

Istruzioni per l'uso

ASpect PQ



Produttore Analytik Jena GmbH+Co. KG
Konrad-Zuse-Straße 1
07745 Jena / Deutschland
Telefono: +49 3641 77 70
Fax: +49 3641 77 9279
e-mail: info@analytik-jena.com

Servizio di assistenza tecnica Analytik Jena GmbH+Co. KG
Konrad-Zuse-Straße 1
07745 Jena / Deutschland
Telefono: +49 3641 77 7407
Fax: +49 3641 77 9279
e-mail: service@analytik-jena.com



Per un uso corretto e sicuro, seguire le presenti istruzioni da conservare per futuri riferimenti.

Informazioni generali <http://www.analytik-jena.com>

Numero della documentazione /

Edizione B (06/2023)

Documentazione tecnica Analytik Jena GmbH+Co. KG

© Copyright 2023, Analytik Jena GmbH+Co. KG

Indice

1	Software ASpect PQ.....	7
1.1	Avvio e arresto di ASpect PQ.....	7
1.1.1	Avvio di ASpect PQ	7
1.1.2	Apertura di una seconda finestra del programma ASpect PQ	10
1.1.3	Bloccaggio di ASpect PQ.....	10
1.1.4	Arresto di ASpect PQ	10
1.2	Informazioni generali sul funzionamento.....	11
1.2.1	Lo spazio di lavoro	11
1.2.2	Funzione Help	12
1.2.3	Descrizione delle barre del menu, degli strumenti e delle icone	12
1.2.4	Comandi di uso comune	14
2	Fogli di lavoro	17
2.1	Creazione di un nuovo foglio di lavoro	18
2.2	Modifica del foglio di lavoro	19
2.3	Caricamento di un foglio di lavoro.....	20
2.4	Cancellazione di un foglio di lavoro	20
3	Metodi	21
3.1	Creazione, salvataggio e caricamento dei metodi	21
3.1.1	Caricamento del metodo	21
3.1.2	Salvataggio del metodo.....	22
3.1.3	Creazione di un nuovo metodo	23
3.2	Impostazioni dei parametri del metodo	24
3.2.1	Selezione delle linee di analisi – scheda Lines.....	24
3.2.2	Configurazione dei parametri per il plasma e il sistema ottico di trasferimento – finestra Method / Plasma	30
3.2.3	Configurazioni per il trasporto del campione - finestra Method / Sample delivery	32
3.2.4	Analisi dei picchi – finestraMethod / Evaluation.....	33
3.2.5	Inserimento dei parametri di calibrazione – finestra Method / Calibration	37
3.2.6	Specificazione delle analisi statistiche – finestra Method / Statistics	42
3.2.7	Specificazione dei campioni per controllo qualità per le schede QC – finestra Method / QCS	44
3.2.8	Specificazione del controllo di qualità nella sequenza – finestra Method / QCC	48
3.2.9	Specificazione dei formati per i risultati - finestra Method / Output.....	50
4	Sequenze	51
4.1	Creazione, salvataggio e apertura di sequenze.....	51
4.2	Funzioni di dialogo nella finestra Sequence	52
4.3	Combinazione di campioni e sequenze di azioni per la sequenza	54
4.4	Inserimento di azioni speciali nella sequenza.....	55
4.5	Selezione di linee/elementi per un'azione/analisi del campione	56
5	Dati del campione (ID campione)	58
5.1	Creazione, salvataggio e apertura dei dati del campione.....	58
5.2	Informazioni per i campioni - finestra Sample ID / Sample information	59
5.3	Informazioni per i campioni QC – finestra Sample ID / QC sample information	60
5.4	Specificazione delle informazioni dei campioni	60

6	Esecuzione delle analisi e calcolo dei risultati	62
6.1	Descrizione dei comandi del menu e dei tasti per avviare le analisi nella finestra principale	62
6.2	Accensione e spegnimento del plasma	62
6.3	Avvio di un'analisi	64
6.4	Interruzione e ripresa della sequenza di analisi.....	66
6.5	Ripetizione delle azioni della sequenza.....	67
6.6	Rielaborazione dei risultati di analisi.....	67
6.7	Valutazione delle misurazioni parallele all'analisi in corso (modalità offline).....	70
6.8	Visualizzazione dei risultati e progresso dell'analisi nella finestra principale	70
6.8.1	Scheda Sequence/Results	71
6.8.2	Scheda Sequence	71
6.8.3	Scheda Results	72
6.8.4	Scheda Overview.....	75
6.9	Visualizzazione e modifica dei valori individuali dei campioni	76
6.10	Visualizzazione e modifica degli spettri di intensità.....	77
6.10.1	Visualizzazione degli spettri – finestra Edit spectra / Display.....	78
6.10.2	Valutazione dei picchi e determinazione della correzione di fondo – finestra Edit spectra / Evaluation ...	81
6.10.3	Rimozione dell'interferenza spettrale – finestra Edit spectra / Spectral corrections	83
6.11	Registrazione di uno spettro d'insieme	86
7	Calibrazione	88
7.1	Rappresentazione grafica della curva di calibrazione.....	89
7.2	Visualizzazione dei risultati di calibrazione.....	90
7.2.1	Calibrazione – scheda Table	90
7.2.2	Calibrazione – scheda Residuals.....	90
7.2.3	Calibrazione – scheda LOD/ LOQ	91
7.2.4	Calibrazione – scheda LOD/ LOQ	91
7.3	Modifica del grafico di calibrazione.....	92
8	Controllo qualità	94
8.1	Parametri dei grafici QC	94
8.2	Inserimenti e limiti del grafico QC	95
8.3	Visualizzazione dei grafici QC.....	96
9	Controllo e monitoraggio del dispositivo e degli accessori.....	98
9.1	Spettrometro.....	98
9.1.1	Configurazione dei parametri dello spettrometro e test delle funzioni.....	98
9.1.2	Diagnosi dei parametri del dispositivo	100
9.1.3	Esecuzione di misurazioni continue del picco	100
9.1.4	Registrazione della progressione del segnale	101
9.2	Plasma	102
9.2.1	Accensione del plasma e impostazione delle condizioni del plasma.....	103
9.2.2	Controllo dell'introduzione del campione della pompa	105
9.2.3	Regolazione e ottimizzazione del plasma	106
9.3	Campionatore	108
9.3.1	Visualizzazione del campionatore collegato	109
9.3.2	Configurazione della griglia del campionatore	109
9.3.3	Parametri tecnici del campionatore.....	110
9.3.4	Visualizzazione delle posizioni dei campioni sul campionatore.....	111
9.3.5	Funzione di diluizione	112

