez użytkownika można wstawiać za pomocą przycisku  obok pola **Description** w odpowiednich oknach.

Tworzenie uwagi

- ▶ Otwórz okno **Data | Default descriptions**, klikając ikonę .
- ▶ Wybierz proces z listy **Select category**.
- ▶ Otwórz listę uwag, klikając **Edit template**.
- ▶ Utwórz nową uwagę, klikając **New**. W polu **Name** wprowadź nazwę, pod którą można wybrać uwagi. Wpisz treść uwagi w polu **Text**.
- ▶ Uwagę można edytować za pomocą **Modify** lub usunąć z listy wyboru za pomocą **Delete**.

10.7 Korzystanie ze schowka systemu Windows

Kopiowanie danych wyników do schowka

Wyniki wybranych próbek mogą być kopiowane bezpośrednio do schowka systemu Windows i w ten sposób udostępniane innym aplikacjom Windows.

Odpowiednie polecenia znajdują się w menu **Edit**:

| Menu Edit... | Opis |
|----------------------------------|--|
| Copy visible Columns only | Kopiowanie widocznych wyników próbek w bieżącej tabeli. |
| Copy all Columns | Kopiowanie wyników próbek ze wszystkich tabel. |
| Column Titles | Jeśli ta opcja jest aktywna (zaznaczona), kopiowany jest również wiersz tytułowy z nazwami kolumn. |

- ▶ Zaznacz próbki w żądanej tabeli listy wyników.
 - Przytrzymaj klawisz Ctrl lub Shift i wybierz próbki, klikając wiersze próbek.
 - Wszystkie wiersze próbek można zaznaczyć za pomocą polecenia menu **Edit | Copy all Columns**.
- ▶ W razie potrzeby aktywuj polecenie menu **Edit | Column Titles**, aby skopiować pasek tytułu.
- ▶ Wybierz odpowiednie polecenie menu, aby skopiować wyniki do schowka.

Kopiowanie grafik jako zrzutu ekranu

Okna grafik i wykresy krzywych kalibracji, sygnałów intensywności lub sygnałów emisji można kopiować do schowka jako zrzut ekranu.

- ▶ Kliknij grafikę prawym przyciskiem myszy. Pojawi się menu kontekstowe z dwoma poleceniami kopiowania.
- ▶ Wybierz polecenie kopiowania, aby skopiować obiekt: skopiuj tylko grafikę lub całe wyświetlane okno.
 - ✓ Wybrany obiekt zostaje skopiowany do schowka i jest dostępny dla innych aplikacji systemu Windows.

11 Dostosowywanie ASpect PQ

W oknie **Options** wprowadza się następujące ustawienia dotyczące całej obsługi programu ASpect PQ:

- Opcje widoku
- Miejsca zapisu plików
- Parametry eksportu danych
- Ogólnie obowiązujące ustawienia przebiegu analizy, kalibracji i korekty o wartość ślepej próby

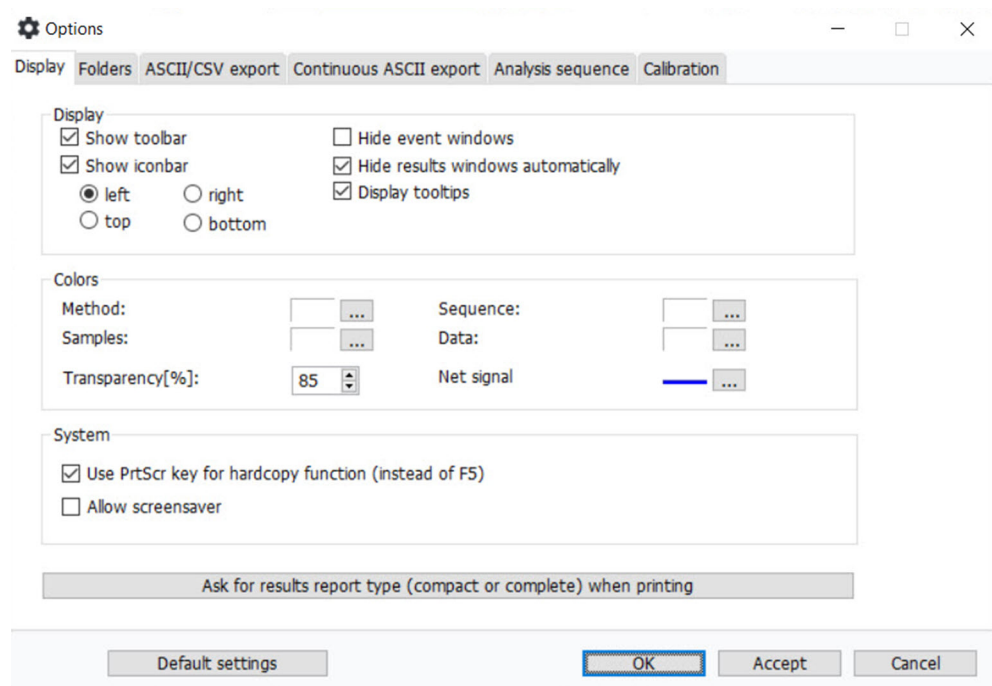
Wprowadzone ustawienia są zachowywane po zamknięciu i ponownym uruchomieniu ASpect PQ. Przycisk **Default settings** resetuje wszystkie opcje do ustawionych wartości.

Okno **Options** można otworzyć poleceniem menu **Extras | Options**.

11.1 Opcje widoku

W oknie **Options | Display** definiuje się funkcje widoczne w interfejsie roboczym. Zrzut ekranu

Okno Options | Display



| Opcja | Opis |
|--------------------|---|
| Show toolbar | Wyświetlanie paska narzędzi z przyciskami procedury pomiarowej |
| Show iconbar | Wyświetlanie paska narzędzi z dużymi przyciskami szybkiego dostępu i wybór pozycji paska symboli Położenie paska symboli można również zmienić przez przeciągnięcie go myszą, przy czym ustawienie nie zostanie zapisane przy następnym uruchomieniu programu. |
| Hide event windows | Brak wyświetlania okien zdarzeń (np. Delay time) Zamiast tego komunikaty są wyświetlane na pasku stanu okna głównego. |

| Opcja | Opis |
|---|---|
| Hide results windows automatically | Okna wyników są ukrywane, gdy otwarte zostają okna podrzędne (np. okno Method). Po zamknięciu okien podrzędnych ponownie wyświetlane są okna wyników. |
| Display tooltips | Wyświetlanie małych tekstów pomocy (etykiet narzędzi) nad wszystkimi przyciskami symboli i tytułami kolumn w oknach Method , Sequence i Sample ID . |
| Colors | Przycisk ... otwiera okno dialogowe wyboru koloru. Jako tło listy można ustawić predefiniowane lub nowo zdefiniowane kolory. |
| Use PrtScr key for hardcopy function (instead of F5) | Domyślnie wydruk ekranu uruchamiany jest za pomocą klawisza F5. Klawisz Print na klawiaturze służy do funkcji schowka systemu Windows. Jeśli to pole wyboru jest aktywne, klawisz Print uruchamia wydruk ekranu. Opcja ta staje się aktywna dopiero po ponownym uruchomieniu ASpect PQ. |
| Allow screensaver | Jeśli ta opcja jest aktywna, podczas przerw w wprowadzaniu danych włącza się wygaszacz ekranu Windows. |
| Ask for results report type (compact or complete) when printing | Podczas drukowania okien wyników za pomocą pozycji menu File Print Active Window można wybrać protokół pełny lub kompaktowy. Kliknięcie tego przycisku resetuje wybór Always use this results report type , tak aby można było ponownie wybrać typ protokołu. |

11.2 Ścieżki zapisu

Ścieżki zapisu plików są definiowane podczas instalacji. Są one wyświetlane w oknie **Options | Folder** i można tu edytować niektóre z nich.

| Folder | Opis |
|--------------------|---|
| Program | Ścieżka instalacji plików wykonywalnych programu |
| Work directory | Katalog na dane użytkownika Katalog roboczy zawiera dalsze podfoldery. Jest on definiowany podczas instalacji lub przez opcjonalne Zarządzanie użytkownikami. |
| Temporary data | Katalog na dane tymczasowo utworzone przez program |
| Sample Information | Wstępnie ustawiona ścieżka do otwierania i zapisywania plików z informacjami o próbkach Ta ścieżka może zostać zmieniona. Kliknij ... , aby wybrać nowy folder. Podczas otwierania i zapisywania plików z informacjami o próbkach można wybrać inną ścieżkę. |
| Export/Import | Wstępnie ustawiona ścieżka eksportu i importu danych metod i sekwencji oraz eksportu danych wyników jako plików CSV Ta ścieżka może zostać zmieniona. Kliknij ... , aby wybrać nowy folder. Również podczas eksportowania i importowania można wybrać inną ścieżkę. |
| Results | Katalog na dane wyników Ten standardowy katalog może zawierać dalsze podfoldery do zapisywania wyników. Foldery te są dostępne do przechowywania plików po uruchomieniu pomiaru. |
| Application data | Katalog na dane, w którym ASpect PQ zapisuje niezbędne dane |

11.3 Opcje eksportu

Parametry eksportu danych wyników w formacie ASCII definiuje się w oknie **Options | ASCII/CSV export**. Parametry te mają zastosowanie zarówno do automatycznego, jak i ręcznego eksportu danych.


Ustawienia

| Opcja | Opis |
|--------------------------|--|
| Decimal separator | Określa separator liczb dziesiętnych |
| List separator | Określa, jaki znak jest używany do oddzielania elementów listy |

Na potrzeby eksportu listy wyników należy wybrać separatory **Decimal separator** i **List separator**.

W obszarze **Results fields for export** określenia się, które kolumny tabeli wyników będą eksportowane do pliku ASCII. Opcja **all** eksportuje wszystkie kolumny listy wyników (ze wszystkimi kartami podrzędnymi). Opcja **only selected fields** otwiera listę, z której można wybrać kolumny do wyeksportowania.

Zobacz także

 Zapisywanie wyników w formacie ASCII/CSV [▶ 126]


11.4 Opcje ciągłego eksportu ASCII

W oknie **Options | Continuous ASCII export** aktywowany jest automatyczny eksport danych wyników podczas analizy. Plik eksportu jest aktualizowany po wyświetleniu nowego wiersza w oknie procesu i wyników. Dane są dołączane do istniejących plików.

Dalsze opcje eksportu definiuje się w oknie **Options | ASCII/CSV export**.

Eksport danych wyników

Pole wyboru **Continuous ASCII export of results data** aktywuje funkcję eksportu. Następnie należy wybrać opcję nazwy pliku:

| Opcja | Opis |
|--|--|
| Method name.csv | Nazwa pliku jest taka sama jak nazwa metody. Rozszerzenie pliku to „.csv”. Plik zostaje zapisany w domyślnej ścieżce eksportu/importu (okno Options Folder). |
| Results file name.csv | Nazwa pliku jest taka sama jak nazwa pliku wyników. Rozszerzenie pliku to „.csv”. Plik zostaje zapisany w domyślnej ścieżce eksportu/importu (okno Options Folder). |
| other | Można nadać dowolną nazwę pliku i wybrać dowolną ścieżkę. Przycisk  otwiera standardowe okno Save as w celu wybrania ścieżki zapisu i nazwy pliku. Dane są zapisywane na bieżąco w tym pliku do momentu przypisania nowej nazwy lub wybrania innej opcji nazwy. |
| Create separate file for each sample (result row number and sample name is appended to file-name) | Nazwa pliku zostaje uzupełniona o numer wiersza listy wyników i nazwę próbki. Niedozwolone znaki są zastępowane podkreślnikami (np. Metoda testu-001 QC 1 mg_L.csv). |

Eksport widm

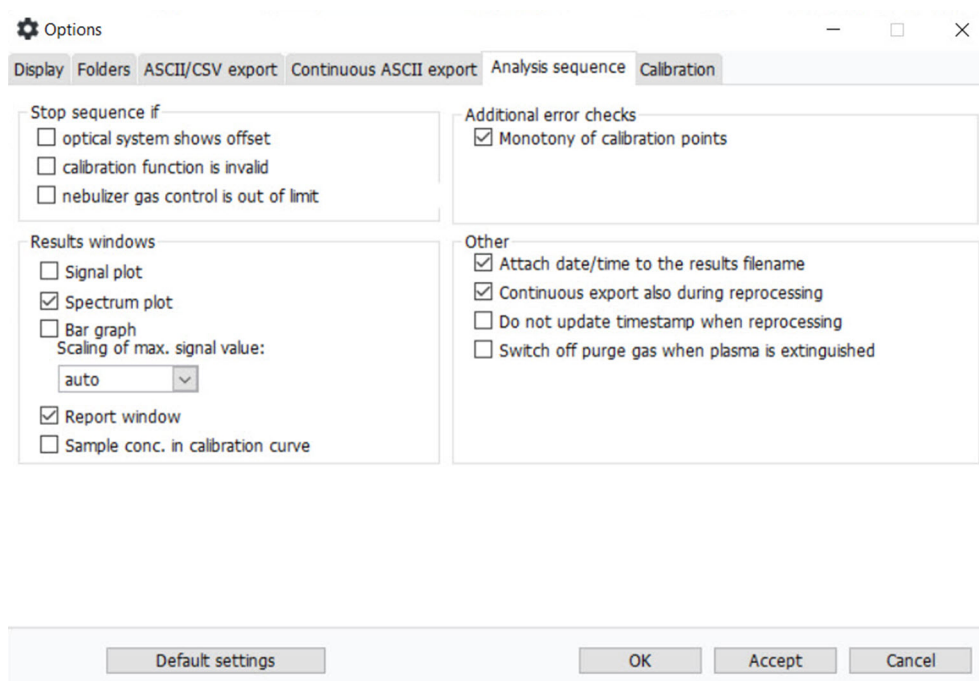
Na potrzeby eksportu widm należy aktywować opcję **Continuous export of spectra (CSV)** i wybrać ścieżkę zapisu.

Widma są dodatkowo eksportowane jako pliki CSV do określonej ścieżki eksportu. Nazwa pliku jest tworzona zgodnie ze schematem „Wiersz listy-nazwa próbki-nazwa linii-powtórny pomiar”, np. 0007-próbka-AI309-02.csv.

11.5 Opcje przebiegu analizy

W oknie **Options | Analysis sequence** można zdefiniować ogólne ustawienia przebiegu analizy. Zrzut ekranu

Okno Options | Analysis sequence



Przerwanie sekwencji po następujących błędach

Analiza jest monitorowana pod kątem następujących błędów i może zostać przerwana w przypadku ich wystąpienia:

| Opcja | Opis |
|--|--|
| optical system shows offset | Zatrzymanie, jeśli ustawienie długości fali (korekcja Ne) jest nieprawidłowe |
| calibration function is invalid | Zatrzymanie, jeśli nie można było obliczyć funkcji kalibracji |
| nebulizer gas control is out of limit | Zatrzymanie, jeśli przekroczona została wartość kontrolna rozpylacza. Wartość kontrolna przepływu rozpylacza jest określana podczas kalibracji. Jeśli wartość kontrolna zmienia się podczas późniejszej analizy, oznacza to, że cząsteczki zatykają rozpylacz. |

Dodatkowa kontrola błędów

| Opcja | Opis |
|---------------------------------------|---|
| Monotony of calibration points | Przeprowadzany jest test monotoniczności punktów kalibracji. Test monotoniczności sprawdza, czy wyższe stężenia wzorca prowadzą również do wyższych zmierzonych wartości. |

Widok wyników

| Opcja | Opis |
|--|---|
| Signal Plot | Podczas analizy wyświetlane jest okno z widokiem krzywej sygnału pomiarowego w funkcji czasu. |
| Spectrum Plot | Podczas analizy wyświetlane jest okno z widokiem rejestrowanego zakresu widmowego. |
| Bar graph | Pokazuje zmierzone intensywności w postaci wykresu słupkowego |
| Scaling of max. signal value | Określa maksimum osi wartości mierzonej dla widoku krzywej sygnału auto : Automatyczne skalowanie osi. Alternatywnie ustawienie to można również wykonać za pomocą funkcji menu View Scaling . |
| Report window | Podczas analizy wyświetlane jest okno z informacjami o stanie plazmy. |
| Sample conc. in calibration curve | Wyświetla okno Sample conc. in calibration curve z bieżącą krzywą kalibracji i, jeśli została już zmierzona, krzywą rekalkulacji. Po pomiarze próbki obliczenie nieskorygowanego stężenia z emisji jest wyróżniane czerwonymi liniami pomocniczymi. W przypadku kalibracji z do-dawaniem wyświetlana jest przeliczona krzywa kalibracji. |

Inne

| Opcja | Opis |
|---|--|
| Attach date/time to the results filename | Bieżący czas komputera w momencie rozpoczęcia pomiaru jest automatycznie dołączany do nazwy pliku wyników. |
| Continuous export also during reprocessing | Po ponownym obliczeniu wyniki są eksportowane automatycznie. |
| Do not update timestamp when reprocessing | Po ponownym obliczeniu wyników pierwotne czasy pomiarów zostają zachowane. |
| Switch off purge gas when plasma is extinguished | Aby oszczędzać gaz, gaz płuczący jest wyłączany po zgaszeniu plazmy. |

Zobacz także

-  Kalibracja [▶ 89]
-  Wprowadzanie parametrów kalibracji (okno Method | Calibration) [▶ 39]

11.6 Ustawienia ogólne kalibracji i korekty o wartość ślepej próby

W oknie **Options | Analysis sequence** definiuje się ogólnie obowiązujące ustawienia kalibracji i wybiera metodę korekty o wartość ślepej próby.