9.4	Refrigeratore a ricircolo.....	113
10	Gestione dei dati.....	114
10.1	Funzioni di stampa in ASpect PQ.....	114
10.1.1	Stampa dei dati dei risultati	114
10.1.2	Stampa di ulteriori parametri e impostazioni	117
10.1.3	Modelli di report	118
10.2	Gestione dei dati per tutti i tipi di dati in ASpect PQ.....	120
10.2.1	Gestione dei metodi e delle sequenze	121
10.2.2	Gestione dei file dei risultati	123
10.2.3	Esportazione dei file delle linee/della lunghezza d'onda	124
10.2.4	Gestione dei modelli di correzione	124
10.2.5	Eliminazione degli spettri di correzione	125
10.2.6	Importazione dei modelli di report.....	126
10.2.7	Gestione delle linee preferite	126
10.2.8	Importazione ed esportazione di fogli di lavoro	127
10.3	Salvataggio dei risultati nel formato ASCII/CSV.....	127
10.4	Specificazione delle unità di misurazione	128
10.5	Gestione dei database per campioni madre e QC.....	128
10.6	Creazione di osservazioni predefinite.....	129
10.7	Utilizzo degli appunti di Windows	130
11	Personalizzazione di ASpect PQ.....	131
11.1	Opzioni di visualizzazione	131
11.2	Cartelle di destinazione	132
11.3	Opzioni di esportazione.....	133
11.4	Opzioni per l'esportazione ASCII continua	133
11.5	Opzioni per la sequenza di analisi	134
12	Supplemento	138
12.1	Descrizione dei contrassegni utilizzati nella visualizzazione dei valori	138

1 Software ASpect PQ

ASpect PQ è il software di controllo e analisi dei seguenti apparecchi ICP-OES:

- PlasmaQuant PQ 9000
- PlasmaQuant 9100

Consente di ottimizzare i parametri del metodo di misurazione in base alle esigenze specifiche del campione da analizzare. I dati così ottenuti possono essere ricalcolati, esportati in diversi formati e stampati.

Versione del software descritta Questo documento si basa sulla versione ASpect PQ 1.3.

Utilizzo conforme all'impiego previsto Il software ASpect PQ ha come utilizzo prefissato unicamente il controllo degli apparecchi menzionati sopra e l'analisi dei dati ottenuti con tali dispositivi.

Il produttore non si assume alcuna responsabilità per problemi o danni causati da un uso dell'ASpect PQ diverso da quello previsto.

ASpect PQ e il dispositivo da questo controllato possono essere utilizzati soltanto da personale opportunamente qualificato e formato. L'utente deve avere familiarità con le informazioni qui fornite e con il manuale utente del dispositivo.

1.1 Avvio e arresto di ASpect PQ

1.1.1 Avvio di ASpect PQ

- ▶ Accendere il dispositivo e il campionatore.
- ▶ Cliccare sull'icona ASpect PQ che si trova sul desktop.



Ciò farà avviare ASpect PQ.

- ▶ Se il software "User Management" (Gestione Utenti) è stato installato, verrà richiesto di inserire nome utente e password. Il programma ASpect PQ sarà accessibile soltanto dopo l'inserimento di questi dati.

In seguito all'avvio del software, si apre il quickstart. Qui è possibile selezionare fogli di lavoro con metodi e sequenze predefiniti oppure passare direttamente all'interfaccia di ASpect PQ.

1.1.1.1 Finestra Quickstart

In seguito all'avvio del software e all'accesso da parte di un utente (solo nel caso in cui la gestione utenti sia installata), compare la finestra **Quick Start**. Qui è possibile caricare un foglio di lavoro oppure passare ad ASpect PQ senza ulteriori impostazioni predefinite. La finestra **Quick Start** può essere aperta in ASpect PQ anche tramite il comando di menu **File | Quick Start**.

QUICK START TIME: 12.08.2020 14:16:25

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

OPERATOR: User1

LAB.:

Routine Method development

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

DESCRIPTION

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

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

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

Favorites Recent Predefined All

Torch material:

Simulation

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

Impostazioni nella finestra Quick Start

Nella finestra **Quick Start** sono disponibili le opzioni e i pulsanti indicati di seguito.

Opzione / pulsante	Descrizione
Operator	Se si utilizza la gestione utenti installabile opzionalmente, sullo schermo compare l'utente che ha effettuato l'accesso. Se invece la gestione diritti utente non viene usata, qui è possibile inserire manualmente l'utente.
Lab.	Possono essere immessi fino a 30 caratteri. L'ultimo nome immesso viene salvato e visualizzato a scopo informativo nei report dei risultati.
Routine	Avvia il programma per le operazioni di routine. Con tale opzione saranno disponibili soltanto i metodi attivati per le operazioni di routine.
Method development	Avvia il programma completo. Con tale opzione si accederà alla gamma completa delle configurazioni.
Torch material	Selezionare il materiale della torcia (quarzo o ceramica) per adattare la sensibilità del sensore ottico al plasma.
Simulation	Per scopi di addestramento e dimostrazione è possibile utilizzare ASpect PQ senza analizzatore collegato. All'attivazione, si eseguono simultaneamente tutte le funzioni dell'apparecchio (compreso il rilevamento e l'analisi dei valori di misurazione).
[Skip Quick Start]	Consente di passare all'interfaccia di ASpect PQ senza selezionare alcun foglio di lavoro.
[Configure ports:ASX/SDX]	Solo se il sistema di diluizione Teledyne Cetac SDXHPLD è collegato ad ASX-560 Autosampler Cliccando sul pulsante si configura automaticamente le porte USB assegnate al campionatore e al sistema di diluizione. Se è installato il modulo opzionale "21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ" (gestione utenti), questa funzione può essere eseguita solo da un utente con diritti di amministratore.
[Quit]	Chiude la finestra Quick Start termina ASpect PQ.
[OK]	Dopo aver selezionato un foglio di lavoro, consente di passare all'interfaccia di ASpect PQ.

Tabella dei fogli di lavoro

Nella tabella dei fogli di lavoro sono indicati i fogli di lavoro attualmente disponibili. Le 4 schede rendono più semplice trovare il foglio di lavoro richiesto.

Scheda	Contenuto
Favorites	Fogli di lavoro con la dicitura Favorite
Recent	Ultimo foglio di lavoro utilizzato
Predefined	Fogli di lavoro di Analytik Jena, installati durante l'installazione di ASpect PQ
All	Tutti i fogli di lavoro
	Con l'icona della lente di ingrandimento è possibile filtrare per elementi i fogli di lavoro. Cliccando su questa icona compare un elenco di elementi dal quale si può selezionare un elemento. Se si desidera cercare altri elementi, ripetere la selezione. Se sono stati evidenziati più elementi, verranno visualizzati tutti i fogli di lavoro che contengono almeno uno degli elementi del metodo memorizzato (logica O).

1.1.1.2 Avvio con un foglio di lavoro

Un foglio di lavoro è una cartella che contiene un metodo e una sequenza. I fogli di lavoro possono contenere opzionalmente anche impostazioni relative agli ID dei campioni e per il salvataggio del file dei risultati. Selezionando un foglio di lavoro si può avviare immediatamente una misurazione. Se esistono più versioni del metodo e della sequenza desiderati, per la misurazione si utilizzano sempre le versioni più nuove (attuali).

- ▶ Installare l'accessorio sull'analizzatore e quindi accendere l'accessorio e l'apparecchio.
- ▶ Avviare il software.
 - ✓ Compare il quickstart.
- ▶ Immettere i dati richiesti nei campi **Operator** e **Lab..**
- ▶ Selezionare il **Torch material**.
- ▶ Selezionare il foglio di lavoro desiderato nella tabella dei fogli di lavoro.
- ▶ Cliccare su **[OK]**.
 - ✓ Compare l'interfaccia di ASpect PQ. Il metodo e la sequenza sono già caricati.

A seconda della configurazione del foglio di lavoro, è ora possibile abbinare il metodo e la sequenza caricati con il foglio di lavoro a un file con l'ID del campione oppure avviare direttamente la misurazione.

1.1.1.3 Avvio senza foglio di lavoro

Senza foglio di lavoro predefinito, il metodo, la sequenza e l'ID del campione devono essere caricati o configurati per la misurazione.

- ▶ Installare l'accessorio sull'analizzatore e quindi accendere l'accessorio e l'apparecchio.
- ▶ Avviare il software.
 - ✓ Compare il quickstart.
- ▶ Immettere i dati richiesti nei campi **Operator** e **Lab..**
- ▶ Selezionare il **Torch material**.
- ▶ Cliccare su **[Skip Quick Start]**.
 - ✓ Compare l'interfaccia di ASpect PQ.

Procedura di misurazione generale

Specificare un metodo e una sequenza per l'analisi che si desidera effettuare e avviare la misurazione.

Per effettuare una procedura di misurazione manuale o automatica è necessario eseguire le seguenti azioni:

- ▶ Specificare i **parametri del metodo** (method development).
- ▶ Creare una **sequenza**. La sequenza serve a specificare campioni e azioni nell'ordine di esecuzione desiderato. Alcuni dati di descrizione del campione, come il nome del campione e la sua posizione sul campionatore, possono essere inseriti direttamente e verranno salvati con la sequenza.
- ▶ Per l'analisi di routine, è utile creare un **file con l'identificazione del campione** (ID campione). Tale documento contiene i dati relativi al campione, quali il nome, il fattore di diluizione, e il posizionamento sul campionatore. Questi dati sono necessari se la concentrazione deve essere calcolata a partire dal campione originale. I documenti di informazione del campione sono file di testo; possono essere creati mediante applicazioni esterne.
- ▶ Avviare una **misurazione**.

I risultati vengono riportati istantaneamente nel database dei risultati durante la misurazione. Questo file dei risultati centrali è accessibile tramite le funzioni di gestione dei dati integrati (per esempio export, print).

Dopo aver avviato la misurazione, i dati vengono inseriti nell'elenco dei risultati nella finestra principale. La presentazione dei risultati dettagliati (per esempio valori individuali, spettro) è accessibile selezionando la riga del campione corrispondente. Gli ultimi risultati ottenuti verranno sempre aggiunti al termine della tabella. Non è possibile sovrascrivere i dati.

È possibile eseguire un'analisi aggiuntiva dei dati mediante la funzione "Reprocessing" (rielaborazione). I dati misurati possono essere preparati per la stampa del report o per l'esportazione.

1.1.2 Apertura di una seconda finestra del programma ASpect PQ

Se l'applicazione è già avviata, verrà aperta una seconda finestra dell'applicazione in modalità offline. Questa modalità non consente la comunicazione con il dispositivo. Ciò nonostante, ogni altra funzione quale lo sviluppo dei metodi o il caricamento e l'analisi dei risultati può essere utilizzata parallelamente alle misurazioni attive della prima finestra del programma.

- ▶ Avviare il programma nella seconda finestra utilizzando la voce del menu **File | Start Offline Program Instance**.

1.1.3 Bloccaggio di ASpect PQ

È possibile bloccare l'applicazione durante il funzionamento, mentre le misurazioni continuano ad essere effettuate. In combinazione con la gestione utenti opzionale, verrà richiesta una password per sbloccare lo schermo.

- ▶ Selezionare la voce di menu **Extras | Lock**.
- ▶ Cliccare sull'icona con il lucchetto presente sullo schermo per sbloccare l'applicazione.

1.1.4 Arresto di ASpect PQ

- ▶ Spegnerne il plasma.
- ▶ Uscire dal programma selezionando dal menu la voce **File | Quit**.

- ▶ A questo punto, il dispositivo vi informerà se il metodo, la sequenza o i file dei dati del campione sono stati aperti senza essere salvati. Cliccare su **[Yes]** per salvare questi file.
- ▶ Una volta disattivato il plasma, il dispositivo ICP-OES richiederà ancora un po' di tempo per il raffreddamento del sistema. Se non è stata ancora raggiunta la temperatura nominale, verrà visualizzata una finestra di progresso recante un messaggio riguardo la disattivazione di sicurezza del dispositivo.
Si raccomanda di spegnere il dispositivo ICP-OES soltanto dopo l'arresto di ASpect PQ.



NOTA

Se ASpect PQ viene arrestato quando il plasma sta bruciando, quest'ultimo si estinguerà automaticamente dopo una query!

Vedere a riguardo anche

Accensione e spegnimento del plasma [▶ 62](#)

1.2 Informazioni generali sul funzionamento

1.2.1 Lo spazio di lavoro

Una volta avviato il programma ASpect PQ, si aprirà la finestra **Quick Start**. Da qui si accede allo spazio di lavoro.

Componenti principali dello spazio di lavoro

No.	Sample type	Name	AS-DF	No.	Name	Line	Conc. 2	SD2	Unit	Conc. 1	Unit	Ints.	RSD%	
1	Cal-Zero1		1	1	Cal-Zero1	A420.068					mg/L	9996101	0.32	
2	Cal-Stc1		1	2		Y371.030					mg/L	1171010	2.37	
3	Cal-Stc2		1	3		Au242.795					mg/L	232	2.01	
4	Cal-Stc3		1	4	Cal-Stc1	A420.068					mg/L	9935994	0.20	
5	Compute calib.			5		Y371.030					mg/L	1171416	2.77	
6	Sample		1	101		Au242.795			0.1		mg/L	12971	1.37	
7	Sample		1	102	7	Cal-Stc2	A420.068				mg/L	9895028	0.18	
8	Sample		1	103	8		Y371.030				mg/L	1170380	1.60	
9	Sample		1	104	9		Au242.795			1	mg/L	126438	1.02	
10	Sample		1	105	10	Cal-Stc3	A420.068				mg/L	9932604	0.14	
11	Sample		1	106	11		Y371.030				mg/L	1180806	1.29	
12	Sample		1	107	12		Au242.795			10	mg/L	1244682	0.43	
13	Sample		1	108	13	Compute calib.	Au242.795				mg/L	9860386	0.41	
14	Sample		1	109	14	blank	A420.068					1177755	2.23	
15	Sample		1	110	15		Y371.030					898	1.39	
16				16		Au242.795		0.0042	0.0001	mg/L	0.0042	mg/L	8910786	0.48
17	A2			17	A2	A420.068						1234129	0.43	
18				18		Y371.030						105317	1.03	
19				19		Au242.795	167.4	1.730	mg/kg	0.8423	mg/L	8881736	0.31	
20	QC spike			20		A420.068						1279370	0.80	
21				21		Y371.030						234765	0.24	
22				22		Au242.795				1.881	mg/L	10814295	0.22	
23	Mn 10 mg/L			23		A420.068						1300272	0.81	
24				24		Y371.030						14033	1.71	
25				25		Au242.795	0.1097	0.0019	mg/L	0.1097	mg/L	10682298	0.12	
26	Mn 100 mg/L			26		A420.068						1224179	0.24	
27				27		Y371.030						123071	2.22	
28				28		Au242.795	0.9848	0.0219	mg/L	0.9848	mg/L	10788948	0.30	
29	QC blank DL			29		A420.068						1227867	1.17	
30				30		Y371.030						10718149	0.25	
31				31		Au242.795						1230815	1.32	
32	QC blank DL			32		A420.068						50	11.49	
33				33		Y371.030								
34				34		Au242.795								