Kalibracja

W tej grupie można wprowadzić podstawowe ustawienia kalibracji. Wszystkie pola wyboru są domyślnie niezaznaczone.

| Opcja | Opis |
|--------------------------------|--|
| Correlation coefficient | Wybór wskaźnika jakości dopasowania krzywej kalibracyjnej R : współczynnik korelacji R² ! : współczynnik determinacji R²(adj.) : skorygowany współczynnik determinacji |

| Opcja | Opis |
|--|---|
| Show prediction instead of confidence interval | Jeśli opcja ta jest aktywna, wyświetlane jest pasmo prognozy dla kalibracji. Pasma ufności jest przewidziane w ustawieniach domyślnych. |
| auto compares with quadratic instead of rational function | „auto” oznacza automatyczny wybór funkcji kalibracji. Jeśli ta opcja jest aktywna, do porównania używana jest funkcja kwadratowa. Ustawieniem domyślnym jest ułamkowa funkcja wymierna. |
| Compute slope for mean concentration instead of 0 | Jeśli ta opcja jest aktywna, nachylenie krzywej kalibracji jest obliczane przy średnim stężeniu zakresu kalibracji. Przy ustawieniu domyślnym nachylenie jest obliczane dla stężenia 0. |



WSKAZÓWKA

Aby zapewnić zgodność obliczeń kwadratowej funkcji kalibracji zgodnie z DIN 38402 i ISO 8466-2, należy aktywować wszystkie powyższe opcje.

Korekta o wartość ślepej próby

Jeśli chodzi o korektę o wartość ślepej próby, można wybrać jedną z 2 metod obliczania: w oparciu o Conc.1 lub Conc.2.

W metodzie obliczania opartej na Conc.2 najpierw obliczane jest pierwotne stężenie wartości ślepej próby (Conc2_{BV}) na podstawie identyfikatorów próbek wartości ślepej próby. Przy wyznaczaniu Conc.2 uwzględniane jest Conc2_{BV}.

W metodzie obliczania opartej na Conc.1 do obliczenia stężenia próbki wykorzystywane jest stężenie wartości ślepej ustalone bezpośrednio z próbki (Conc1_{Blank}). Metoda ta może być stosowana, jeśli dane identyfikacyjne próbki (np. rozcieńczenia) nie mają dużego wpływu na stężenie roztworów wartości ślepej i dlatego nie wprowadza się danych identyfikacyjnych próbki dotyczących wartości ślepej próby.

Przykład obliczeń dla ciekłej pierwotnej próbki ze wstępnym rozcieńczeniem:

- W oparciu o Conc.1: $\text{Conc2}_{\text{Sample}} = (\text{Conc1}_{\text{Sample}} - \text{Conc1}_{\text{Blank}}) * \text{DF}_{\text{Sample}}$
- W oparciu o Conc.2: $\text{Conc2}_{\text{Sample}} = (\text{Conc1}_{\text{Sample}} * \text{DF}_{\text{Sample}}) - \text{Conc2}_{\text{Blank}}$

| | |
|-------------------------|--|
| Conc1 _{Sample} | Stężenie próbki bez uwzględnienia informacji zawartych w identyfikatorze próbki |
| Conc2 _{Sample} | Pierwotne stężenie próbki |
| Conc1 _{Blank} | Stężenie wartości ślepej próby bez uwzględnienia informacji zawartych w identyfikatorze próbki |
| Conc2 _{Blank} | Pierwotna wartość ślepej próby |
| DF _{Sample} | Współczynnik rozcieńczenia próbki |

Dla korekty o wartość ślepej próby domyślnie ustawiona jest metoda oparta na Conc.2. Jeśli chcesz użyć skróconej procedury opartej na Conc.1 bez uwzględniania identyfikatora próbki wartości ślepej próby, aktywuj opcję **Blank correction based on Conc1**.

Granica wykrywalności i oznaczalności

Dla granic wykrywalności i granic oznaczalności można edytować współczynniki i liczbę powtórnych pomiarów. Obliczone granice wykrywalności/granice oznaczalności są wyświetlane w oknie **Calibration**. Jeśli ustawienia mają zostać zastosowane do istniejących wyników, wyniki muszą zostać ponownie obliczone. Zastosowane współczynniki i liczba powtórzeń pomiaru są wyświetlane w oknie **Calibration** oraz w drukowanych protokołach kalibracji i pomiarów wyniku/wartości ślepej próby.

Aby edytować współczynniki i powtórzenia pomiarów, kliknij **LOD i BG**. Przewidziane są następujące ustawienia domyślne:

| Parametr | Wartość |
|------------|---------|
| Factor LOD | 3 |
| FactorLOQ | 9 |
| Replicates | 11 |

12 Konfiguracja wymiany danych z zewnętrznym systemem zarządzania zleceniami

Za pośrednictwem interfejsu danych wyniki pomiarów można wyeksportować w formacie ASCII/CSV ASpect PQ do systemu zarządzania informacjami laboratoryjnymi (LIMS) lub innego programu zewnętrznego.

Można również importować dane informacji o próbce (identyfikator próbki) w formacie ASCII/CSV z zewnętrznych programów, takich jak LIMS lub aplikacje Microsoft Office.

12.1 Eksportowanie wyników pomiarów

Wyniki pomiarów można eksportować zarówno automatycznie, jak i ręcznie do formatów tekstowych ASCII/CSV w celu dalszego przetwarzania w innych aplikacjach, takich jak LIMS.

Definiowanie opcji eksportu

- ▶ Otwórz okno **Options** za pomocą punktu menu **Extras | Options**.
- ▶ Zdefiniuj ścieżkę zapisu eksportu danych wyników na karcie **Folder** w punkcie **Export/Import**.
- ▶ Zdefiniuj separatory na karcie **ASCII/CSV export**:
 - **Decimal separator**: wybierz separator liczb dziesiętnych.
 - **List separator**: wybierz znak oddzielający elementy listy.
- ▶ Zdefiniuj pola eksportu wyników:
 - **all**: eksportowanie wszystkich kolumn listy wyników łącznie ze wszystkimi kartami podrzędnymi.
 - **only selected fields**: klikając **...**, otwórz listę, w której można wybrać kolumny do wyeksportowania.
- ▶ Przejmij ustawienia eksportu, klikając przycisk **Accept**.
 - ✓ Opcje eksportu zostały zdefiniowane. Ustawienia mają zastosowanie do eksportu automatycznego i ręcznego.

Konfiguracja automatycznego eksportu

Skonfiguruj automatyczny eksport danych wyników podczas analizy. Oprogramowanie aktualizuje plik eksportu natychmiast po pojawieniu się nowego wiersza w oknie procesu i wyników. Oprogramowanie dołącza nowe dane do istniejącego pliku eksportu.

- ▶ W oknie **Options** przejdź do karty **Continuous ASCII export**.
- ▶ Aktywuj pole wyboru **Continuous ASCII export of results data**.
- ▶ Nadaj nazwę pliku eksportu:
 - **Method name.csv**: nazwa pliku jest taka sama jak nazwa metody, z rozszerzeniem „.csv”.
 - **Results file name.csv**: nazwa pliku jest taka sama jak nazwa pliku wyników, z rozszerzeniem „.csv”.
 - **other**: Kliknij przycisk **...**, aby otworzyć standardowe okno **Save as**. Przypisz ścieżkę zapisu i nazwę pliku.
- ✓ Oprogramowanie zapisuje dane w pliku w sposób ciągły do momentu przypisania nowej nazwy lub wybrania innej opcji nazwy pliku.

- ▶ Aktywuj pole wyboru **Create separate file for each sample (result row number and sample name is appended to filename)**, jeśli chcesz utworzyć jeden plik dla każdej próbki.
 - ✓ Oprogramowanie dodaje numer wiersza listy wyników i nazwę próbki do nazwy pliku. Niedozwolone znaki są zastępowane podkreślnikami (np. Metoda testu-001 QC 1 mg_L.csv).
- ▶ Aktywuj pole wyboru **Continuous export of spectra (CSV)**, jeśli chcesz automatycznie eksportować także widma. Wybierz ścieżkę zapisu w punkcie **Export path**.
- ▶ Przejmij ustawienia eksportu, klikając przycisk **Accept**.
- ▶ Przejdź do karty **Analysis sequence**.
- ▶ Aktywuj pole wyboru **Continuous export also during reprocessing**, jeśli chcesz automatycznie eksportować wyniki również po ponownym obliczeniu.
- ▶ Zamknij okno, klikając **OK**.
 - ✓ Automatyczny eksport danych został skonfigurowany.

Ręczne eksportowanie wyników Alternatywnie można eksportować wyniki pomiarów ręcznie.

- ▶ Przejdź do karty **Results** w oknie głównym.
- ▶ Zaznacz próbki na liście wyników.
Przytrzymaj klawisz Ctrl lub Shift i wybierz dane do wyeksportowania, klikając odpowiedni wiersz próbki.
Wybierz wszystkie wiersze próbki za pomocą pozycji menu **Edit | Select All**.
- ▶ Wybierz pozycję menu **Edit | Save Selection**.
- ▶ Wprowadź nazwę pliku w standardowym oknie **Save as** . Potwierdź wpis, klikając **OK**.
 - ✓ Oprogramowanie eksportuje wyniki w formacie ASCII/CSV z rozszerzeniem „.csv”.
- ▶ Po wybraniu pozycji menu **Edit | Copy visible Columns only** lub **Copy all Columns** oprogramowanie kopiuje dane do schowka. Dane można przenieść do otwartego pliku Excela za pomocą kombinacji klawiszy Ctrl+V.

Format danych

Oprogramowanie oddziela wpisy w pliku tekstowym za pomocą zdefiniowanego separatora listy. Każdy wiersz kończy się znakiem końca linii (CR/LF).

- Plik eksportu rozpoczyna się od danych nagłówka które zawierają informacje o urządzeniu, wersji używanego oprogramowania oraz dacie i godzinie utworzenia pliku.
- Data jest formatowana zgodnie z ustawieniami w Panelu sterowania systemem Windows. Używany jest format daty (krótki).
- Po pustym wierszu następuje lista pól do wyeksportowania.
- Dane nagłówka są generowane tylko raz. Po danych nagłówka następują zmierzone wartości.

Przykładowy plik eksportu:

```

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;

```

Rys. 1 eksport CSV

12.2 Importowanie plików z informacjami o próbkach

Można generować i ręcznie importować pliki z informacjami o próbkach (identyfikatory próbek) w formacie ASCII/CSV za pomocą aplikacji LIMS lub Microsoft Office.

Aby import się powiódł, należy upewnić się, że poszczególne wiersze pliku z informacjami o próbce są zakończone znakami końca linii (CR/LF).

Przykład prawidłowego pliku z informacjami o próbce:


```

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

```

Rys. 2 import CSV

Ręczny import identyfikatora próbki

- ▶ Identyfikator próbki można otworzyć za pomocą jednej z poniższych możliwości:
 - Kliknij ikonę  obok pola **Samples** na pasku narzędzi.
 - Wybierz pozycję menu **File | Open Sample Information File**.
 - Kliknij **Open** w oknie **Sample ID**.
- ▶ Wybierz plik w standardowym oknie **Otwórz**.
 - ✓ Identyfikator próbki jest wyświetlany w oknie **Sample ID** i może zostać użyty do następnego analizy.

12.3 Pola eksportu wyników

| Nazwa pola | Opis | Typ danych |
|------------|---|---------------------------------|
| No. | Numer na liście sekwencji | Liczba całkowita |
| Name | Nazwa próbki, wzorca lub próbki/ wzorca QC | Ciąg znaków, maks. 20 znaków |

| Nazwa pola | Opis | Typ danych |
|------------|--|---|
| Line | Linia pierwiastka | Ciąg znaków, maks. 10 znaków |
| Type | Analit lub wzorzec wewnętrzny 0 = analit IS1 ... x = wzorzec wewnętrzny | Liczba całkowita |
| Unit1 | Jednostka stężenia 1 (stężenie analizowanej próbki) | Ciąg znaków, maks. 10 znaków |
| Conc.1 | Stężenie analitu w próbce/wzorcu | Liczba dziesiętna |
| SD1 | Odchylenie standardowe Conc. 1 (statystyka średniej) | Liczba dziesiętna |
| RSD% | Względne odchylenie standardowe Conc. 1 (statystyka średniej) | Liczba dziesiętna |
| Cf | Przedział ufności Conc. 1 | Liczba dziesiętna |
| DF | Współczynnik rozcieńczenia przy automatycznym rozcieńczaniu próbki (jest brany pod uwagę przy obliczaniu stężenia) | Liczba dziesiętna |
| Unit2 | Jednostka stężenia 2 (stężenie pierwotnej próbki) | Ciąg znaków, maks. 10 znaków |
| Conc.2 | Stężenie pierwotnej próbki | Liczba dziesiętna |
| SD2 | Odchylenie standardowe Conc. 2 (statystyka średniej) | Liczba dziesiętna |
| RSD% | Względne odchylenie standardowe Conc. 2 (statystyka średniej) | Liczba dziesiętna |
| Cf | Przedział ufności Conc. 2 | Liczba dziesiętna |
| 100% norm. | Stężenie znormalizowane do udziału procentowego 2 | Liczba dziesiętna |
| QC | Informacje o QC i kalibracji | Ciąg znaków, maks. 30 znaków |
| QC | Informacje o QC i kalibracji | Ciąg znaków, maks. 30 znaków |
| QC | Informacje o QC i kalibracji | Ciąg znaków, maks. 30 znaków |
| Rem. | Uwagi | Ciąg znaków, maks. 40 znaków |
| Ints. | Średnia zmierzonych poszczególnych intensywności | Liczba dziesiętna |
| SD (Ints.) | Odchylenie standardowe (statystyka średniej) | Liczba dziesiętna |
| RSD% | Względne odchylenie standardowe (statystyka średniej) | Liczba dziesiętna |
| Date | Data pomiaru | Ustawienie Windows dla krótkiego formatu daty, np. 30.01.2024 |
| Time | Godzina pomiaru | hh:mm, np. 14:29 |
| Norm.Ints. | (nieużywane w ASpect PQ) | / |
| SD | (nieużywane w ASpect PQ) | / |
| RSD% | (nieużywane w ASpect PQ) | / |
| Mass | (nieużywane w ASpect PQ) | / |
| Unit | (nieużywane w ASpect PQ) | / |

| Nazwa pola | Opis | Typ danych |
|----------------------|---|---|
| Hum.[%] | (nieużywane w ASpect PQ) | / |
| RHF[%] | (nieużywane w ASpect PQ) | / |
| Wt. [mg] | (nieużywane w ASpect PQ) | / |
| Error | Komunikat o błędzie, jeśli podczas pomiaru wystąpił błąd | Ciąg znaków |
| Pos | Pozycja próbki w autosamplerze | Liczba całkowita |
| Pre-DF | Współczynnik wstępnego rozcieńczenia. Współczynnik, o który oryginalna próbka została rozcieńczona przed umieszczeniem jej w autosamplerze lub doprowadzeniem do plazmy w przypadku pracy bez autosamplera. Współczynnik ten jest wymagany do obliczenia stężenia pierwotnej próbki (Conc. 2). | Liczba dziesiętna |
| Wt. [mg] | Odważka w miligramach. Masa pierwotnej próbki, która została wprowadzona do roztworu podczas wstępnej obróbki próbki (używana do obliczania Conc. 2) | Liczba dziesiętna |
| Vol. [mL] | Objętość rozpuszczalnika, w którym rozpuszczono daną odważkę w mL (używana przy obliczaniu Conc. 2) | Liczba całkowita |
| Total wt. [g] | Całkowita odważka próbki i rozpuszczalnika w gramach | Liczba dziesiętna |
| Name(2) | Dodatkowe oznaczenie próbki | Ciąg znaków, maks. 20 znaków |
| AS-DF | Współczynnik rozcieńczenia autosamplera lub układu rozcieńczania | Liczba dziesiętna |
| Blank corr. | Korekta o wartość ślepej próby off Nie jest wykonywana korekta o wartość ślepej próby. on Aby obliczyć stężenie pierwotnej próbki, odejmowana jest wartość ślepej próby ostatnio zmierzona w sekwencji. | 0 1 |
| Factor | (nieużywane w ASpect PQ) | / |
| Single values(Ints.) | Poszczególne wartości pomiarów intensywności | Ciąg znaków liczb dziesiętnych oddzielonych spacjami, maks. 1000 znaków |
| Background(Ints.) | Intensywność tła przy linii pierwiastka | Ciąg znaków liczb dziesiętnych oddzielonych spacjami, maks. 1000 znaków |

12.4 Pola plików z informacjami o próbkach

| Nazwa pola | Opis | Typ danych |
|---------------|---|---------------------------------|
| Pos | Pozycja próbki w autosamplerze | Liczba całkowita |
| Name | Nazwa próbki, wzorca lub próbki/ wzorca QC | Ciąg znaków, maks. 20 znaków |
| Pre-DF | Współczynnik wstępnego rozcieńczenia. Współczynnik, o który oryginalna próbka została rozcieńczona przed umieszczeniem jej w autosamplerze lub doprowadzeniem do plazmy w przypadku pracy bez autosamplera. Współczynnik ten jest wymagany do obliczenia stężenia pierwotnej próbki (Conc. 2). | Liczba dziesiętna |
| Unit | Jednostka stężenia próbki | Ciąg znaków, maks. 10 znaków |
| Factor | Współczynnik jednostki Współczynnik 1 odpowiada 1 µg/L lub µg/kg, współczynnik 1000 odpowiada 1 ng/L lub ng/kg. | Ciąg znaków, maks. 10 znaków |
| Type | Rodzaj jednostki 0 = ciecz 1 = stała 2 = ciecz, grawimetrycznie | Liczba całkowita |
| Wt. [mg] | Odważka w miligramach. Masa pierwotnej próbki, która została wprowadzona do roztworu podczas wstępnej obróbki próbki (używana do obliczania Conc. 2) | Liczba dziesiętna |
| Vol. [mL] | Objętość rozpuszczalnika, w którym rozpuszczono daną odważkę w mL (używana przy obliczaniu Conc. 2) | Liczba całkowita |
| Total wt. [g] | Całkowita odważka próbki i rozpuszczalnika w gramach | Liczba dziesiętna |
| Name(2) | Dodatkowe oznaczenie próbki | Ciąg znaków, maks. 20 znaków |
| AS-DF | Współczynnik rozcieńczenia autosamplera lub układu rozcieńczania | Liczba dziesiętna |
| Blank corr. | Korekta o wartość ślepej próby off Nie jest wykonywana korekta o wartość ślepej próby. on Aby obliczyć stężenie pierwotnej próbki, odejmowana jest wartość ślepej próby ostatnio zmierzona w sekwencji. | 0 1 |
| Sample type | Próbka lub wartość ślepej próby 0 = próbka 1 = odczynnik - wartość ślepej próby | Liczba całkowita |

| Nazwa pola | Opis | Typ danych |
|------------|---|---------------------------------|
| Elements | Pierwiastki lub linie, które mają być analizowane w próbce all = wszystkie pierwiastki metody Symbole pierwiastków oddzielone przecinkami, np. Fe, Co, Ni | Ciąg znaków, maks. 10 znaków |

13 Opcjonalny moduł zgodności z przepisami FDA 21 CFR Part 11

Opcjonalny moduł zgodności z przepisami FDA 21 CFR Part 11 dla ASpect PQ zawiera następujące funkcje zgodnie z wymogami FDA dotyczącymi dokumentacji elektronicznej i podpisów elektronicznych (21 CFR Part 11):

- Zarządzanie użytkownikami
- Podpisy elektroniczne
- Ścieżka audytu
- AJ File Protection do ochrony plików przed zamierzoną i niezamierzoną manipulacją danymi

Domyślnie w Zarządzaniu użytkownikami utworzonych jest 6 poziomów użytkowników. Poziomy użytkowników mogą być dowolnie konfigurowane i uzupełniane o dodatkowe poziomy użytkowników.

Jeśli Zarządzanie użytkownikami jest zainstalowane i skonfigurowane, aktywacja elementu menu **System** w ASpect PQ umożliwia dostęp do funkcji Zarządzania użytkownikami.

Wszystkie zmiany danych użytkowników są trwale zapisywane w zaszyfrowanej bazie danych po zamknięciu odpowiedniego okna.

13.1 Zarządzanie użytkownikami

13.1.1 Zarządzanie użytkownikami – widoki i ustawienia

Zarządzanie użytkownikami może zostać skonfigurowane przez użytkowników z uprawnieniami administratora przy pierwszym uruchomieniu Zarządzania użytkownikami po instalacji lub w późniejszym momencie.

Dla każdego użytkownika tworzone jest konto, w którym zapisany jest profil użytkownika. Jeśli konto użytkownika jest już niepotrzebne, można je dezaktywować lub zablokować. Kont użytkowników nie można usunąć.

- ▶ W ASpect PQ otwórz pozycję menu **System | User Management**.
- ▶ Alternatywnie można otworzyć Zarządzanie użytkownikami poza ASpect PQ poprzez menu Windows **ASpect PQ | User Management**.
- ▶ Wprowadź dane logowania użytkownika z uprawnieniami do Zarządzania użytkownikami.
 - ✓ Zostanie wyświetlone okno **User Management**.

Okno User Management

To okno zawiera listę wprowadzonych nazw użytkowników i odpowiadających im pełnych nazwisk. Po prawej stronie okna wyświetlane są szczegóły profilu wybranego użytkownika.

Szczegóły profilu użytkownika

Dla użytkownika wybranego z listy wyświetlane są następujące dane:

| Opcja | Opis |
|-------------|---|
| User ID | Login użytkownika |
| User level | Przypisany poziom użytkownika z uprawnieniami użytkownika |
| Full name | Nazwisko użytkownika |
| E-signature | Yes: użytkownik może podpisywać elektronicznie dane wyników. |

| Opcja | Opis |
|-------------------------|--|
| | No: użytkownik nie może podpisywać elektronicznie. |
| Status | Active: można używać nazwy użytkownika (zielone kółko). Disabled: nazwa użytkownika jest nieaktywna i nie można jej używać (czerwone kółko). |
| Passwd. protect. | Active: logowanie użytkownika wymaga podania hasła. Not active: logowanie użytkownika jest możliwe bez hasła. Kliknięcie symbolu kłódki otwiera okno Modify user data . Gdy kłódka jest zamknięta, aktywna jest ochrona hasłem. |
| Valid until: | Indefinitely: hasło nigdy nie wygasa. Date/days: użytkownik musi zmienić hasło po upływie określonego czasu. Ta opcja nie jest wyświetlana w przypadku logowania za pośrednictwem usługi Active Directory. |

Przyciski

| Przycisk | Opis |
|--------------------------|---|
| New ... | Tworzenie nowego użytkownika Zostanie wyświetlone okno Add user data . |
| Modify ... | Zmiana danych użytkownika dla wybranego wiersza tabeli Okno Modify user data pojawia się dla zaznaczonego użytkownika. Okno można również otworzyć poprzez dwukrotne kliknięcie użytkownika. |
| Active users only | Wyświetlanie tylko aktywnych użytkowników |
| Audit trail | Otwarcie protokołu zdarzeń |
| Permissions | Przypisywanie uprawnień użytkownikom w oprogramowaniu |
| Exit | Zamykanie aplikacji |

13.1.2 Konfiguracja poziomów użytkowników

Od wersji Modułu zgodności z przepisami FDA 21 CFR Part 11 w wersji 2.0 Zarządzanie użytkownikami ma nową funkcję konfigurowania poziomów użytkowników. Podczas gdy w poprzednich wersjach oprogramowania dostępne uprawnienia poziomów użytkowników były ustalone, teraz można dowolnie konfigurować poziomy użytkowników. Na liście funkcji oprogramowania aktywuje lub dezaktywuje się funkcje, które mają być dostępne dla danego poziomu użytkownika.

Liczba dostępnych poziomów użytkownika

Domyślnie w Zarządzaniu użytkownikami utworzonych jest 6 poziomów użytkowników. Poziomy użytkowników mogą być dowolnie konfigurowane i uzupełniane o dodatkowe poziomy użytkowników.

- Poziom administratora (poziom 0)
Administrator ma pełne prawa do Zarządzania użytkownikami i może konfigurować Zarządzanie użytkownikami, konfigurować prawa na poziomach użytkowników oraz tworzyć lub blokować użytkowników. Domyślnie administrator nie ma uprawnień do ASpect PQ i nie może zalogować się do oprogramowania.
- Poziom 1
Użytkownicy na tym poziomie mają wszystkie uprawnienia do ASpect PQ do rozwoju metod i procedur oraz mogą konfigurować oprogramowanie.
- Poziom 2 - 4
Użytkownicy na tym poziomie mają stopniowane uprawnienia do trybu analizy, przy czym: poziom 2 > poziom 3 > poziom 4. Nie mają uprawnień do konfiguracji ASpect PQ.

Konfiguracja poziomów użytkowników

- Poziom użytkownika 5
Użytkownicy na tym poziomie mają uprawnienia do logowania do Zarządzania użytkownikami i ASpect PQ z minimalnymi uprawnieniami, np. do celów audytu.

Opcjonalnie można utworzyć maks. 4 dodatkowe poziomy (6 - 9) na potrzeby konfiguracji specjalnych.

- ▶ W oknie **User Management** kliknij **Permissions**.
✓ Zostanie wyświetlone okno **Change user permissions**.
- ▶ W macierzy uprawnień/poziomów można aktywować funkcję dla poziomu, zaznaczając pola wyboru.
Po kliknięciu prawym przyciskiem myszy pola wyboru można za pomocą menu kontekstowego wstawić lub usunąć wszystkie znaczniki wyboru dla poziomu lub przejąć uprawnienia z innego poziomu.
- ▶ Aby dodać do macierzy dodatkowe poziomy, kliknij **Configure**. Aktywuj opcję **Additional user levels (max.4)**: i wstaw żadaną liczbę na liście.
- ▶ Aby przywrócić domyślne przypisanie uprawnień, kliknij **Configure**. Aktywuj opcję **Reset permissions and levels to default**. Jeśli jakimś użytkownikom zostały już przypisane dodatkowe poziomy użytkownika, zostanie wyświetlone wezwanie do zmiany odpowiedniego profilu użytkownika.
- ▶ Każde uprawnienie do funkcji ma przypisany identyfikator. Jeśli użytkownik chce wykonać działanie, do którego nie ma uprawnień, ten identyfikator jest wyświetlany w komunikacie ostrzegawczym/komunikacie o błędzie. Za pomocą tego identyfikatora można jednoznacznie zidentyfikować brakujące uprawnienie. W razie potrzeby aktywuj opcję **Show column "ID"**.

Uwagi dotyczące uprawnień użytkowników

Poszczególne uprawnienia użytkowników są powiązane z ustawieniami ogólnymi w Zarządzaniu użytkownikami. Dostęp do tych ustawień można uzyskać w oknie **User Management** poprzez pozycję menu **Extras | Preferences**.

| Uprawnienie | Opis |
|---|--|
| Skip calibration interval (ME003) | W ustawieniach Zarządzania użytkownikami można opcjonalnie zdefiniować okres ważności kalibracji. Jeśli ten okres został aktywowany i użytkownik nie ma takiego uprawnienia, nie może rozpocząć pomiaru. |
| Measurement with unreleased methods (categories) (ME004) | Można przypisać cechę Cat. (kategorię) do metod podczas zapisywania i w ten sposób scharakteryzować metody do użycia. W Zarządzaniu użytkownikami można podać do 5 oznaczeń kategorii, według których metody są oznaczane jako udostępnione. Jeśli użytkownik ma takie uprawnienie, może rozpocząć pomiar przy użyciu nieudostępnionej metody. |

Uwagi dotyczące aktualizacji

Jeśli Zarządzanie użytkownikami zostało już skonfigurowane, do użytkowników przypisywane są nowe poziomy użytkowników Admin i poziom 1 - 4. Sprawdź, czy ustawione uprawnienia są stosowne do potrzeb, i zmień uprawnienia poziomów. Pamiętaj zwłaszcza o tym, że w nowej instalacji administrator ma domyślnie dostęp tylko do Zarządzania użytkownikami i nie ma już praw do obsługi ASpect PQ.

13.1.3 Konfiguracja ogólnych ustawień Zarządzania użytkownikami

W oknie **Preferences** można ogólnie skonfigurować Zarządzanie użytkownikami za pomocą następujących opcji:

- Logowanie i wytyczne dotyczące hasła
- Korzystanie z katalogów danych
- Ustawienia dotyczące korzystania z kalibracji i metod

- Podpisy

Ustawienia te mają zastosowanie do nowo utworzonych kont użytkowników, dlatego najlepiej jest wprowadzić je po instalacji, a przed utworzeniem kont użytkowników.

- ▶ W oknie **ASpect PQ User Management** wybierz pozycję menu **Extras | Settings....** Pojawi się okno **Preferences**.
- ▶ Po lewej stronie wybierz grupę działań, która ma zostać zmieniona.
- ▶ Wykonaj konfigurację.
Kliknięcie **Default settings** przywraca ustawienia domyślne wybranej grupy działań. Ustawienia pozostałych grup pozostają bez zmian.
- ▶ Zastosuj ustawienia, klikając **OK**.

User access

Logowanie można skonfigurować lokalnie poprzez Zarządzanie użytkownikami lub poprzez serwer logowania za pośrednictwem Active Directory.

W przypadku logowania lokalnego wybierz na stronie **User access** opcję **Local (with user management)** i skonfiguruj ogólne wytyczne dotyczące nowych loginów i haseł:

| Opcja | Opis |
|--|---|
| Number of login attempts: | Liczba nieprawidłowych prób logowania (maks. 10) Jeśli ta wartość zostanie przekroczona, po upływie czasu oczekiwania nastąpi zamknięcie ASpect PQ i trzeba ponownie uruchomić program w celu ponownego zalogowania. W pliku ścieżki audytu zostaje dokonany wpis (ostrzeżenie). |
| Disable account after failed login attempts | Blokowanie użytkownika po przekroczeniu liczby prób logowania |
| Minium user name length: | Minimalna liczba znaków nowo tworzonych nazw użytkownika (maks. 10) |
| Enforce login with password | Do nowo utworzonych nazw użytkowników musi zostać przypisane hasło. |
| Password with letters and numbers: | Można przypisywać tylko hasła zawierające zarówno litery, jak i cyfry. Ta wytyczna jest również stosowana podczas zmiany haseł. |
| Password and user ID must be different | Można przypisać tylko hasła różniące się od nazwy użytkownika. Ta wytyczna jest również stosowana podczas zmiany haseł. |
| User must change password at next login is active | Domyślnie nowi użytkownicy muszą zmienić hasło przy pierwszym logowaniu. |
| Password expires in | Po upływie określonego okresu użytkownik zostaje poproszony o zmianę hasła podczas logowania. Hasło jest następnie przedłużane o okres określony w wytycznych (maks. 999 dni). Wartość ta jest stosowana jako zadana. |
| Minium password length: | Minimalna liczba znaków nowo tworzonych haseł liczba znaków: od 3 do 10 |

W przypadku logowania na serwerze należy aktywować opcję **Server-based (with Active Directory)** i skonfigurować następujące ustawienia:

| Opcja | Opis |
|-----------------------|--|
| Domain name(s) | Nazwa domeny serwera logowania Można podać 2 serwery. |

| Opcja | Opis |
|--|--|
| Allow local login if login server not reached | <p>Jeśli logowanie za pośrednictwem serwera nie powiedzie się, użytkownicy z odpowiednimi uprawnieniami mogą zalogować się lokalnie w Zarządzaniu użytkownikami za pośrednictwem menu Start systemu Windows. W tym celu użytkownicy muszą także posiadać lokalne hasło.</p> <p>W Zarządzaniu użytkownikami uprawnieni użytkownicy mogą aktywować opcję Local (with user management), aby umożliwić lokalne logowanie w ASpect PQ.</p> |
| Allow local login for AJSERVICE account | Aktywacja tej opcji umożliwia pracownikom serwisu AJ przeprowadzanie konserwacji urządzenia bez dodatkowej pomocy ze strony administratora. |

Folders

Można określić katalog roboczy oprogramowania sterującego i oceniającego oraz katalog na plik ścieżki audytu.

| Opcja | Opis |
|----------------------------------|--|
| ASpect working directory | <p>Ustawianie katalogu roboczego</p> <p>Katalog roboczy zawiera bazy danych metod i sekwencji oraz pliki wyników. Katalog roboczy został zdefiniowany podczas instalacji ASpect PQ i można go tutaj zmienić.</p> |
| Audit trail | <p>Ustawianie ścieżki pliku ścieżki audytu</p> <p>Ta ścieżka może zostać zmieniona.</p> |
| Folder with user database | <p>Wyświetlanie ścieżki bazy danych użytkowników</p> <p>Tę ścieżkę można zmienić wyłącznie za pomocą programu instalacyjnego.</p> |
| AJ File Protection | <p>Dodatkową ochronę oferuje opcjonalne oprogramowanie AJ File Protection. Chroni ono pliki przed zamierzoną i niezamierzoną manipulacją danymi, np. ich usunięciem lub zmianą.</p> <p>Jeśli zainstalowany jest program AJ File Protection, ten przycisk jest aktywny i wskazuje stan ochrony poprzez zaznaczenie. Zielony – ochrona plików jest aktywna; czerwony – sterownik ochrony plików jest nieaktywny. Po kliknięciu przycisku pojawia się okno z listą chronionych katalogów.</p> |

Permissions (Details)

W tej grupie dokonuje się ogólnych ustawień metod i kalibracji, które mają wpływ na uprawnienia na poziomach użytkowników.

| Opcja | Opis |
|---|---|
| Calibration validity period [h:mm]: | <p>Opcjonalnie można określić okres ważności kalibracji</p> <p>Jeśli uprawnienie Skip calibration interval jest nieaktywne dla jakiegoś użytkownika (patrz Poziomy użytkownik), użytkownik ten nie może uruchomić sekwencji po upływie okresu ważności.</p> <p>Jeśli uprawnienie Skip calibration interval jest aktywne, użytkownik może uruchomić sekwencję. Wyświetlona zostanie informacja o upływie okresu ważności kalibracji.</p> |
| Method categories for released methods | <p>W tym miejscu można podać do 5 kategorii służących do oznaczania metod jako udostępnionych. Kategorie podaje się w polu Cat. podczas zapisywania metody.</p> <p>Jeśli uprawnienie Measurement with unreleased methods (categories) jest nieaktywne dla jakiegoś użytkownika, użytkownik ten nie może uruchomić sekwencji, jeśli przynależna metoda nie jest oznaczona jedną z określonych kategorii.</p> |

Signatures

Lista pokazuje znaczenia podpisu i odpowiednie poziomy użytkownika, które można wybrać podczas podpisywania.

| Przycisk | Opis |
|---------------|---|
| Add | Dodawanie nowego znaczenia podpisu Po kliknięciu przycisku pojawia się okno Edit list of signature meanings , w którym można wybrać nowe znaczenie podpisu i prawidłowy poziom użytkownika. |
| Modify | Edytowanie zaznaczonego znaczenia podpisu |
| Delete | Usuwanie zaznaczonego znaczenia podpisu |

13.1.4 Tworzenie nowego konta użytkownika

Tylko użytkownicy z odpowiednimi uprawnieniami mogą skonfigurować nowe konto użytkownika. W domyślnych ustawieniach poziomów użytkowników uprawnienia do Zarządzania użytkownikami są przypisane do poziomu administratora. Konfiguracja nowego użytkownika z odpowiednimi uprawnieniami odbywa się w oknie **Add user data**.