N. Descrizione

- 1 Nella **barra del titolo** sono riportate informazioni sulla versione software, sull'apparecchio collegato, sulla tecnica e sul foglio di lavoro (se caricato).
- 2 Tramite la **barra del menu** si accede a tutte le funzioni del software.
- 3 La **barra degli strumenti** contiene i pulsanti per l'avvio e la messa in pausa delle sequenze di misurazione e indica il metodo, la sequenza e il file con l'ID del campione attualmente caricati. Cliccando sul pulsante dietro ai campi si carica il record di dati. Qui si trova inoltre il pulsante per creare un nuovo foglio di lavoro.

N.	Descrizione
4	Tramite la barra delle icone si ha accesso alle finestre più importanti (funzioni) del software. Non appena si apre una finestra, l'icona corrispondente diventa rossa. Se sono aperte più finestre, si può accedere a una finestra cliccando nuovamente sull'icona in primo piano.
5	La finestra principale contiene la sequenza e i risultati di misurazione.
6	Alcune delle schede principali possiedono sotto-schede supplementari, che sono visualizzate nella sezione inferiore della finestra.
7	La barra di stato sul fondo fornisce informazioni sul dispositivo collegato, l'utente che ha effettuato l'accesso e il nome del database dei risultati attualmente visualizzato.

Vedere a riguardo anche

-  Visualizzazione dei risultati e progresso dell'analisi nella finestra principale [► 70]
-  Finestra Quickstart [► 7]

1.2.2 Funzione Help

L'assistenza al funzionamento dell'ASpect PQ è disponibile tramite la voce di menu ? | **Help topics**. Mentre si lavora nelle finestre dell'ASpect PQ, è possibile attivare la funzione di aiuto specifica premendo il tasto funzione [F1].

Il programma farà apparire brevi informazioni (tool tips) relative ai tasti della barra del menu e delle icone, nonché ad altri tasti e alle intestazioni delle tabelle nelle finestre **Method**, **Sequence** e **Sample ID** passando il cursore del mouse sopra il tasto.

1.2.3 Descrizione delle barre del menu, degli strumenti e delle icone

Funzioni della barra del menu

La barra del menu è posizionata nel lato superiore dello spazio di lavoro dell'ASpect PQ. Permette di accedere a tutte le operazioni del software. I tasti e i menu che non sono accessibili per il contenuto corrente dello spazio di lavoro appariranno in grigio. Alcune voci del menu, come per esempio la funzione di stampa, sono visualizzate in base a quali altre finestre sono aperte.

Voce del menu	Descrizione
File	<ul style="list-style-type: none"> ■ Crea, apre e salva informazioni relative a metodi, sequenze e campioni ■ Apre i risultati ■ Cancella i metodi e le sequenze ■ Esporta i dati degli spettri ■ Stampa la finestra o il report attivo ■ Avvia programmi online e offline ■ Richiama la modalità di design del report ■ Apre di nuovo la finestra Quick Start ■ Esce dall'applicazione ■ Apre in maniera diretta le sequenze e i metodi aperti per ultimi
Edit	<ul style="list-style-type: none"> ■ Copia e inserisce contenuti nei campi di testo e inserimento ■ Copia negli appunti le righe selezionate dall'elenco dei risultati ■ Elimina il contenuto dell'elenco dei risultati
View	<ul style="list-style-type: none"> ■ Apre e chiude le finestre di visualizzazione dei grafici e informazioni durante il processo di analisi, ad es. le curve dei segnali ■ Seleziona la scala dell'asse del segnale per i grafici
Method Development	<ul style="list-style-type: none"> ■ Apre le finestre richieste per lo sviluppo del metodo ■ Registra lo spettro d'insieme
Routine	<ul style="list-style-type: none"> ■ Avvia, mette in pausa e interrompe una procedura di misurazione

Voce del menu	Descrizione
	<ul style="list-style-type: none"> ■ Ricalcola i risultati ■ Spegne il plasma ■ Lava il sistema
Extras	<ul style="list-style-type: none"> ■ Apre la finestra Files/Records e Options ■ Richiama l'elenco delle linee ■ Avvia una ricerca di campioni individuali ■ Stampa l'immagine visualizzata dallo schermo ■ Verifica ed esegue la manutenzione (refrigeratore a ricircolo) ■ Blocca la postazione di lavoro
System status	<p>Disponibile nel caso sia installato il modulo opzionale "21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ".</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ Configura la gestione utenti ■ Modifica la password ■ Visualizza l'Audit Trail ■ Firma i risultati
?	<ul style="list-style-type: none"> ■ Accede ad assistenza online e informazioni sulla versione del software

Barra degli strumenti

I tasti della barra degli strumenti vengono principalmente utilizzati per avviare/mettere in pausa e continuare la misurazione della sequenza (del campione). Nei campi della barra degli strumenti sono visualizzati il metodo caricato, la sequenza e l'ID del campione.

Strumenti	Descrizione
	Avvia la misurazione delle sequenze.
	Misura la riga evidenziata nella sequenza.
	Mette in pausa la misurazione della sequenza in corso.
	Riprende la misurazione della sequenza messa in pausa.
	Ricalcola i risultati; ad es. dopo la misurazione di un campione supplementare.
	Avvia/arresta la pompa del dispositivo ICP-OES.
	
	Aumenta la velocità della pompa (lavaggio del percorso del campione).
	Accende/spegne il plasma
	Apre i file. Metodi salvati, sequenze o ID dei campioni possono essere caricati nel programma e utilizzati per l'analisi corrente.
	Crea un nuovo foglio di lavoro.