Opcje w oknie Add user data

| Opcja | Opis |
|--|--|
| User ID | Użytkownik loguje się przy użyciu tej nazwy. Wielkie i małe litery nie są sprawdzane. Minimalna długość zależy od ogólnej konfiguracji Zarządzania użytkownikami. |
| Full name | Nazwisko użytkownika Ta nazwa jest używana jako część podpisu elektronicznego. Maks. liczba znaków: 32 |
| Description | Pole na uwagi Wpis jest opcjonalny. |
| User level | Wybór poziomu użytkownika z odpowiednimi uprawnieniami |
| Password | Ustawianie hasła W hasłach rozróżniana jest wielkość liter. Jeśli okno dialogowe hasła zostanie potwierdzone bez wprowadzenia hasła, ochrona hasłem zostanie anulowana. Minimalna długość i inne wytyczne dotyczące hasel są określone w ogólnych konfiguracjach Zarządzania użytkownikami. Maks. długość hasła: 20 znaków |
| Symbol kłódki | Zamknięta: ochrona hasłem jest aktywna, ponieważ przypisano hasło. Otwarta: ochrona hasłem nie została jeszcze aktywowana. |
| Password never expires | W przypadku aktywacji hasło jest ważne przez czas nieokreślony. W przypadku dezaktywacji hasło wygasa po określonym czasie. Wartość domyślna pochodzi z wytycznych dotyczących hasel. Użytkownik może również wcześniej przedłużyć ważność hasła. To ustawienie jest ukryte podczas logowania za pośrednictwem serwera logowania i usługi Active Directory. |
| User-specific working directory | Dla użytkownika ustawiany jest oddzielny katalog roboczy zgodnie z następującym schematem: \ASpect-katalog roboczy\nazwa użytkownika. Struktura katalogów jest tworzona przy pierwszym logowaniu użytkownika. |
| Use e-signature | Użytkownik ma uprawnienie do elektronicznego podpisywania wyników pomiarów. Ma do dyspozycji znaczenia podpisu przypisane do jego poziomu użytkownika. |

| Opcja | Opis |
|--|--|
| Disable user ID | Dezaktywacja konta użytkownika Nazwę użytkownika można tymczasowo dezaktywować. Dezaktywacja konta użytkownika zapobiega ponownemu użyciu nazwy użytkownika dla nowo tworzonych użytkowników. |
| User must change password at next login | Przy następnym logowaniu użytkownik zostanie poproszony o zmianę hasła. |

Definiowanie danych użytkownika

- ▶ W oknie **User Management** kliknij **New**
Pojawia się okno **Add user data**.
- ▶ Wprowadź ustawienia w polach i opcjach i potwierdź, klikając **OK**.
 - ✓ Nowe konto użytkownika pojawia się w oknie **ASpect PQ User Management**.

Zobacz także

- 📖 Konfiguracja ogólnych ustawień Zarządzania użytkownikami [▶ 146]

13.1.5 Zmiana istniejącego konta użytkownika

Można zmienić właściwości konta użytkownika.

- ▶ W oknie **User Management** zaznacz konto użytkownika i kliknij **Modify**
Pojawi się okno **Modify user data** z ustawieniami konta.
- ▶ Wprowadź ustawienia i kliknij **OK**.
 - ✓ Zmiany zostają zastosowane i zaczynają obowiązywać przy następnym logowaniu użytkownika.

Zobacz także

- 📖 Tworzenie nowego konta użytkownika [▶ 149]

13.2 Zmiana hasła

Ta funkcja jest dostępna tylko przy logowaniu lokalnym w ASpect PQ lub w Zarządzaniu użytkownikami. Przy logowaniu za pośrednictwem serwera logowania hasła i ich ważność są zarządzane na serwerze.

W zależności od ustawień na koncie użytkownika, przy logowaniu lokalnym użytkownik musi zmieniać przypisane hasło w regularnych odstępach czasu.

- ▶ W **ASpect PQ** wybierz pozycję menu **System | Change password**.
Pojawi się okno **Change password**.
- ▶ Wprowadź stare i dwukrotnie nowe hasło i potwierdź, klikając **OK**.
 - ✓ Jeśli wpis jest poprawny, pojawi się komunikat **Password was changed**.

13.3 Wyświetlanie, drukowanie i eksportowanie ścieżki audytu

W pliku ścieżki audytu rejestrowane są zdarzenia systemowe i dodatkowo wszystkie ostrzeżenia i komunikaty o błędach z ASpect PQ i Zarządzania użytkownikami. Wyświetlanie ścieżki audytu wymaga przyznania uprawnień na koncie użytkownika.

Ścieżkę audytu można otworzyć w ASpect PQ za pomocą pozycji menu **System | Audit Trail** lub w Zarządzaniu użytkownikami przez kliknięcie **Audit Trail**.

Dla ścieżki audytu dostępne są następujące funkcje:

- Widok
- Filtry
- Aktualizacja
- Drukowanie
- Eksport do pliku CSV (tylko jeśli ścieżka audytu została otwarta z okna Zarządzanie użytkownikami)

Następujące parametry są dokumentowane w ścieżce audytu:

| Kolumna tabeli | Opis |
|--------------------|---|
| Type | Widok typu zdarzenia Następujące typy zdarzeń są zapisywane w ścieżce audytu i oznaczane symbolami: informacja, ostrzeżenie, błąd, logowanie i wylogowanie |
| Date/Time | Data i godzina zdarzenia (zegar komputera) Za pomocą przycisków [+] i [-] w nagłówku tabeli w obu kolumnach można sortować wpisy rosnąco lub malejąco według godzin lub dat. |
| Time zone | Strefa czasowa obowiązująca w momencie zdarzenia (Panel sterowania systemu Windows) |
| User | Użytkownik zalogowany w momencie zdarzenia |
| Source | Rozróżnienie zdarzeń w Zarządzaniu użytkownikami lub w ASpect PQ |
| Description | Szczegółowe informacje dotyczące zaznaczonego zdarzenia |

Wybór widoku

Jeśli ścieżka audytu została otwarta w oknie **User Management**, widoczne są zarówno zdarzenia w ASpect PQ, jak i w Zarządzaniu użytkownikami. Na liście View można ograniczyć wyświetlanie do zdarzeń z ASpect PQ lub zdarzeń Zarządzania użytkownikami.

Jeśli ścieżka audytu została otwarta w ASpect PQ za pomocą pozycji menu **System | Audit Trail**, wyświetlane są tylko zdarzenia z ASpect PQ.

Filtrowanie ścieżki audytu

Klikając **Filter**, można wyszukać zalogowanych użytkowników, typy wpisów lub okresy. Można również ograniczyć wyszukiwanie do działań związanych z metodami, sekwencjami, wynikami lub arkuszami roboczymi. Kliknięcie **Deactivate filter** usuwa ograniczenia ustawionego filtra.

Aktualizacja ścieżki audytu

Kliknięcie **Refresh** aktualizuje listę wpisów ścieżki audytu. Może to być konieczne w przypadku dodania kolejnych wpisów do otwartej już ścieżki audytu.

Drukowanie ścieżki audytu

Ścieżkę audytu można wydrukować. Jeśli wpisy zostały przefiltrowane, drukowane są tylko wpisy spełniające kryteria filtra.

- ▶ Uruchom wydruk bieżącego widoku ścieżki audytu, klikając **Print**. Otworzy się okno drukowania.
- ▶ Wybierz format wydruku z listy **Direct to**.
- ▶ Uruchom wydruk, klikając **Start**.
 - ✓ Ścieżka audytu jest drukowana do wybranego formatu wyjściowego.

Eksportowanie ścieżki audytu

Wpisy ścieżki audytu można wyeksportować do pliku CSV. Funkcja eksportu jest dostępna tylko wtedy, gdy ścieżka audytu została otwarta w Zarządzaniu użytkownikami. Jeśli aktywny jest filtr, eksportowane są tylko wpisy spełniające kryteria filtra.

- ▶ Kliknij **Export**, aby otworzyć okno **Zapisz jako**.
- ▶ Wprowadź ścieżkę i nazwę, a następnie kliknij **OK**, aby potwierdzić.

- ✓ Plik ścieżki audytu zostaje wyeksportowany.

13.4 Podpisy elektroniczne

W ASpect PQ można podpisać elektronicznie dane wyników. Podpis oznacza zakończenie pracy nad plikiem. Dalsze zmiany pliku skutkują nieważnym statusem podpisu. Znaczenia podpisów i ich przynależność do poziomu uprawnień są tworzone w ustawieniach ogólnych Zarządzania użytkownikami. Ustawienia decydującego, że użytkownik może podpisać dokument, dokonuje się na koncie użytkownika. Użytkownik może zatem podpisać dokument, jeśli taka funkcja została aktywowana na jego koncie użytkownika i jeśli podpisy są przewidziane dla jego poziomu uprawnień.

Proces podpisywania szyfruje pliki i nadaje im status podpisu oraz dodaje dane podpisującego użytkownika. Dodatkowo tworzony jest zaszyfrowany plik podpisu o takiej samej nazwie jak plik wyników, ale z rozszerzeniem „.sig”. Plik ten zawiera sumy kontrolne pliku wyników łącznie z plikiem widm (jeśli jest).

Proces podpisywania szyfruje pliki i nadaje im status podpisu oraz dodaje dane podpisującego użytkownika. Dodatkowo tworzony jest zaszyfrowany plik podpisu o takiej samej nazwie jak plik wyników, ale z rozszerzeniem „.sig”. Plik ten zawiera sumy kontrolne pliku wyników.

Plik może zostać podpisany przez kilku użytkowników.

Zobacz także

- 📖 Konfiguracja ogólnych ustawień Zarządzania użytkownikami [▶ 146]
- 📖 Konfiguracja poziomów użytkowników [▶ 145]

13.4.1 Podpisywanie wyników pomiarów

Od razu po pomiarze lub po późniejszym załadowaniu pliki wyników pomiarów mogą zostać opatrzone podpisem elektronicznym przez uprawnionych użytkowników w oknie **Sign off**.

Opcje w oknie Sign off

| Opcja | Opis |
|-----------------|--|
| User ID | Login bieżącego użytkownika Nazwę użytkownika można zmienić. Umożliwia to podpisanie przez innych użytkowników. |
| Password | Hasło użytkownika |
| Meaning | Znaczenie podpisu Lista znaczeń podpisów jest definiowana przez administratora w Zarządzaniu użytkownikami. |
| Comment | Opcjonalne uwagi (maks. 256 znaków) |
| Sign off | Podpisanie dokumentu z ustawieniami wprowadzonymi powyżej |

Podpisywanie wyników

- ▶ Wyświetl wyniki pomiarów do podpisania w oknie głównym oprogramowania.
- ▶ Wybierz pozycję menu **System | Sign off results**.
- ▶ Wprowadź nazwę użytkownika i hasło.
- ▶ Wybierz znaczenie podpisu.
- ▶ Kliknij **Sign off**.

- ✓ Pojawi się pytanie, czy podpis ma zostać przypisany, czy proces ma zostać anulowany. Pomyślne przypisanie podpisu zostaje potwierdzone.

Zobacz także

- 📖 Tworzenie nowego konta użytkownika [▶ 149]
- 📖 Konfiguracja ogólnych ustawień Zarządzania użytkownikami [▶ 146]

13.4.2 Wyświetlanie podpisu

Podczas podglądu lub drukowania podpisanych plików wyników na końcu protokołu dodawana jest sekcja **Signatures**. Zawiera ona wszystkie podpisy elektroniczne odpowiedniego pliku:

| Opcja | Opis |
|------------------|--|
| Issued by | Nazwisko i login użytkownika, który podpisał plik |
| Signed on | Data/godzina podpisu |
| Status | Status podpisu może mieć jedno z następujących znaczeń: Valid Podpis i dane wyników są kompletne i poprawne. Obliczone sumy kontrolne plików nie różnią się od sum kontrolnych zapisanych w pliku podpisu w momencie podpisywania. Invalid (missing or invalid signature file) Plik podpisu należący do rekordu danych nie został znaleziony lub jest nieprawidłowy. Invalid (TPS data) Plik wyników został zmieniony po podpisaniu. Porównanie obliczonych na nowo i zapisanych sum kontrolnych wykazuje różnice. Invalid (SPK data) Plik z surowymi danymi widma został zmieniony po podpisaniu. Porównanie obliczonych na nowo i zapisanych sum kontrolnych wykazuje różnice. |
| Status | Status podpisu może mieć jedno z następujących znaczeń: Valid Podpis i dane wyników są kompletne i poprawne. Obliczone sumy kontrolne plików nie różnią się od sum kontrolnych zapisanych w pliku podpisu w momencie podpisywania. Invalid (missing or invalid signature file) Plik podpisu należący do rekordu danych nie został znaleziony lub jest nieprawidłowy. Invalid (TPS data) Plik wyników został zmieniony po podpisaniu. Porównanie obliczonych na nowo i zapisanych sum kontrolnych wykazuje różnice. |
| Meaning | Znaczenie podpisu |
| Comment | Opcjonalny komentarz w podpisie |

13.5 AJ File Protection

Opcjonalne oprogramowanie AJ File Protection chroni pliki przed zamierzoną i niezamierzoną manipulacją danymi, np. ich usunięciem lub zmianą. Sterownik filtra umożliwia przy tym dostęp do katalogu autoryzowanym aplikacjom, podczas gdy dostęp innych

aplikacji jest blokowany. Funkcja skanerów antywirusowych i profesjonalnego oprogramowania do replikacji, synchronizacji lub tworzenia kopii zapasowych danych nie jest ograniczona, jeśli przestrzegane są standardy Microsoft.

Program AJ File Protection musi zostać zainstalowany i skonfigurowany przez administratora systemu. Instalacja wymaga uprawnień administratora.

Szczegółowy opis instalacji i konfiguracji oprogramowania znajduje się na nośniku danych instalacyjnych.

W połączeniu z oddzielnymi uprawnieniami do automatycznego zapisywania i eksportowania oprogramowanie AJ File Protection gwarantuje pełne bezpieczeństwo danych podczas tworzenia metod, rejestrowania danych i oceny.

14 Konserwacja i pielęgnacja spektrometru emisyjnego

Użytkownikowi nie wolno przeprowadzać przy urządzeniu i jego komponentach innych prac konserwacyjnych niż wymienione tutaj.

Podczas wszystkich prac konserwacyjnych przestrzegać wskazówek zawartych w rozdziale „Wskazówki bezpieczeństwa”. Przestrzeganie wskazówek bezpieczeństwa jest warunkiem bezawaryjnej pracy. Zawsze przestrzegać wszystkich ostrzeżeń i wskazówek znajdujących się na urządzeniu lub wyświetlanych w oprogramowaniu sterującym.

Aby zapewnić prawidłowe i bezpieczne działanie, firma Analytik Jena zaleca coroczną kontrolę i konserwację przez dział serwisu.



OSTRZEŻENIE

Niebezpieczeństwo porażenia prądem elektrycznym

- Przed przystąpieniem do jakichkolwiek prac konserwacyjnych należy wyłączyć urządzenie i wyciągnąć z gniazdka wtyczkę sieciową. Dopiero po odłączeniu wtyczki sieciowej urządzenie jest odłączone od sieci elektrycznej. Po wyłączeniu niektóre obszary nadal znajdują się pod napięciem sieciowym.
- Pozostaw urządzenie i oprogramowanie sterujące włączone tylko wtedy, gdy wyraźnie wymaga tego instrukcja konserwacji.



OSTROŻNIE

Uszkodzenie oczu i skóry przez promieniowanie UV i promieniowanie elektromagnetyczne

Plazma emituje promieniowanie UV i promieniowanie elektromagnetyczne o wysokiej częstotliwości, które może powodować poważne uszkodzenia oczu i skóry oraz inne zagrożenia dla zdrowia.

- Nie wolno pomijać obwodów zabezpieczających podczas prac konserwacyjnych.
- Po przeprowadzeniu prac konserwacyjnych należy sprawdzić działanie obwodów zabezpieczających.



OSTROŻNIE

Niebezpieczeństwo oparzenia o gorący palnik

Plazma jest niezwykle gorąca. Również po zgaszeniu plazmy palnik jest nadal gorący. Kontakt z gorącą powierzchnią może spowodować oparzenia.

- Odczekaj 5 minut po zgaszeniu plazmy. Dopiero wtedy można dotknąć palnika.

14.1 Przegląd konserwacji

Urządzenie podstawowe

| Częstotliwość konserwacji | Czynność konserwacyjna |
|--|---|
| Codziennie i po zakończeniu prac konserwacyjnych | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Sprawdź poziom napełnienia butelki z roztworem do płukania, uzupełnij roztwór ▪ Sprawdź poziom napełnienia butelki na odpady, opróżnij ▪ Usuń zanieczyszczenia z komory próbki i komory plazmy, opróżnij tackę ociekową ▪ Sprawdź cewkę indukcyjną i pierścień izolatora pod kątem zanieczyszczeń, w razie potrzeby wyczyść ▪ Sprawdź okna transferowego układu optycznego w komorze plazmy pod kątem korozji i zanieczyszczeń. Wyczyść lub wymień w razie potrzeby. ▪ Sprawdź szczelność i elastyczność węży pompy, w razie potrzeby wymień węże pompy |
| Raz w tygodniu | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Sprawdź szczelność przyłączy gazu ▪ Wyczyść zespół zaworu opcjonalnego systemu doprowadzania próbek Cetac ASXPress Plus. ▪ Sprawdź węże wody chłodzącej pod kątem zużycia |
| Raz w miesiącu | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Sprawdź, czy filtr powietrza w szufladzie z przodu urządzenia nie jest zabrudzony, w razie potrzeby wymień |
| Raz w roku | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Sprawdź filtr wody w obiegu wody chłodzącej pod kątem zanieczyszczeń, w razie potrzeby wyczyść przez przepłukanie, wymień co najmniej raz w roku ▪ Przynajmniej raz w roku zleć serwisowi wymianę filtra powietrza pod komorą plazmy. Zlecaj wymianę części, jeśli obciążenie pyłem w pomieszczeniu instalacji jest wysokie |
| W razie potrzeby | <p>Wymień okna transferowego układu optycznego w komorze plazmy:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ jeśli widoczne są smugi i pozostałości po wypaleniu ▪ jeśli występują straty energii <p>Dodatkowo sprawdź szczelność przyłączy gazu:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ gdy przyłącza są podłączane na nowo ▪ jeśli na manometrze widoczny jest wyraźny spadek ciśnienia ▪ jeśli plazma nie zapala się lub towarzyszy temu głośny hałas <p>Wymień wąż argonu, jeśli się przebarwił.</p> <p>Wymień filtr wejściowy opcjonalnego systemu doprowadzania próbek Cetac ASXPress Plus:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ jeśli spada przepływ wody do płukania ▪ jeśli stacja płukania autosamplera nie napełnia się całkowicie |

System doprowadzania próbek

| Częstotliwość konserwacji | Czynność konserwacyjna |
|---------------------------|--|
| W razie potrzeby | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Wyczyść palnik, jeśli widoczne są zabrudzenia (w szczególności metaliczna powłoka lub silne mlecznobiałe przebarwienie szkła kwarcowego). <p>Częstotliwość czyszczenia zależy od materiału próbek i waha się od codziennej do corocznej.</p> |

| Częstotliwość konserwacji | Czynność konserwacyjna |
|---------------------------|--|
| | <ul style="list-style-type: none"> Wyczyść rozpylacz, jeśli odtwarzalność ulegnie znacznemu pogorszeniu bez innych przyczyn lub jeśli linia bazowa jest niestabilna. Zanieczyszczenie występuje szczególnie często w przypadku próbek o wysokiej zawartości soli lub z zawiesinami ciał stałych. Wyczyść komorę rozpylania zgodnie z załączonymi instrukcjami, jeśli wydajność analityczna spadnie i, na przykład, pogorszą się granice wykrywalności. Wymień szklany korpus możliwego do rozmontowania palnika, jeśli jest pęknięty. W przypadku uszkodzenia należy całkowicie wymienić palnik jednoczęściowy. |

Autosampler

| Częstotliwość konserwacji | Czynność konserwacyjna |
|--|--|
| Codziennie i po zakończeniu prac konserwacyjnych | <ul style="list-style-type: none"> Wyczyść powierzchnie Usuń resztki cieczy z tacy Sprawdź wąż próbki i kaniulę pod kątem osadów Sprawdź elastyczność i szczelność węży pompy, w razie potrzeby wymień |
| Raz w tygodniu | <ul style="list-style-type: none"> Wyczyść naczynie do płukania |

Chłodnica obiegowa

| Częstotliwość konserwacji | Czynność konserwacyjna |
|--|---|
| Raz w tygodniu i po zakończeniu prac konserwacyjnych | <ul style="list-style-type: none"> Sprawdź poziom płynu chłodzącego na wskaźniku poziomu i uzupełnij go |
| Raz na pół roku | <ul style="list-style-type: none"> Sprawdź przewodność wody chłodzącej |
| Raz w roku | <ul style="list-style-type: none"> Płyn chłodzący należy wymieniać co roku i za każdym razem, gdy przewodność wzrośnie powyżej 50 ... 200 $\mu\text{S}/\text{cm}$ |

14.2 Czyszczenie palnika z możliwością rozmontowania



OSTRZEŻENIE

Niebezpieczeństwo oparzeń chemicznych z powodu wody królewskiej

Woda królewska to mieszanina stężonego kwasu solnego i kwasu azotowego w stosunku 3 do 1. Woda królewska jest silnie żrąca i ma działanie utleniające.

- Podczas przygotowania wody królewskiej i pracy z nią noś okulary ochronne i odzież ochronną. Pracuj pod dygestorium.
- Przestrzegaj wszystkich wskazówek i zaleceń zawartych w kartach charakterystyki substancji podstawowych.



OSTROŻNIE

Niebezpieczeństwo oparzenia o gorący palnik

Plazma jest niezwykle gorąca. Również po zgaszeniu plazmy palnik jest nadal gorący. Kontakt z gorącą powierzchnią może spowodować oparzenia.

- Odczekaj 5 minut po zgaszeniu plazmy. Dopiero wtedy można dotknąć palnika.



OSTROŻNIE

Niebezpieczeństwo odniesienia obrażeń

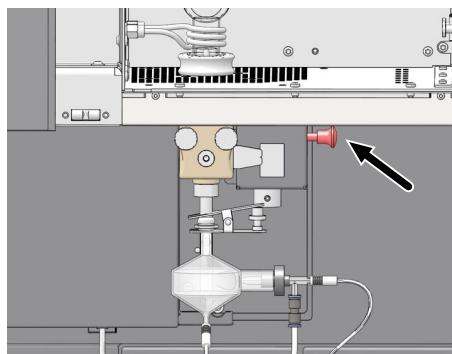
Podczas obsługi szklanych części występuje niebezpieczeństwo odniesienia obrażeń spowodowanych pękniętym szkłem.

- Ze szklanymi częściami należy obchodzić się szczególnie ostrożnie.
- Nosić antypoślizgowe rękawice z włókna szklanego, które umożliwiają pewne i bezpieczne uchwycenie.

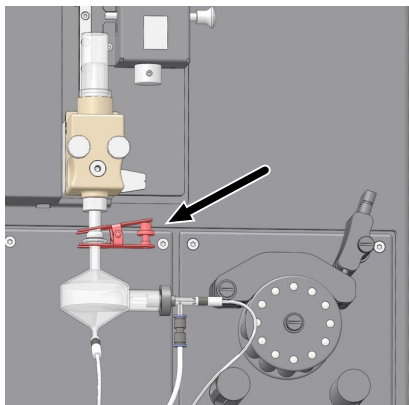
Wyczyść palnik, jeśli widoczne są zabrudzenia (osady). W zależności od macierzy próbek może to być konieczne codziennie lub w znacznie dłuższych odstępach czasu (co miesiąc).



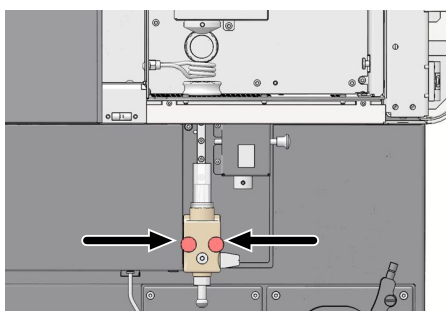
Rys. 3 Video: Czyszczenie palnika z możliwością rozmontowania (dostępne w pomocy online)



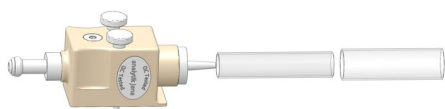
- ▶ Wyciągnij bolec sprężynowy z układu regulacji wysokości i ostrożnie pozwól saniom zjechać szyną prowadzącą w dół wraz z palnikiem.



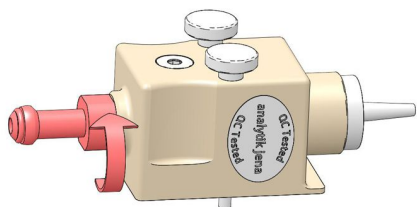
- ▶ Zdejmij zacisk widelcowy i zdejmij komorę rozpylania z rozpylaczem.
- ▶ Ostrożnie odłóż komorę rozpylania z rozpylaczem.



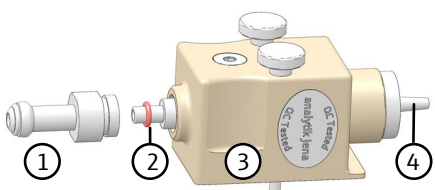
- ▶ Odkręć palnik z sań na szynie prowadzącej.



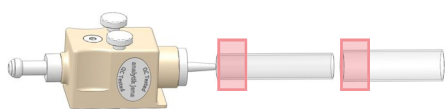
- ▶ Ostrożnie, ruchem obrotowym poluzuj kolejno z uchwyty zewnętrzną i wewnętrzną rurkę.
- ⚠ OSTROŻNIE! Rurki kwarcowe są bardzo delikatne i mocno osadzone w szlifowanym połączeniu uchwyty.. Podczas rozmontowywania palnika noś rękawice do pracy ze szkłem.



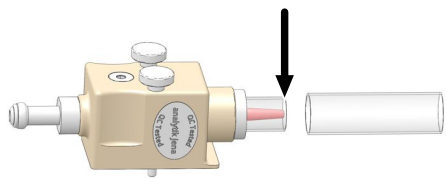
- ▶ Wykręć element łączący z uchwyty.
- ▶ Poluzuj wtryskiwacz ruchem obrotowym z elementu łączącego.
- ▶ Włóż wszystkie szklane części na ok. 12 godzin do wody królewskiej.
- ▶ Spłucz szklane części wodą dejonizowaną ($< 1 \mu\text{S}/\text{cm}$) i wysusz sprężonym powietrzem lub argonem.



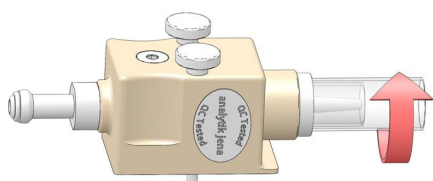
- ▶ Wciśnij o-ring (2) na około 1 cm na szeroką stronę wtryskiwacza (4).
- ▶ Włóż wtryskiwacz z o-ringiem do elementu łączącego (1).
- ▶ Wciśnij element łączący z wtryskiwaczem do uchwyty (3). Przykręć element łączący (1) do oporu. Wtryskiwacz zostaje przy tym uszczelniony i wyregulowany.



- ▶ Nasmaruj dolną ćwiartkę szlifury rurki wewnętrznej i zewnętrznej dostarczoną naoliwioną szmatką. Olej należy nakładać oszczędnie. Postaw rurki pionowo i pozwól olejowi wsiąkać przez około 2 minuty.



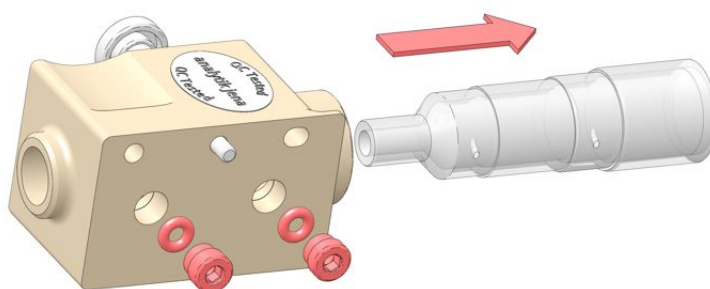
- ▶ Ostrożnie włóż wewnętrzną rurkę do oporu do szklanego korpusu w uchwycie. Przy tym lekko obracaj rurkę, aby się nie zaklinowała i uszczelniła szlif szklany.
- ▶ Końcówka wtryskiwacza musi kończyć się równo z zewnętrzną krawędzią rurki wewnętrznej. Końcówka wtryskiwacza nie może wystawać poza zewnętrzną krawędź. Końcówka nie może kończyć się więcej niż 1 mm poniżej zewnętrznej krawędzi.
- ▶ Jeśli nie uda się prawidłowo ustawić końcówki wtryskiwacza:
 - Wyciągnij rurkę wewnętrzną z uchwytu i poluzuj połączenie gwintowane elementu łączącego.
 - Wsuń wtryskiwacz w uchwyt do oporu. Trzeba przy tym pokonać niewielki opór powodowany przez uszczelnienie o-ringiem.
 - Następnie ponownie włóż rurkę wewnętrzną i sprawdź osadzenie wtryskiwacza.



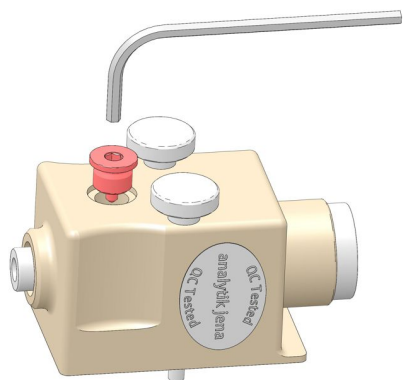
- ▶ Wprowadź rurkę zewnętrzną ruchem obrotowym do szklanego korpusu. Zwróć uwagę, aby szlif szklany się uszczelnił.
- ▶ Zamontuj z powrotem palnik.

14.3 Wymiana szklanego korpusu

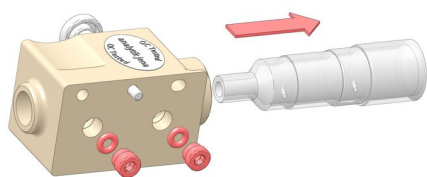
Szklany korpus palnika z możliwością rozmontowania wymaga wymiany tylko wtedy, gdy jest pęknięty. Podczas czyszczenia palnika sprawdź, czy szklany korpus nie jest zanieczyszczony cząstkami lub rozpuszczalnikami. W razie potrzeby wyczyść szklany korpus.



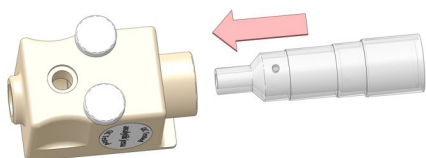
Rys. 4 Animacja: wymiana szklanego korpusu (dostępna w pomocy online)



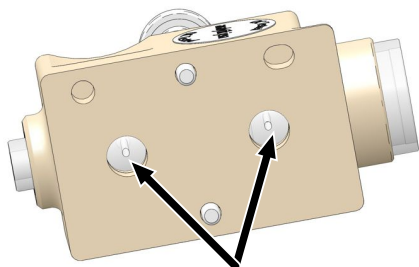
- ▶ Rozmontuj palnik zgodnie z opisem.
- ▶ Wykręć białą śrubę imbusową z przodu uchwyty. Śruba mocuje szklany korpus we właściwej pozycji.



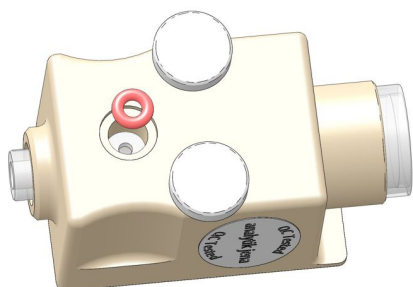
- ▶ Odkręć oba złącza zasilania argonem z tyłu uchwyty.
- ▶ Wyciągnij szklany korpus z uchwyty. Usuń ewentualne odłamki szkła.
- ▶ Wyciśnij o-ringi z uchwyty.
- ▶ Wyczyść uchwyty z kurzu i osadów.



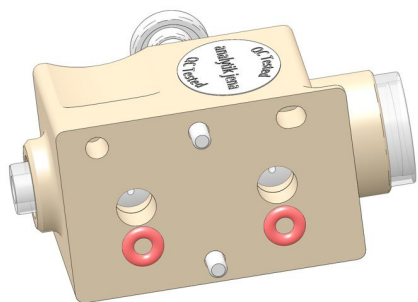
- ▶ Wsuń nowy lub wyczyszczony szklany korpus do uchwyty. Ustaw szklany korpus tak, aby pojedynczy otwór był widoczny pośrodku przedniego otworu uchwyty.



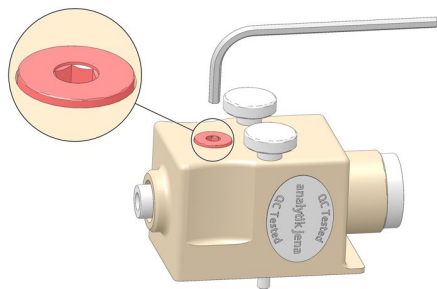
- ▶ Szklany korpus jest prawidłowo ustawiony, gdy dwa ukośne otwory wlotu argonu są wyśrodkowane w otworach z tyłu uchwyty.



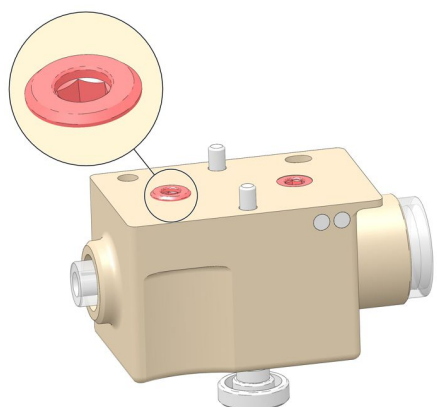
- ▶ Sprawdź o-ringi. Wymień zużyte o-ringi.



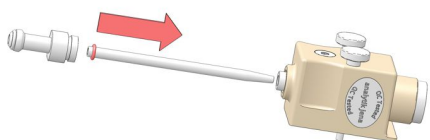
- ▶ Włóż trzy o-ringi i ostrożnie wciśnij je na szklany korpus. Z przodu uchwyty znajduje się jeden o-ring, a z tyłu dwa o-ringi.



- ▶ Wkręć białą śrubę imbusową w przedni otwór, aż będzie wystawać ok. 1 mm ponad powierzchnię uchwyty. O-ring nie może naciskać na szklany korpus. Trzpień śruby musi wchodzić do otworu szklanego korpusu i tym samym wstępnie centrować szklany korpus.
- ▶ Sprawdź, czy ukośny otwór wlotu argonu jest wyśrodkowany w stosunku do o-ringa.