Barra delle icone

La barra delle icone fornisce l'accesso rapido alle funzioni principali del programma ASpect PQ. Cliccare sull'icona permette di aprire la finestra della funzione del programma corrispondente. Dopo il completamento dell'installazione, la barra delle icone si trova vicino al margine sinistro dello schermo. Tuttavia, può essere spostata in un'altra posizione.

Icona	Descrizione
	Controlla l'atomizzazione: <ul style="list-style-type: none"> ▪ Accende/spegne il plasma ▪ Impostazioni dei flussi di gas ▪ Controlla la pompa per il trasporto del campione al vaporizzatore ▪ Regola il sistema ottico di trasferimento ▪ Ottimizza la potenza del plasma e il flusso del gas del nebulizzatore
	Controlla le funzioni dello spettrometro: <ul style="list-style-type: none"> ▪ Dati del dispositivo ▪ Test delle correzioni della lunghezza d'onda ▪ Avvia una misurazione su una lunghezza d'onda di prova ▪ Avvia una misurazione continua per l'ottimizzazione del dispositivo
	Apri la finestra del metodo
	Specifica il campionatore
	Apri la finestra con i dati del campione
	Apri la finestra della sequenza
	Apri la finestra con la calibrazione
	Apri la finestra con i dati del controllo qualità
	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Gestione dei dati ▪ Stampa i risultati e gestisce i modelli di report ▪ Scelta delle unità di misurazione ▪ Database per gli standard madre e i campioni QC
	Gestisce i fogli di lavoro, apre i fogli di lavoro salvati

1.2.4 Comandi di uso comune

L'ASpect PQ utilizza diversi tasti e funzioni del mouse e della tastiera che hanno sempre lo stesso significato, o uno molto simile.

Tali comandi saranno ora descritti in termini generali. All'interno delle descrizioni di ogni finestra vengono riportate informazioni specifiche quando necessario.

Tasti generali

La funzione delle icone dei tasti è indicata da brevi informazioni (tool tip) che vengono visualizzate quando il cursore del mouse passa sopra il tasto corrispondente.

Tasto	Descrizione
[OK]	Chiude la finestra e salva le impostazioni.
[Cancel]	Chiude la finestra senza salvare le eventuali modifiche alle impostazioni.
[Accept]	Salva le impostazioni senza chiudere la finestra.
[Close]	Chiude la finestra; le modifiche alle impostazioni non vengono salvate in maniera permanente.
[Open]	Apri una finestra di selezione per caricare dati o documenti registrati.
[Save]	Apri una finestra di selezione per salvare dati o documenti registrati.
	Apri una finestra di dialogo per la selezione, ad es. per selezionare la cartella di destinazione di un file.
	Apri la finestra Print (stampa). Da questa finestra è possibile stampare i contenuti della finestra dei documenti attivi o esportarla in un file.

Tabelle

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

In alcune finestre, i valori sono inseriti direttamente in una tabella. In base alla tipologia di dato inserito, le celle della tabella si comportano come un campo di inserimento, un elenco a discesa o una casella per inserire un valore numerico da un intervallo delimitato tramite i tasti freccia.

- ▶ Per selezionare una riga di una tabella, cliccare sulla riga corrispondente nella prima colonna della tabella evidenziata con uno sfondo grigio. Quindi, è possibile spostare la linea del cursore con i tasti freccia della tastiera.
- ▶ Per modificare la larghezza di una colonna, muovere il cursore del mouse sulla linea di separazione corrispondente nel titolo della colonna fino a che non si trasforma in una doppia freccia. Quindi, mantenendo premuto il tasto sinistro del mouse, è possibile trascinare la linea di divisione per ottenere la larghezza desiderata.

Nei campi di inserimento, sono inoltre disponibili le seguenti funzioni:

- ▶ [F2] attiva la modalità di modifica. In questa modalità, i tasti freccia della tastiera sono utilizzati per modificare ogni singolo carattere. Premere nuovamente [F2] consente di riattivare la modalità standard, con la quale è possibile utilizzare i tasti del cursore per spostarsi tra le celle.
- ▶ Il testo può essere copiato negli Appunti di Windows e reinserito tramite il percorso del menu **Edit | Copy** e **Edit | Insert** o tramite le combinazioni di tasti [Ctrl+C] e [Ctrl+V].

Tasti accessibili nelle tabelle

Tasto	Funzione
[Append]	Aggiunge una nuova riga della tabella alla fine dell'elenco.
[Insert]	Inserisce una nuova riga della tabella prima della riga selezionata.
[Delete]	Elimina la riga della tabella selezionata.
	Sposta di una posizione in alto la riga della tabella selezionata. Nota: una riga della tabella deve essere selezionata per intero per poter essere spostata. Per far questo, cliccare sul numero nella riga in questione nella prima colonna della tabella.
	Sposta di una posizione in basso la riga della tabella selezionata.
	Trasferisce il valore della cella selezionata a ogni successiva riga della tabella dello stesso tipo di campione (campione, standard, QC, ecc.). Quando la casella inc. (inc. sta per incremento) è attiva, questo valore verrà aumentato automaticamente, ad es. Sample001, Sample002...

Grafici

Nei grafici, è possibile aprire un menu contestuale tramite il tasto destro del mouse. Questo menu fornisce opzioni per copiare il grafico o l'intera finestra negli Appunti di Windows.

In diverse finestre grafiche, sono disponibili icone di tasti supplementari:

Icona	Funzione
	Attiva la modalità di zoom. Premendo il tasto sinistro del mouse è possibile selezionare un'area del grafico per effettuare lo zoom.
	Disattiva la modalità di zoom e resetta il grafico riportandolo alla dimensione originale.
	Attiva la modalità testuale. Premendo il tasto sinistro del mouse è possibile selezionare un'area e aggiungere del testo ad un grafico. Fare doppio clic su un testo esistente per aprire la finestra e modificare o eliminare il testo. La combinazione del tasto Ctrl e il tasto destro del mouse consente di spostare il testo esistente.
	Attiva la modalità di selezione nel grafico dello spettro o del segnale. Cliccare con il tasto sinistro del mouse permette di aggiungere etichette ai punti di misurazione.

Tasti funzione

Icona	Funzione
[F1]	Attiva la funzione di assistenza relativa al contesto.
[F2]	Modifica le celle della tabella.
[F5]	Avvia la stampa di un'immagine dello schermo.
[F6]	Misura la riga selezionata della sequenza (voce del menu Routine Run Selected Sequence Row... F6).
[F7]	Mostra finestre grafiche supplementari (ad es. curva del segnale).
[F8]	Chiude finestre grafiche supplementari.
[F10]	Per le operazioni tramite tastiera consente di passare dalla barra del menu dell'area di lavoro alla finestra dei risultati e viceversa.
[F11]	Riprende una misurazione precedentemente messa in pausa (voce del menu Routine Continue).
[F12]	Avvia o arresta il processo di misurazione (voci del menu Routine Start Sequence... F12 e Routine Stop F12).

Uso della stampante

ASpect PQ utilizza la stampante standard configurata su Windows.

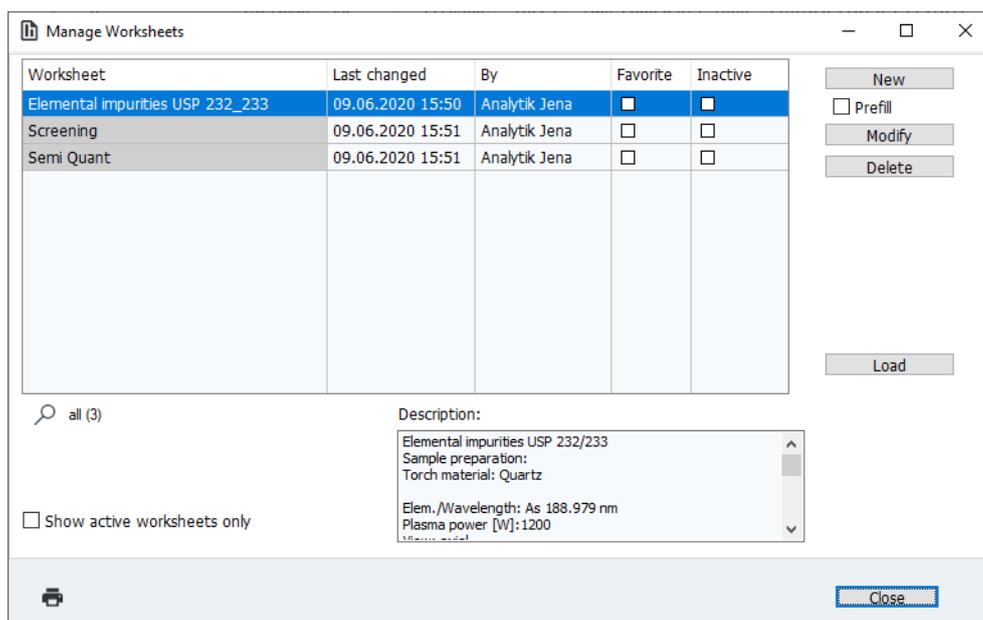
2 Fogli di lavoro

Un foglio di lavoro è una cartella che contiene un metodo e una sequenza. Qui è inoltre possibile salvare le impostazioni per un ID del campione e per i risultati. Caricando un foglio di lavoro si può avviare la misurazione della sequenza direttamente.

I fogli di lavoro possono essere creati, modificati, cancellati, disattivati o caricati. Le rispettive funzioni si trovano nella finestra **Manage Worksheets**.

La finestra **Manage Worksheets** può essere aperta cliccando su  nella barra delle icone.

Elementi della finestra Manage Worksheets



Tasti / opzioni	Descrizione
[New]	Crea un nuovo foglio di lavoro.
Prefill	Applica una sequenza e un metodo già caricati.
[Modify]	Modifica il foglio di lavoro selezionato.
[Delete]	Elimina il foglio di lavoro selezionato.
[Load]	Carica il foglio di lavoro selezionato per una misurazione.
Show active worksheets only	Nasconde tutti i fogli di lavoro contrassegnati con Inactive nella tabella.
Description	Descrizione dei fogli di lavoro selezionati Queste informazioni vengono memorizzate quando si crea il foglio di lavoro.

La tabella fornisce le informazioni indicate di seguito sui fogli di lavoro.

Colonna	Descrizione
Worksheet	Nome del foglio di lavoro
Last changed	Data dell'ultima modifica del foglio di lavoro
By	Utente che fa effettuato l'ultima modifica Si applica il nome dell'utente registrato nel quickstart.
Favorite	Una volta attivato, il foglio di lavoro viene visualizzato nella scheda Favorites della finestra Quick Start
Inactive	Se attivato, questo foglio di lavoro non compare nel quickstart.

Colonna	Descrizione
	Un foglio di lavoro contrassegnato come inattivo può essere caricato dalla finestra Manage Worksheets .

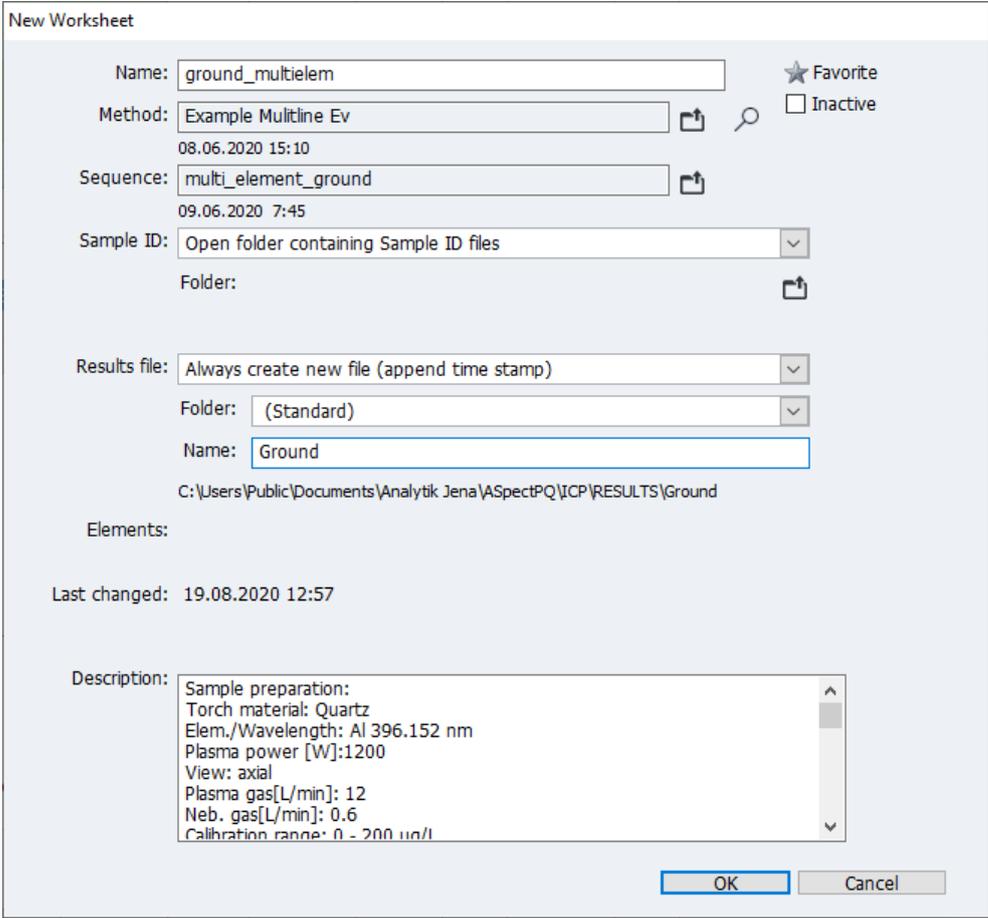
Vedere a riguardo anche

- 📄 Avvio con un foglio di lavoro [▶ 9]

2.1 Creazione di un nuovo foglio di lavoro

- ▶ Per creare un nuovo foglio di lavoro, cliccare su  nella barra delle icone per aprire la finestra **Manage Worksheets** e cliccare su **[New]**.
In alternativa, cliccare su  nella barra degli strumenti.
 - ✓ Compare la finestra **New Worksheet**.
- ▶ Selezionare un metodo e una sequenza.
Nota: in una sequenza è possibile caricare in un secondo momento ulteriori metodi come azioni.
- ▶ Opzionalmente si può definire come salvare il file dei risultati e utilizzare un file con l'ID del campione, come pure modificare la descrizione (vedere qui in basso).
- ▶ Uscire dalla finestra cliccando su **[OK]**.
 - ✓ Il nuovo foglio di lavoro compare nella finestra **Manage Worksheets** e può essere caricato.