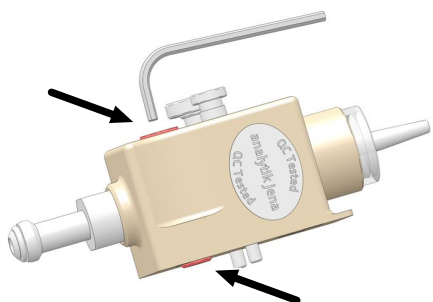
- ▶ Wkręć krótsze przyłącze gazu (ok. 7 mm) w górny otwór tak, aby kończyło się równo z powierzchnią uchwyty.
- ▶ Wkręć dłuższe przyłącze gazu (ok. 8 mm) w dolny otwór tak, aby wystawało ok. 1 mm ponad powierzchnię uchwyty.
- ▶ **i WSKAZÓWKA!** Przyłącza gazu mają różne długości i nie wolno ich zamienić.. Wkręć przyłącza gazu maksymalnie na tyle, aby kończyły się równo z powierzchnią uchwyty. W przeciwnym razie podczas wkręcania przyłączy gazowych może dojść do pęknięcia korpusu szklanego.
- ▶ Ponownie sprawdź, czy dwa ukośne otwory są wyśrodkowane w stosunku do wkręconych przyłączy gazu.



- ▶ Wciśnij o-ring o około 1 cm na wtryskiwacz.
- ▶ Wciśnij wtryskiwacz do uchwyty ruchem obrotowym.



- ▶ Przykręć element łączący do oporu do uchwyty. Wtryskiwacz zostaje przy tym uszczelniony i wyregulowany. Podczas wkręcania powinien być odczuwalny jedynie opór tarcia gwintu. Nie wywieraj nacisku na szklany korpus.



- ▶ Wkręcaj przyłącze gazu (8 mm) i białą śrubę imbusową na przemian o pół obrotu. Śruba imbusowa musi lekko wystawać. Przyłącze gazu musi kończyć się równo z górną krawędzią uchwytu.
- ▶ Aby to sprawdzić, odkręć lekko element łączący i wkręć go z powrotem.
- ▶ Przy odczuwalnym oporze w stosunku do szklanego korpusu odkręć przyłącze gazu i śrubę imbusową o ok. 1 mm i powtórz naprzemienne wkręcanie.
- ▶ Zamontuj rurkę wewnętrzną i zewnętrzną.

14.4 Konserwacja palnika jednoczęściowego



OSTRZEŻENIE

Niebezpieczeństwo oparzeń chemicznych z powodu wody królewskiej

Woda królewska to mieszanina stężonego kwasu solnego i kwasu azotowego w stosunku 3 do 1. Woda królewska jest silnie żrąca i ma działanie utleniające.

- Podczas przygotowania wody królewskiej i pracy z nią noś okulary ochronne i odzież ochronną. Pracuj pod dygestorium.
- Przestrzegaj wszystkich wskazówek i zaleceń zawartych w kartach charakterystyki substancji podstawowych.



OSTROŻNIE

Niebezpieczeństwo oparzenia o gorący palnik

Plazma jest niezwykle gorąca. Również po zgaszeniu plazmy palnik jest nadal gorący. Kontakt z gorącą powierzchnią może spowodować oparzenia.

- Odczekaj 5 minut po zgaszeniu plazmy. Dopiero wtedy można dotknąć palnika.



OSTROŻNIE

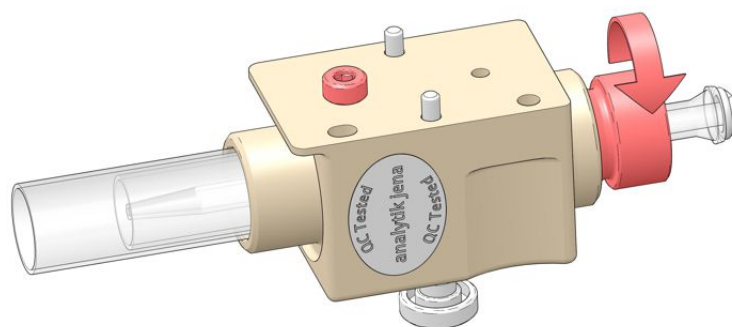
Niebezpieczeństwo odniesienia obrażeń

Podczas obsługi szklanych części występuje niebezpieczeństwo odniesienia obrażeń spowodowanych pękniętym szkłem.

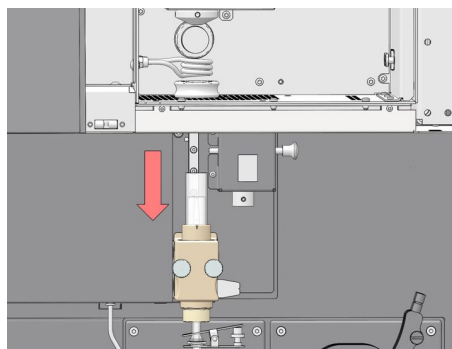
- Ze szklanymi częściami należy obchodzić się szczególnie ostrożnie.
- Nosić antypoślizgowe rękawice z włókna szklanego, które umożliwiają pewne i bezpieczne uchwycenie.

Czyszczenie palnika jednoczęściowego

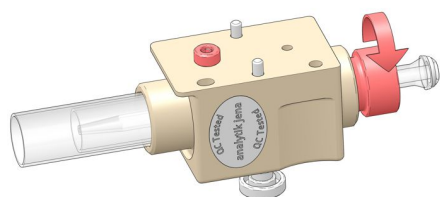
Jeśli palnik jest wyraźnie zanieczyszczony, należy go wyczyścić. Pierścienie uszczelniające wymieniaj tylko wtedy, gdy palnik nie jest gazoszczelny.



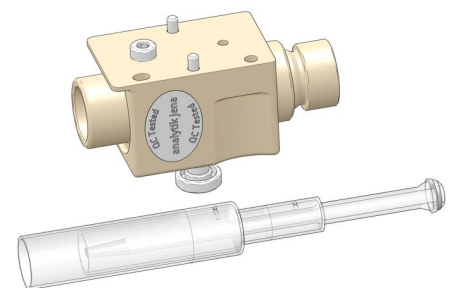
Rys. 5 Animacja: Czyszczenie palnika jednoczęściowego łącznie z wymianą pierścieni uszczelniających (dostępne w pomocy online)



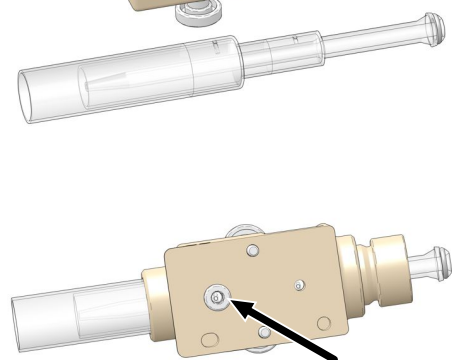
- ▶ Wyciągnij bolec sprężynowy z układu regulacji wysokości i ostrożnie pozwól saniem zjechać szyną prowadzącą w dół wraz z palnikiem.
- ▶ Zdejmij zacisk widelcowy i zdejmij komorę rozpylania. Ostrożnie wyjmij komorę rozpylania.
- ▶ Odkręć palnik od prowadnicy .



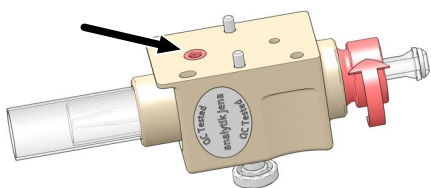
- ▶ Lekko odkręć przyłącze gazu z tyłu uchwytu.
- ▶ Poluzuj element łączący na uchwycie palnika jednym obrotem.



- ▶ Ostrożnie wyciągnij palnik jednoczęściowy z uchwytu lekkim ruchem obrotowym.
- i** WSKAZÓWKA! Palnik może być bardzo mocno osadzony w uchwycie.. Noś rękawice do pracy ze szkłem, aby bezpiecznie chwycić palnik. Nie zaklinuj palnika podczas wyciągania.



- ▶ Aby wyczyścić palnik, umieść go w wodzie królewskiej na około 12 godzin.
- ▶ Spłucz palnik wodą dejonizowaną ($< 1 \mu\text{S}/\text{cm}$) i wysusz sprężonym powietrzem lub argonem.
- ▶ Włóż palnik do oporu do uchwytu. Ustaw palnik tak, aby otwór wlotu gazu palnika znajdował się pośrodku przyłącza gazu uchwytu, patrz strzałka.



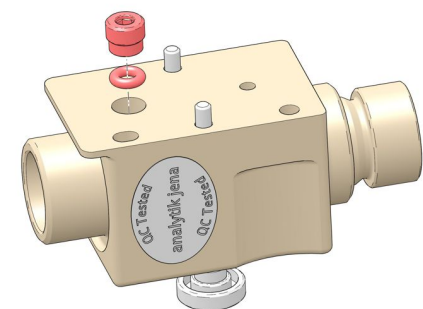
- ▶ Wkręć przyłączy gazu do uchwytu tak, aby kończyło się równo z jego powierzchnią.

i WSKAZÓWKA! Niebezpieczeństwo stłuczenia szkła!. Pod żadnym pozorem nie wkręcaj dalej przyłącza gazu.

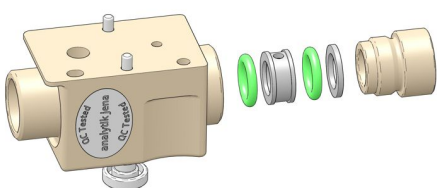
- ▶ Wkręć element łączący do oporu w uchwyt. Aby zapewnić gazoszczelność w dolnej części palnika, szczelina między śrubą zaciskową a uchwytem nie może być większa niż 0,5 mm.

Wymiana pierścieni uszczelniających

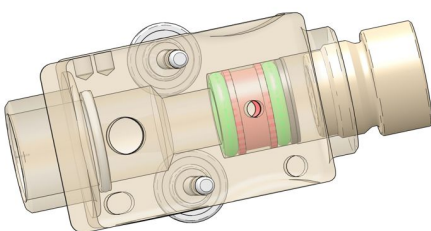
Jeśli palnik nie jest gazoszczelny, wystąpią problemy podczas zapłonu plazmy. Należy wtedy sprawdzić pierścienie uszczelniające pod kątem zużycia i wymienić je.



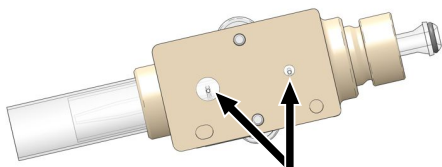
- ▶ Wyjmij palnik z uchwytu.
- ▶ Odkręć przyłączy gazu i zdejmij o-ring.



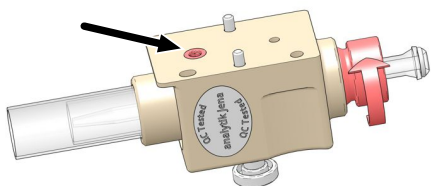
- ▶ Wykręć element łączący z uchwytu palnika.
- ▶ Wyjmij z uchwytu pierścienie dociskowy, 2 o-ringi i pierścienie dystansowy.
- ▶ Sprawdź o-ringi. Wymień zużyte pierścienie.



- ▶ Włóż z powrotem pierścienie do dolnego otworu uchwytu palnika. Przestrzegaj następującej kolejności: zielony o-ring - pierścienie dystansowy - zielony o-ring - płaski pierścienie dociskowy - śruba zaciskowa
- ▶ Obróć pierścienie dystansowy tak, aby jeden z dwóch otworów był wyrównany z małym otworem wlotu gazu w uchwycie palnika.



- ▶ Włóż palnik do oporu do uchwytu. Obróć przy tym tak, aby otwory wlotowe gazu były wyśrodkowane w otworach uchwytu.
- ▶ Włóż o-ring do większego otworu.



- ▶ Wkręć przyłączy gazu do uchwytu tak, aby kończyło się równo z jego powierzchnią.

i WSKAZÓWKA! Niebezpieczeństwo stłuczenia szkła!. Pod żadnym pozorem nie wkręcaj dalej przyłącza gazu.

- ▶ Wkręć element łączący do oporu w uchwyt. Aby zapewnić gazoszczelność w dolnej części palnika, szczelina między śrubą zaciskową a uchwytem nie może być większa niż 0,5 mm.


14.5 Czyszczenie rozpylacza

Rozpylacz musi zostać wyczyszczony, jeśli zatka się cząstkami lub z powodu wysokiego stężenia soli w próbce. Oznaką zatkania rozpylacza jest zwiększone ciśnienie gazu nośnego.



Rys. 6 Video: czyszczenie rozpylacza (dostępne w pomocy online)

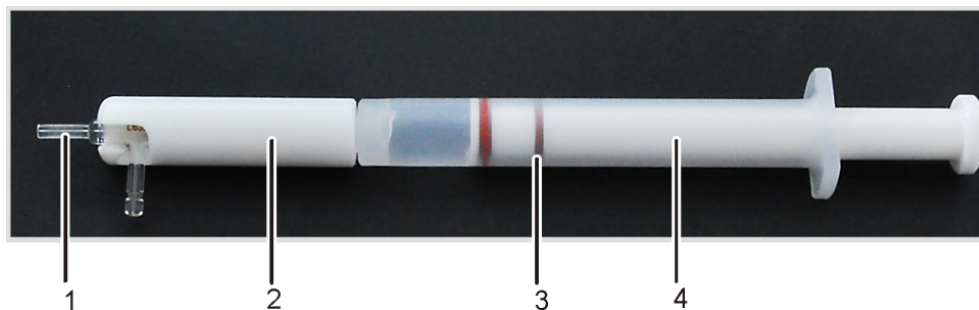
Sprawdzanie ciśnienia gazu nośnego

- ▶ Za pomocą  otwórz okno **Plasma | Control**.
- ▶ Porównaj bieżącą wartość procentową (ciśnienie) gazu rozpylającego z wartością osiągniętą po zamontowaniu nowego lub wyczyszczonego rozpylacza.
- ▶ Wyczyść rozpylacz zgodnie z poniższym opisem, jeśli wartość procentowa mocno wzrosła, np. o ponad połowę wartości początkowej, ale najpóźniej przy wartości 75%.

Czyszczenie rozpylacza

Wyczyść rozpylacz za pomocą narzędzia do czyszczenia rozpylacza. Narzędzie to można zakupić w firmie Analytik Jena. Narzędzie jest odpowiednie do standardowego rozpylacza z lub bez zainstalowanego na stałe przyłącza gazu.

Do rozpylacza PFA (HF Kit) i opcjonalnego rozpylacza ze ścieżką równoległą dostępne jest specjalne narzędzie do czyszczenia rozpylacza.



Rys. 7 Narzędzie do czyszczenia rozpylacza

- | | |
|----------------------|---------------------|
| 1 Rozpylacz | 2 Uchwyt rozpylacza |
| 3 1. czerwony o-ring | 4 Strzykawką |



OSTRZEŻENIE

Ryzyko zatrucia metanolem

Metanol jest toksyczny w przypadku wdychania, spożycia i kontaktu ze skórą. Ciecz i opary są wysoce łatwopalne.

- Podczas pracy z metanolem należy nosić okulary ochronne i odzież ochronną. Pracuj pod dygestorium.
 - Trzymaj metanol z dala od źródeł ciepła, iskier, otwartego ognia i gorących powierzchni.
 - Przestrzegaj wszystkich wskazówek i zaleceń zawartych w karcie charakterystyki.
-
- ▶ Odkręć strzykawkę od uchwytu rozpylacza.
 - ▶ Włóż rozpylacz do uchwytu. Wsuń najpierw czubek rozpylacza do uchwytu na tyle, aż boczne przyłącze gazu nośnego znajdzie się w rowku uchwytu.
 - ▶ Napełnij strzykawkę metanolem. Wyciągnij przy tym tłok do 1. czerwonego o-ringa.
 - ▶ Przykręć strzykawkę na uchwyt rozpylacza.
 - ▶ Trzymaj narzędzie do czyszczenia rozpylacza nad pojemnikiem zbiorczym i wciśnij tłok do strzykawki. Metanol powinien wypływać z obu króćców przyłączeniowych.
 - ▶ Aby usunąć z rozpylacza przyłączone cząstki:
 - Zamknij palcem wlot próbki, aby wypłukać cząstki z króćca gazu nośnego.
 - Następnie zamknij palcem króciec gazu nośnego. Zwiększa to ciśnienie na wlocie próbki.
 - ▶ Odkręć strzykawkę od uchwytu rozpylacza. Wciągnąć powietrze do strzykawki.
 - ▶ Przykręć strzykawkę z powrotem na uchwyt rozpylacza.
 - ▶ Wciśnij tłok w strzykawkę, aby usunąć pozostałości metanolu z rozpylacza.
 - ▶ Wyjmij rozpylacz z uchwytu. Podłącz rozpylacz do komory rozpylania.
 - ▶ Zanim rozpylacz zostanie użyty do następnej analizy, argon powinien przepływać przez rozpylacz przez co najmniej 3 minuty.

14.6 Czyszczenie i odkażanie komory próbki i komory plazmy

Operator jest odpowiedzialny za zapewnienie przeprowadzenia odpowiedniej dekontaminacji, jeśli urządzenie zostało zanieczyszczone niebezpiecznymi substancjami z zewnątrz lub wewnątrz. Podczas pracy z materiałem zakaźnym zachowaj szczególną ostrożność i czystość, ponieważ nie można odkazić urządzenia w całości.

- ▶ Zgaś plazmę za pomocą oprogramowania. Po zgaszeniu plazmy poczekaj co najmniej 5 minut przed dotknięciem elementów w komorze plazmy.
 - ⚠ OSTROŻNIE! Niebezpieczeństwo poparzenia o gorące elementy w komorze plazmy..
- ▶ Komorę próbki i komorę plazmy czyść codziennie wilgotną, niekapiącą ściereczką. W przypadku mocniejszych zabrudzeń użyj dostępnego w sklepach środka powierzchniowo czynnego.
- ▶ Rozpryski, krople lub rozlane substancje usuwaj natychmiast za pomocą materiałów chłonnych, takich jak wata, chusteczki laboratoryjne lub celuloza.

- ▶ W przypadku skażenia biologicznego przetrzyj odpowiednie miejsca odpowiednim środkiem dezynfekującym, np. roztworem Incidin-Plus. Następnie wytrzyj wyczyszczane miejsca do sucha.
- ▶ Obudowa nadaje się tylko do dezynfekcji przez przetarcie ściereczką. Jeśli środek dezynfekujący ma rozpylacz, nanieś środek na odpowiednie ściereczki.