Elementi della finestra New Worksheet



New Worksheet

Name: ★ Favorite
 Inactive

Method:  
08.06.2020 15:10

Sequence: 
09.06.2020 7:45

Sample ID: 

Folder: 

Results file: 

Folder: 

Name:

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

Elements:

Last changed: 19.08.2020 12:57

Description:

Campo / opzione	Descrizione
Name	Immettere il nome del foglio di lavoro
Method	Metodo salvato nel foglio di lavoro Aprire la finestra del database con  e selezionare il metodo.
Sequence	Sequenza salvata nel foglio di lavoro Aprire la finestra del database con  e selezionare la sequenza.
Sample ID	Opzionalmente si possono eseguire le impostazioni per il caricamento di un file con l'ID del campione. (none) : non saranno salvate le impostazioni per il file con l'ID del campione. Open folder containing Sample ID files : dopo aver caricato il foglio di lavoro, si apre una cartella con all'interno il file con l'ID del campione. Cliccare su  e selezionare la cartella. Load Sample ID file : Caricando il foglio di lavoro, si carica automaticamente un file con l'ID del campione. Cliccare su  e selezionare il documento. Con i caratteri segnaposto "*" e "?" è anche possibile definire una maschera per i documenti.
Results file	Opzionalmente si possono eseguire le impostazioni per salvare i risultati: (none) : la misurazione si avvia con la finestra Start nella quale si immette il nome del file dei risultati e la cartella di destinazione. Always create new file (append time stamp) : i file dei risultati di una sequenza sono salvati in un nuovo file. Il nome del file è composto da una parte fissa (nome) e dall'indicazione della data e dell'ora della misurazione. Selezionare una cartella nella quale il file sarà salvato e immettere un nome. Create and append to file : il file dei risultati viene creato quando si avvia per la prima volta la sequenza. A ogni successivo avvio della sequenza, i risultati sono aggiunti a questo file.
Description	Nel campo Description sono visualizzati alcuni parametri di analisi predefiniti estratti dal metodo. È possibile modificare liberamente questi dati e quindi definire istruzioni precise per l'uso del foglio di lavoro. I dati immessi sono visualizzati nel quickstart e nella finestra Manage Worksheets per un foglio di lavoro selezionato.
Favorite	Cliccando sulla stella si salva come preferito il foglio di lavoro: stella gialla: preferito stella grigia: non preferito
Inactive	Se attivato, questo foglio di lavoro non compare nel quickstart. Un foglio di lavoro contrassegnato come inattivo può essere caricato dalla finestra Manage Worksheets .

Vedere a riguardo anche

 Avvio di un'analisi [▶ 64]

2.2 Modifica del foglio di lavoro

Tutte le impostazioni di un foglio di lavoro esistente possono essere modificate.

- ▶ Cliccando su  nella barra delle icone, aprire la finestra **Manage Worksheets**.
- ▶ Selezionare il foglio di lavoro e cliccare su **[Modify]**.
Compare la finestra **Edit Worksheet**.

- ▶ Effettuare le modifiche analogamente alla procedura di creazione di un nuovo foglio di lavoro.

2.3 Caricamento di un foglio di lavoro

Un foglio di lavoro può essere selezionato in **Quick Start** oppure caricato nella finestra **Manage Worksheets**:

- ▶ Aprire la finestra **Manage Worksheets** cliccando su  nella barra delle icone.
- ▶ Selezionare il foglio di lavoro cliccando con il mouse nella tabella e cliccare su **[Load]**.
 - ✓ Il foglio di lavoro viene caricato e nella finestra principale compare la sequenza.

A seconda della configurazione del foglio di lavoro, è ora possibile abbinare il metodo e la sequenza caricati con il foglio di lavoro a un file con l'ID del campione oppure avviare direttamente la misurazione.



NOTA

Quando si carica un foglio di lavoro si utilizzano sempre le versioni attuali del metodo e della sequenza.

Se si carica un metodo o una sequenza che si discostano da quanto contenuto nel foglio di lavoro, le impostazioni per il file dei risultati e gli ID dei campioni vengono resettate nel foglio di lavoro.

2.4 Cancellazione di un foglio di lavoro

Un foglio di lavoro non necessario può essere cancellato.

- ▶ Cliccando su  nella barra delle icone, aprire la finestra **Manage Worksheets**.
- ▶ Selezionare il foglio di lavoro e cliccare su **[Delete]**.
 - ✓ Il foglio di lavoro verrà cancellato dopo una query.

3 Metodi

In "Methods" (Metodi) sono contenuti i parametri necessari ad effettuare un'analisi.

- Selezione delle linee di analisi
- Parametri per l'analisi di una linea
- Impostazioni per il plasma e lo spettrometro
- Tipo di introduzione del campione
- Parametri di calibrazione
- Analisi statistiche
- Impostazione per il controllo e la garanzia della qualità
- Impostazioni per l'output dei valori di misurazione

I metodi formano la base per una sequenza di misurazione che definisce la sequenza delle misurazioni del campione e altre azioni all'interno di un'analisi. I metodi salvati possono essere utilizzati per analisi con diverse sequenze.

La finestra **Method** può essere aperta cliccando su **iti** nella barra delle icone. Viene quindi visualizzato l'ultimo metodo attivo. Se non è stato caricato alcun metodo dall'avvio del programma, le finestre di visualizzazione contengono le impostazioni principali o sono vuote.

3.1 Creazione, salvataggio e caricamento dei metodi

I metodi vengono salvati nel database. Se i parametri di un metodo esistente vengono modificati e queste modifiche sono salvate sotto lo stesso nome, viene creata una nuova versione del metodo. In tal modo, il metodo esistente non potrà essere sovrascritto o eliminato per errore. Ulteriori funzioni per l'esportazione, l'importazione o l'eliminazione dei metodi sono contenute nella finestra **Data**.

Vedere a riguardo anche

 Gestione dei metodi e delle sequenze [▶ 121]

3.1.1 Caricamento del metodo

I parametri del metodo possono essere caricati sia dal database dei metodi che da un file dei risultati già esistente.