Wyczyść okna komory plazmy i stożek, jeśli elementy te są w widoczny sposób zanieczyszczone osadami próbki.

- ▶ Przetrzyj okno i stożek wilgotnym ręcznikiem papierowym.
- ▶ Osusz ręcznikiem papierowym.

14.7 Czyszczenie i wymiana okien komory plazmy

Znajdujące się w komorze plazmy okna przed transferowym układem optycznym muszą zostać wymienione, jeśli ich transmisja ulegnie znacznemu pogorszeniu, szczególnie w zakresie UV. W większości przypadków czyszczenie okien nie przywraca całkowicie przepuszczalności promieni UV. Efekt czyszczenia różni się w zależności od długości fali. W próżni UV należy spodziewać się strat na poziomie około 30%. W widocznym obszarze można zazwyczaj w pełni przywrócić przezroczystość.



OSTRZEŻENIE

Niebezpieczeństwo oparzeń chemicznych z powodu wody królewskiej

Woda królewska to mieszanina stężonego kwasu solnego i kwasu azotowego w stosunku 3 do 1. Woda królewska jest silnie żrąca i ma działanie utleniające.

- Podczas przygotowania wody królewskiej i pracy z nią noś okulary ochronne i odzież ochronną. Pracuj pod dygestorium.
- Przestrzegaj wszystkich wskazówek i zaleceń zawartych w kartach charakterystyki substancji podstawowych.



OSTROŻNIE

Niebezpieczeństwo poparzenia o cewkę indukcyjną i palnik

Plazma jest niezwykle gorąca. Nawet po zgaszeniu plazmy cewka indukcyjna i palnik są nadal bardzo gorące. Kontakt z gorącą powierzchnią może spowodować oparzenia.

- Przed serwisowaniem okien komory plazmy należy zgasić plazmę za pomocą oprogramowania.
- Odczekaj 5 minut po zgaszeniu plazmy. Dopiero wtedy wykonaj prace w komorze plazmy.



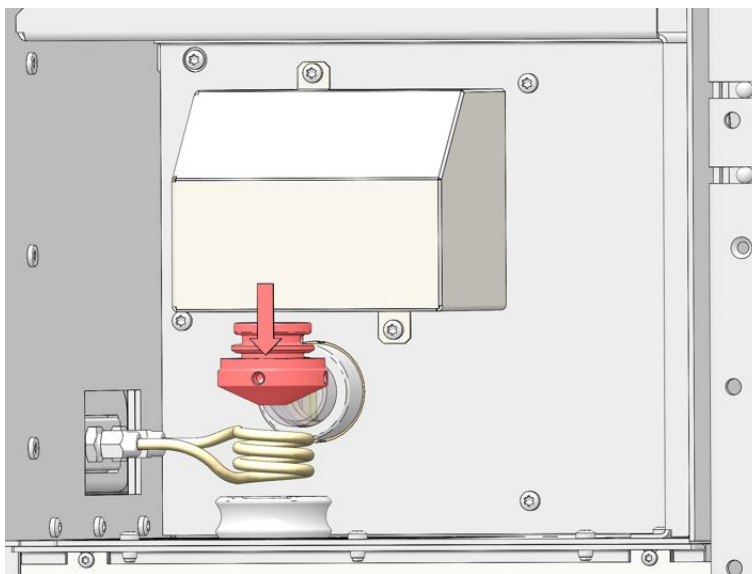
WSKAZÓWKA

Zagrożenia dla okien kwarcowych spowodowane przez pot z dłoni i ultradźwięki

Odciski palców wypalają się na powierzchni okien kwarcowych i pogarszają ich przepuszczalność.

- Nie dotykaj powierzchni okien kwarcowych palcami. Natychmiast zetrzyj odciski palców etanolem.
- Nie czyść okien kwarcowych w kąpeli ultradźwiękowej. Może to zmniejszyć przepuszczalność promieni UV przez okna.

Czyszczenie okien



Rys. 8 Animacja: czyszczenie i wymiana okien w komorze plazmy (dostępne w pomocy online)

- ▶ Przed dokładnym czyszczeniem zdemontuj z urządzenia okna, patrz opis.
- ▶ Wyczyść okna wodą i dostępnym w sklepach środkiem powierzchniowo czynnym oraz wacikiem.
- ▶ Opcjonalnie wyczyść okna wodą królewską.
 ⚠ **OSTRZEŻENIE!** Przestrzegaj wskazówek bezpieczeństwa dotyczących obchodzenia się ze stężonymi kwasami.
- ▶ Opłucz oczyszczone okna wodą.
- ▶ Wysusz w strumieniu gazu (argonu lub sprężonego powietrza).

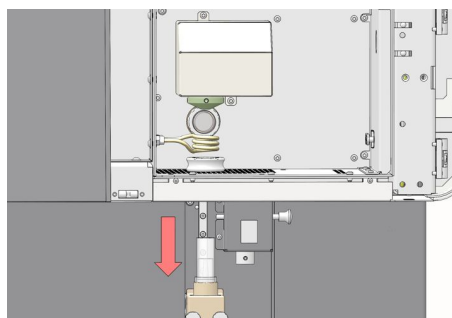
Kontrola przepuszczalności



Po czyszczeniu należy sprawdzić przepuszczalność okien w zakresie UV.

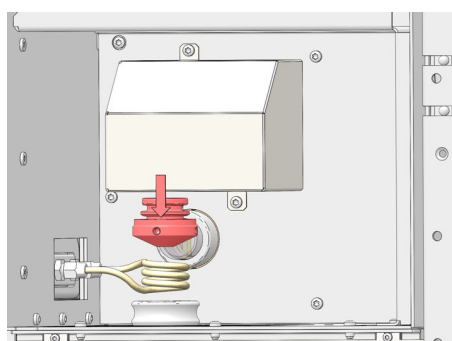
- ▶ Wybierz metodę rutynową.
- ▶ Wybierz 3 linie: jedną w niskim zakresie UV, jedną w średnim zakresie długości fali i jedną w wysokim zakresie długości fali.
- ▶ Zmierz dla próbki QC intensywność przy tych 3 długościach fali i wprowadź wyniki do karty QC lub tabeli.
- ▶ Jeśli wymagane granice wykrywalności nie są osiągnięte, wyczyść lub wymień okna.

Konserwacja okna w stożku

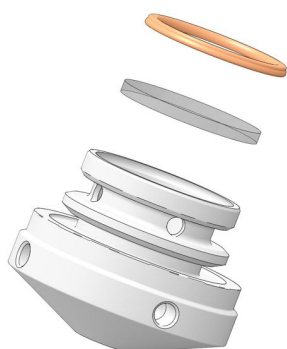
Okno w stożku służy do obserwacji osiowej.



- ▶ Przed czyszczeniem: Zgaś plazmę za pomocą oprogramowania ASpect PQ, klikając  na pasku narzędzi. Alternatywnie za pomocą  otwórz okno **Plasma** i kliknij **Plasma off**. Pozostaw cewkę indukcyjną i palnik do ostygnięcia przez 5 minut.
- ▶ W oprogramowaniu, w oknie **Spectrometer**, w zakładce **Parameters** aktywuj szybkie płukanie układu optycznego za pomocą przycisku **on**. Płukanie zapobiega zanieczyszczeniu spektrometru powietrzem laboratoryjnym. Jeśli to możliwe, podczas czyszczenia należy wyłączyć laboratoryjny system wyciągowy.
- ▶ Przesuń palnik w dół z pozycji roboczej. Ten środek ostrożności zapobiega uszkodzeniu szklanych części podczas montażu stożka.



- ▶ Wyczyść stożek wilgotną szmatką i wysusz.
- ▶ Odkręć stożek, obracając go w prawo za pomocą dostarczonego klucza hakowego. Jeśli okno skleiło się z ramą, patrz opis poniżej.
- ▶ Jeśli to możliwe, zamknij otwór układu optycznego podczas czyszczenia, np. folią z tworzywa sztucznego, aby zapobiec zanieczyszczeniu układu optycznego.





- ▶ Wyczyść lub wymień okno.
- ▶ Włóż nowe lub wyczyszczone okno do stożka i załóż pierścień uszczelniający.
- ▶ Wymień zużyty pierścień uszczelniający.
- ▶ Mocno wkręć stożek w otwór stożka w komorze plazmy.
i WSKAZÓWKA! Jeśli stożek jest luźny, nie jest wystarczająco chłodzony i szybko koroduje..

Jeśli okno skleiło się z ramą:

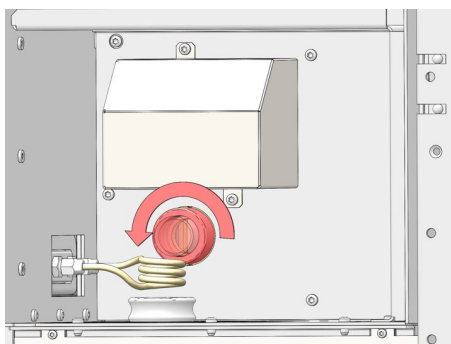
- ▶ Trzymaj jedną rękę w rękawicy pod otworem stożka.
- ▶ Ostrożnie włóż paznokieć (w rękawicy) lub patyczek (drewniany lub plastikowy) w szczelinę między oknem a ramą i podważ okno. Okno wypada w dół.
- ▶ Złap spadające okno.
- ▶ Wyjmij pierścień uszczelniający z ramy.

Konservacja okien poziomych

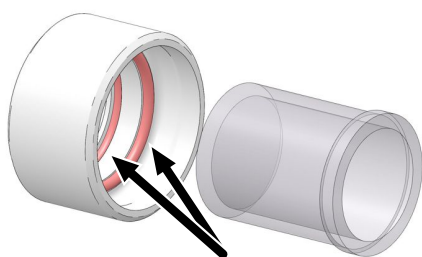
Okno poziome służy do obserwacji promieniowej.

- ▶ Przed czyszczeniem: Zgaś plazmę za pomocą oprogramowania ASpect PQ, klikając  na pasku narzędzi. Alternatywnie za pomocą  otwórz okno **Plasma** i kliknij **Plasma off**. Pozostaw cewkę indukcyjną i palnik do ostygnięcia przez 5 minut.
- ▶ W oprogramowaniu, w oknie **Spectrometer**, w zakładce **Parameters** aktywuj szybkie płukanie układu optycznego za pomocą przycisku **on**. Płukanie zapobiega zanieczyszczeniu spektrometru powietrzem laboratoryjnym. Jeśli to możliwe, podczas czyszczenia należy wyłączyć laboratoryjny system wyciągowy.

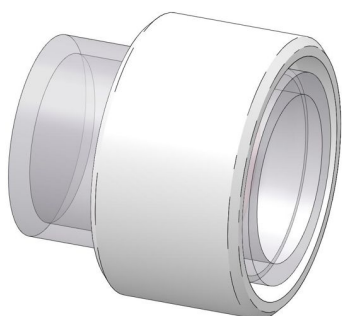
- ▶ Przesuń palnik w dół z pozycji roboczej. Ten środek ostrożności zapobiega uszkodzeniu szklanych części podczas montażu stożka.



- ▶ Zdejmij stożek z oknem, aby uzyskać lepszy dostęp do poziomego okna.
- ▶ Odkręć uchwyt okna w lewo.
- ▶ Wypchnij okno z uchwytu.
- ▶ W razie potrzeby wyczyść okna:
 - Wyczyść wodą i dostępnym w sklepach środkiem powierzchniowo czynnym przy użyciu wacika.
 - Przepłucz wodą i wysusz w strumieniu gazu (argonu lub sprężonego powietrza).



- ▶ Sprawdź pierścienie uszczelniające pod kątem zużycia i wymień je w razie potrzeby.



- ▶ Włóż nowe lub wyczyszczone okno do uchwytu. Wskazówka na temat osadzenia okna znajduje się poniżej. Nie dotykaj powierzchni czołowych palcami. Powierznię czołową można zakryć dołączoną osłoną, aby zapobiec zanieczyszczeniu podczas wkładania.
- ▶ Wkręć uchwyt z powrotem w otwór komory plazmy urządzenia.

Wskazówka na temat osadzenia poziomego okna:

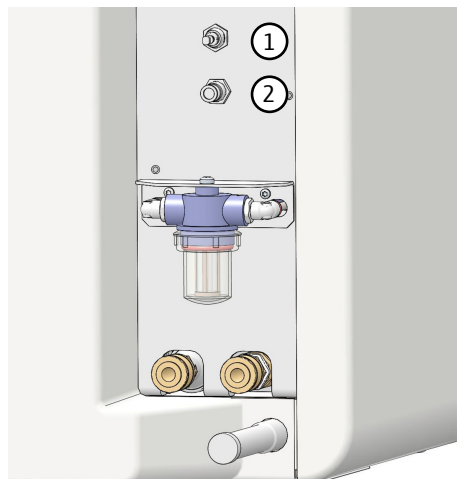
- Okno można różnie umieszczać w uchwycie. Uchwyt jest skonstruowany tak, że okno można przesunąć o 9,5 mm w celu optymalnego ustawienia.
- Przesuń okno jak najdalej do tyłu, aby nalot na oknie powodowany przez plazmę był jak najmniejszy.
- Tylko jeśli chcesz osiągnąć jak najniższe granice wykrywalności w UV próżniowym przy obserwacji promieniowej, przesuń okno jak najbliżej palnika. Istnieje jednak ryzyko, że okno szybciej pokryje się nalotem, powodując niestabilność. Dlatego lepiej jest dokonywać pomiarów w UV próżniowym z obserwacją osiową, aby osiągnąć najniższe możliwe limity wykrywalności.

14.8 Kontrola szczelności instalacji gazowej

Sprawdzaj szczelność co tydzień i za każdym razem, gdy urządzenie zostanie odłączone od systemu zasilania gazem. W tym celu zamknij zawór odcinający systemu zasilania gazem i sprawdź ciśnienie na podłączonym za nim manometrze. Jeśli ciśnienie mocno spada, poszukaj nieszczelności w systemie zasilania gazem.

- ▶ Otwórz zawór odcinający.

- ▶ Nanieść na przyłącza pędzelkiem silnie pieniący się płyn (np. roztworem mydła). Jeśli podczas uruchamiania na przyłączach gazowych tworzą się pęcherzyki piany, odłącz dopływ gazu.
- ▶ Sprawdź osadzenie przyłącza gazu. Odkręć szybkozłączkę i sprawdź pierścień uszczelniający. Wymień zużyte pierścienie uszczelniające.
- ▶ Ponownie włóż wąż do przyłącza gazu, zwracając uwagę na prawidłowe osadzenie, i ponownie sprawdź szczelność.



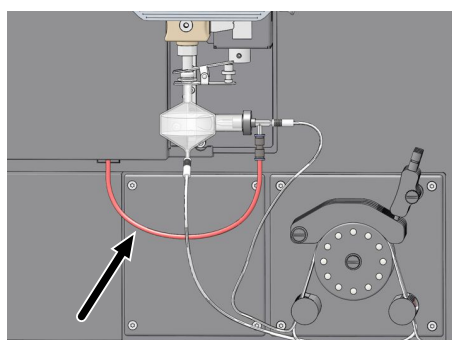
Rys. 9 Przyłącza gazu

1 Gaz dodatkowy (tlen)

2 Argon

14.9 Wymiana węża argonu

Wąż doprowadzający argon do rozpylacza może z czasem ulec przebarwieniu. W takim przypadku należy wymienić wąż.



- ▶ Odłącz wąż argonu od przyłącza w komorze próbki. W tym celu należy wciśnij kolorowy pierścień złącza wtykowego w górę i odłącz wąż w dół.
- ▶ Odłącz wąż argonu wraz ze złączem wtykowym od wlotu gazu rozpylacza. Albo: Odkręć wąż argonu wraz ze złączem śrubowym od rozpylacza.
- ▶ Podłącz nowy wąż ze złączem wtykowym do rozpylacza.
- ▶ Podłącz wąż argonu do złącza w komorze próbki.

14.10 Wymiana filtra powietrza

Filtr wlotu powietrza znajduje się w szufladzie z przodu urządzenia. Sprawdzaj filtr raz w miesiącu i wymieniaj go, jeśli jest mocno zabrudzony. W szczególności sprawdzaj, czy spód filtra nie jest zabrudzony.

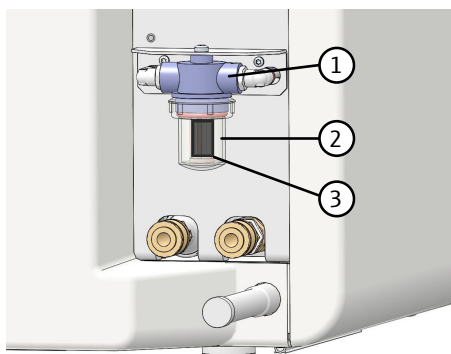
Mocno zabrudzony filtr może ograniczyć odprowadzanie ciepła z urządzenia. Przegrzanie może spowodować uszkodzenie podzespołów.



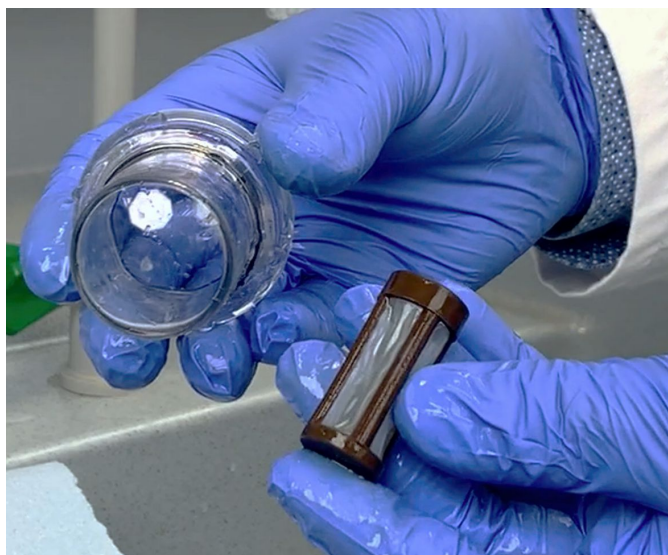
- ▶ Wyjmij tackę na próbki.
- ▶ Otwórz szufladę.
- ▶ Wyciągnij zabrudzone filtry z uchwytu w szufladzie.
- ▶ Włóż nowe filtry do szuflady.
- ▶ Wsuń szufladę z powrotem do urządzenia.
- ▶ Ponownie przymocuj tackę na próbki do urządzenia za pomocą kołków pasowanych.

14.11 Wymiana filtra wody

Filtr wody znajduje się z tyłu urządzenia. Raz w miesiącu sprawdź, czy wkład filtra nie jest zabrudzony, i w razie potrzeby wyczyść go. Wkład należy wymieniać co najmniej raz w roku lub jeśli jest mocno zabrudzony. Używaj wyłącznie wkładów filtra oferowanych przez Analytik Jena.



- ▶ Wyłącz urządzenie podstawowe i chłodnicę obiegową za pomocą przełącznika zasilania
- ▶ Przygotuj dużą zlewkę.
- ▶ Odkręć pojemnik filtra (2) w prawo od filtra wody (1) Trzymaj pod spodem ręcznik papierowy.
- ▶ Wstaw pojemnik filtra do zlewki.
- ▶ Wyjmij wkład filtra (3).
- ▶ Wypłucz pojemnik filtra i wkład pod bieżącą wodą. W razie potrzeby wymień wkład.
- ▶ Włóż nowy lub wyczyszczony wkład filtra od dołu do filtra wody. Przykręć z powrotem pojemnik filtra.



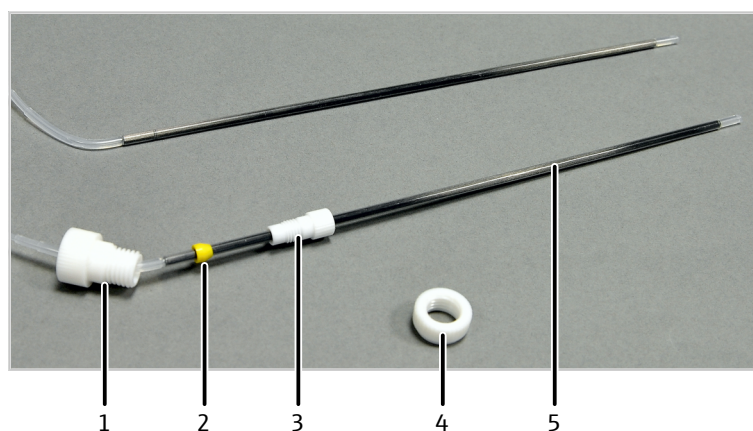
Rys. 10 Video: czyszczenie filtra wody pod bieżącą wodą (dostępne w pomocy online).

14.12 Konservacja autosamplera ASPQ 3300

14.12.1 Wymiana kaniuli i wężyka próbki

Autosamplery są dostarczane z kaniulą, do której przymocowany jest wężyk próbki. Kaniulę i wężyk próbki zawsze wymienia się razem.

- ▶ Wyłącz autosampler za pomocą przełącznika zasilania.
- ▶ Rozłącz połączenie między wężykiem próbki autosamplera a urządzeniem podstawowym.
- ▶ Ostrożnie wyciągnij wężyk próbki z przewodnic węża na autosamplerze.
- ▶ Wykręć kaniulę z uchwytu na autosamplerze. Wyjmij kaniulę z wężykiem próbki i złączkami z uchwytu na autosamplerze.
- ▶ Przygotuj nową kaniulę z wężykiem próbki:
 - Włóż element łączący (1) na wężyk próbki.
 - Wsuń stożkowy stożek uszczelniający na kaniulę wąską stroną w dół. Ustaw stożek uszczelniający w pobliżu górnej krawędzi kaniuli.
 - Wsuń śrubę drążoną (3) od dołu na kaniulę. Skręć śrubę drążoną z elementem łączącym (1).
- ▶ Włóż kaniulę do uchwytu autosamplera. Przymocuj kaniulę od dołu do uchwytu za pomocą elementu łączącego (4). W tym celu skręć ze sobą elementy łączące (1) i (4).
- ▶ Przelóż wężyk próbki przez przewodnice wężyka na autosamplerze .



Rys. 11 Wymiana kaniuli i wężyka próbki autosamplera

- | | |
|--|--|
| 1 Element łączący (mocowanie do uchwytu) | 2 Stożek uszczelniający |
| 3 Śruba drążona | 4 Element łączący (mocowanie do uchwytu) |
| 5 Kaniula z wężykiem próbki (jednoczęściowa) | |

14.12.2 Wymiana węży pompy płuczącej



OSTROŻNIE

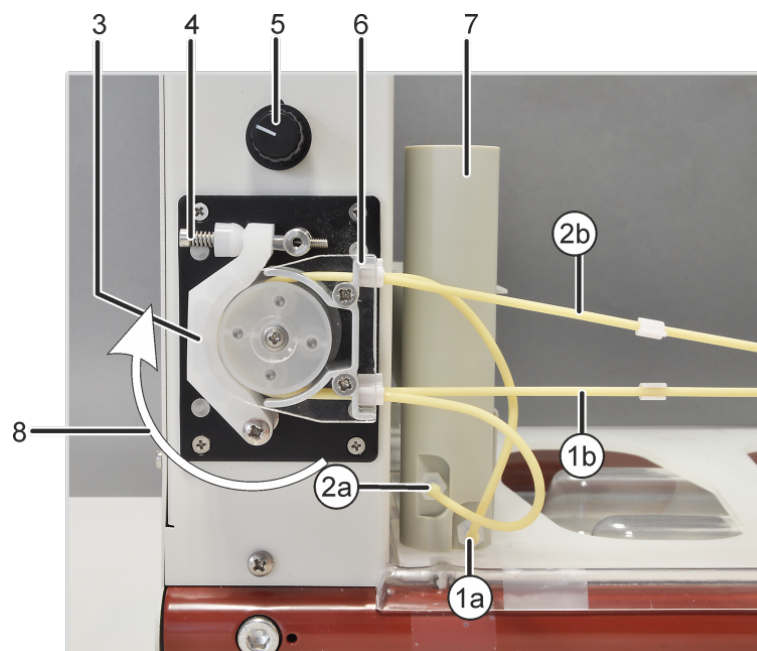
Niebezpieczeństwo oparzeń chemicznych podczas wymiany węży

W węzłach mogą się nadal znajdować niewielkie ilości kwaśnych roztworów.

- Podczas wymiany węży należy nosić rękawice ochronne i odzież ochronną.
- Zebrać wyciekającą ciecz za pomocą chłonnej ściereczki.

Wymiana węży

- ▶ Wyłącz autosampler za pomocą przełącznika zasilania.
- ▶ Postaw płaski pojemnik lub połóż chłonny materiał pod naczyniem do płukania.
- ▶ Zwolnij pałąki zaciskowe na pompie i rozłóż w dół.
- ▶ Poluzuj węże pompy i wyciągnij je z przyłączy naczynia do płukania.
- ▶ Wyciągnij węże łączące roztworu płuczającego i odpadów z węży pompy.
- ▶ Podłącz węże pompy roztworu płuczającego do dolnego króćca wlotowego (1a) naczynia do płukania. Załóż węże pompy od góry na blok węży i zaciśnij go między dwoma stoperami. Podłącz węże ssawny roztworu płuczającego do drugiego końca węży (1b). Zanurz węże ssawny w roztworze płuczającym.
- ▶ Podłącz węże pompy do odpadów do górnego króćca wylotowego (2a) naczynia do płukania. Załóż węże pompy od dołu na blok węży i zaciśnij go między dwoma stoperami. Podłącz węże odpadów do drugiego końca węży (2b). Włóż węże odpadów do butelki na odpady.
 - i** WSKAZÓWKA! Zwróć uwagę na kierunek pompowania! Pompa obraca się w prawo.
- ▶ Zamocuj pałąk zaciskowy z dźwignią dociskową nad węzłami pompy.
- ▶ Sprawdź wydajność tłoczenia i w razie potrzeby wyreguluj za pomocą docisku lub prędkości pompy.



Rys. 12 Naczynie do płukania i pompa na autosamplerze

- | | |
|--|-------------------------------------|
| 1a Króciec wlotowy roztworu płuczącego na naczyniu płuczącym | 1b Wąż roztworu płuczącego |
| 2a Przyłącze odpadów na naczyniu płuczącym | 2b Wąż do zbiornika na odpady |
| 3 Pałęk mocujący | 4 Dźwignia dociskowa ze sprężyną |
| 5 Regulator prędkości pompy | 6 Blok węży do mocowania węży pompy |
| 7 Naczynie do płukania | 8 Kierunek pompowania |

Ustawianie docisku i natężenia przepływu

Dźwignia dociskowa służy do ustawiania efektywnego ciśnienia na wężu. Aby zmaksymalizować żywotność węży i wydajność pompy, należy ustawić docisk w następujący sposób:

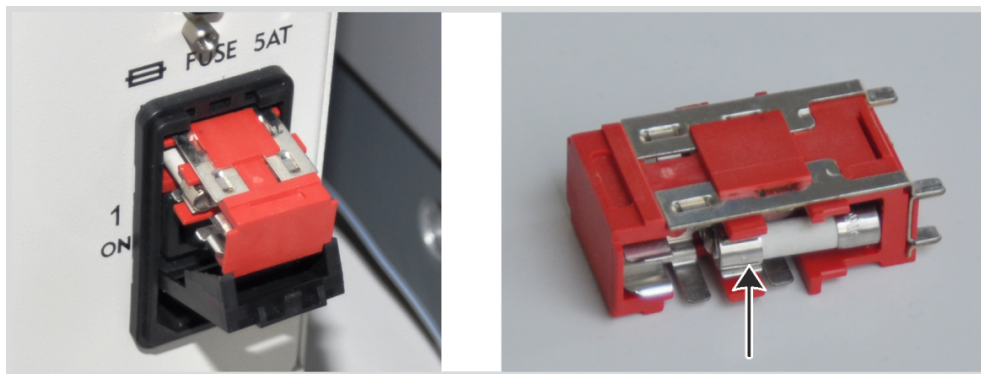
- ▶ Poluzuj śrubę na dźwigni dociskowej, aż pałęk zaciskowy przestanie naciskać na węż.
- ▶ Zanurz węż ssawny w roztworze płuczącym. Włóż węż odpadów do butelki na odpady.
- ▶ Włącz urządzenie podstawowe i autosampler za pomocą przełącznika zasilania. Uruchom oprogramowanie sterujące.
- ▶ Kliknij przycisk **Autosampler** i przejdź do zakładki **Function tests** w oknie **Autosampler**. Aktywuj opcję **Wash pump** i zamknij okno za pomocą **OK**.
- ▶ Dokręć śrubę na dźwigni dociskowej, aż zaczną płynąć roztwór płuczący. Dokręć śrubę jeszcze o jeden obrót.
- ▶ W ten sam sposób ustaw docisk na wężu pompy do odpadów.
- ▶ Ustaw pokręteł natężenie przepływu pompy. Poziom cieczy w autosamplerze powinien pozostać stały. Nie powinna przelewać się zbyt duża ilość cieczy płuczącej.
- ▶ W oknie **Autosampler** dezaktywuj opcję **Wash pump**.

14.12.3 Wymiana bezpieczników

Wymień bezpieczniki w autosamplerze w następujący sposób:

- ▶ Wyłącz autosampler za pomocą przełącznika zasilania.

- ▶ Wyciągnij uchwyt bezpieczników. W tym celu należy wsunąć ostrze śrubokręta w szczelinę uchwytu bezpieczników i ostrożnie podważyć uchwyt.
- ▶ Wymień uszkodzone bezpieczniki sieciowe. Używaj wyłącznie bezpieczników typu T 5 A H 250 V, 5 x 20 mm.
- ▶ Włóż bezpiecznik do zacisku oznaczonego strzałką (patrz rysunek).
- ▶ Podłącz wtyczkę zasilania i wtyczkę szeregową (HOST) do autosamplera.
- ▶ Włącz autosampler za pomocą wyłącznika sieciowego.



Rys. 13 Wymiana bezpieczników w autosamplerze

14.13 Konserwacja chłodnicy obiegowej: wymiana wody chłodzącej



OSTRZEŻENIE

Szkody dla zdrowia spowodowane przez dodatek do wody chłodzącej

Stosowany biocyd jest żrący i może powodować uczulenie w kontakcie ze skórą.

- Podczas pracy z dodatkiem do wody chłodzącej należy nosić okulary ochronne i odzież ochronną, a zwłaszcza rękawice ochronne.
- Przestrzegaj wszystkich wskazówek i zaleceń zawartych w karcie charakterystyki.



WSKAZÓWKA

Niebezpieczeństwo uszkodzenia urządzenia z powodu korozji i rozwoju glonów

Tylko stosowanie dodatku do wody chłodzącej pozwala skutecznie zapobiec uszkodzeniom urządzenia spowodowanym korozją lub skażeniem biologicznym. Uszkodzenia urządzenia spowodowane eksploatacją urządzenia bez dodatku do wody chłodzącej nie są objęte gwarancją.

- Wodę chłodzącą należy zawsze przygotowywać poprzez zmieszanie z dodatkiem do wody chłodzącej (418-13-410-540) dostarczanym przez Analytik Jena.

Woda chłodząca musi być wymieniana co najmniej raz w roku. Woda chłodząca musi być zawsze wymieniana, gdy przewodność wzrośnie powyżej 50 ... 200 $\mu\text{S}/\text{cm}$.

- ⇒ Wymagane środki pomocnicze: 10 l wody destylowanej/dejonizowanej, zestaw dodatków do wody chłodzącej do chłodnic obiegowych, odpowiedni pojemnik do mieszania wody chłodzącej wykonany ze szkła, tworzywa sztucznego lub stali nierdzewnej, wiadro na spuszczonego płynu chłodzącego

- ▶ Rozpuść zawartość obu butelek zestawu dodatków do wody chłodzącej (biocydu i środka antykorozyjnego) w 10 litrach wody.
- ▶ Uruchom kreator zmiany wody chłodzącej w oprogramowaniu sterującym ASpect PQ. W tym celu wybierz pozycję menu **Extras | Maintenance** i kliknij przycisk **Change**.
- ▶ Postępuj zgodnie z instrukcjami kreatora:
 - Wyłącz chłodnicę obiegową.
 - Odłącz przyłącze powrotu wody chłodzącej na chłodnicy obiegowej i przytrzymaj wąż w naczyniu zbiorczym (wiadrze).
 - Włącz ponownie chłodnicę obiegową i pozwól jej pracować, aż zakończy się przepływ wody chłodzącej i będzie się wydobywać tylko mgiełka.
 - Podłącz ponownie wąż do przyłącza powrotu wody chłodzącej na chłodnicy obiegowej.
 - Wykręć korek z otworu wlewu zbiornika i włóż lejek.
 - Wlej płyn chłodzący do zbiornika aż do osiągnięcia oznaczenia poziomu.
 - Włącz chłodnicę obiegową i obserwuj wskazanie poziomu. Gdy pompa pracuje, poziom się obniża.
 - Powoli kontynuuj napełnianie zbiornika płynem chłodzącym, aż poziom ustabilizuje się nieco poniżej znaku.
 - Wyjmij lejek i zamknij otwór wlewu korkiem.
 - Potwierdź zamknięcie w kreatorze.
- ▶ Poczekaj na komunikat w kreatorze, że płyn chłodzący został wymieniony.
- ▶ Zamknij kreator.

15 Załącznik

15.1 Przegląd oznaczeń na wskazaniu wartości

| Uwaga | Znaczenie | Wartości | Wyświetlanie |
|-----------------------------|--|----------------------------|---|
| > Kal | Średnia próbki jest większa niż zakres roboczy krzywej kalibracji | Średnie | Okno przebiegu i wyników |
| < Kal | Średnia próbki jest mniejsza niż zakres roboczy krzywej kalibracji | Średnie | Okno przebiegu i wyników |
| < NWG | Wartość próbki jest mniejsza niż granica wykrywalności | Średnie | Okno przebiegu i wyników |
| < BG | Wartość próbki jest mniejsza niż granica oznaczalności i większa niż granica wykrywalności. | Średnie | Okno przebiegu i wyników |
| RSD! | Średnia próbki lub średnia wzorca znajduje się poza zakresem zadanego względnego odchylenia standardowego | Średnie | Okno przebiegu i wyników |
| RR! | Średnia próbki lub średnia wzorca jest poza zakresem zadanego zakresu względnego | Średnie | Okno przebiegu i wyników |
| Faktor! | Przekroczenie granicy współczynnika rekalkulacji dla krzywej kalibracji | Krzywa kalibracji | Okno przebiegu i wyników |
| R ₂ (adj.) lub R | Współczynnik determinacji regresji R ₂ (adj.) lub R (w zależności od wyboru w oknie Options Analysis sequence) krzywej kalibracji spadł poniżej zadanej wartości. | Krzywa kalibracji | Okno przebiegu i wyników Okno Calibration |
| #MAN. | Pojedyncza wartość próbki lub pojedyncza wartość wzorca została ręcznie wykluczona z obliczeń średnich próbki | Pojedyncze wartości próbek | Okno Sample single values |
| #KOR. | Pojedyncza wartość próbki lub pojedyncza wartość wzorca została automatycznie wykluczona z obliczeń średnich próbki przez test wartości odstających Grubbsa | Pojedyncze wartości próbek | Okna Sample single values |