Caricamento di un metodo dal database

- ▶ Aprire la finestra del database in uno dei seguenti modi:
 - Cliccare sull'icona della cartella posta vicino al campo **Method** sulla barra degli strumenti.
 - Selezionare la voce di menu **File | Load method**.
 - Nella finestra **Method** cliccare su **[Open]**.
- ▶ Selezionare il metodo desiderato dall'elenco.
- ▶ Nella casella **Cat.** è possibile limitare i metodi visualizzati selezionando una categoria. Se si desidera vedere tutti i metodi, eliminare la voce nel campo **Cat.**
- ▶ Attivare la casella **Current version only** se si desidera visualizzare soltanto il metodo dalla versione più recente tra i metodi che hanno lo stesso nome.
- ▶ Aprire la finestra **Method** con **[OK]**.

Caricamento di un metodo da un file dei risultati

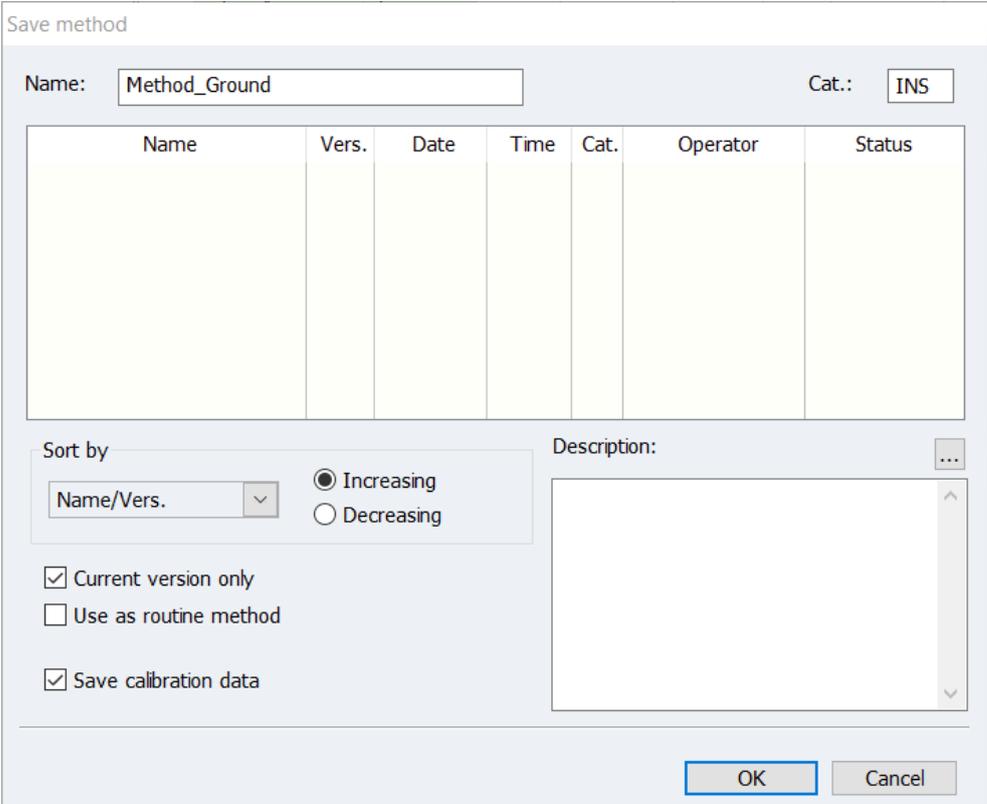
Il metodo può essere estrapolato da un file dei risultati visualizzato nella finestra principale.

- ▶ Cliccare col tasto destro del mouse su un qualsiasi campione.
- ▶ Nel menu contestuale, selezionare la voce del menu **Load method from results**.
- ▶ Dopo una richiesta per decidere se sovrascrivere i parametri del metodo corrente, il metodo può essere visualizzato cliccando su .

3.1.2 Salvataggio del metodo

Una volta inseriti i parametri del metodo, salvare il metodo nel database:

- ▶ Nella finestra **Method** cliccare su **[Save]**, per aprire la finestra **Save method**. In alternativa, selezionare la voce di menu **File | Save | Method**.



- ▶ Impostare le seguenti voci:

Opzione	Immissione / impostazione
Name	Inserire il nome del metodo.
Table	Panoramica dei metodi esistenti È possibile ordinare i metodi secondo diversi criteri mediante le opzioni del gruppo Sort by .
Description	Opzione per inserire ulteriori spiegazioni per il metodo.
Current version only	Se attivata, per i metodi che hanno lo stesso nome verrà mostrata soltanto i metodi con la versione più recente.
Use as routine method	Se attivata, il metodo è disponibile nella modalità di programma Routine . La modalità di programma viene selezionata nella finestra Quick Start .
Cat.	Opzione per inserire una categoria (tre caratteri) per un'ulteriore identificazione e per ordinare i metodi.

Opzione	Immissione / impostazione
Predefined methods	I grafici di calibrazione esistenti sono salvati con il metodo e possono essere utilizzati per analisi successive.

- ▶ Salvare il metodo con **[OK]**.

In tal modo, il metodo verrà salvato nel database. Se si seleziona il nome di un metodo esistente, tale metodo non verrà sovrascritto, ma ne verrà invece creata una nuova versione nel database. Per eliminare metodi dal database, questi devono essere esplicitamente rimossi.



NOTA

Il metodo viene inoltre salvato nel file dei risultati della misurazione. Una volta aperto il file dei risultati, è inoltre possibile riprodurre il metodo.

Vedere a riguardo anche

- 📖 Finestra Quickstart [▶ 7]
- 📖 Gestione dei metodi e delle sequenze [▶ 121]

3.1.3 Creazione di un nuovo metodo

Quando si crea un nuovo metodo, è possibile utilizzare le impostazioni predefinite, i parametri di un metodo salvato o i parametri del metodo corrente.

- ▶ Selezionare la voce di menu **File | Create new Method**.
- ▶ Attivare una delle tre opzioni e aprire la finestra **Method** corrispondente:

Opzione	Significato
Based on default parameters	Aprire una finestra per l'inserimento dei parametri di un nuovo metodo (soltanto con le impostazioni predefinite di modifica per la calibrazione e le statistiche).
Based on current parameters	Aprire la finestra Method con i parametri del metodo impostato correntemente.
Based on saved method	Richiama la finestra Load method . Una volta selezionato un metodo, i suoi parametri sono visualizzati nella finestra Method .

- ▶ In alternativa cliccare su  o selezionare la voce di menu **Method Development | Method**, per aprire la finestra **Method** con i parametri attuali.
- ▶ Eseguire le impostazioni richieste per il metodo.
- ▶ Attivare i parametri del metodo impostato tramite i tasti **[OK]** o **[Accept]** per l'analisi successiva.

Vedere a riguardo anche

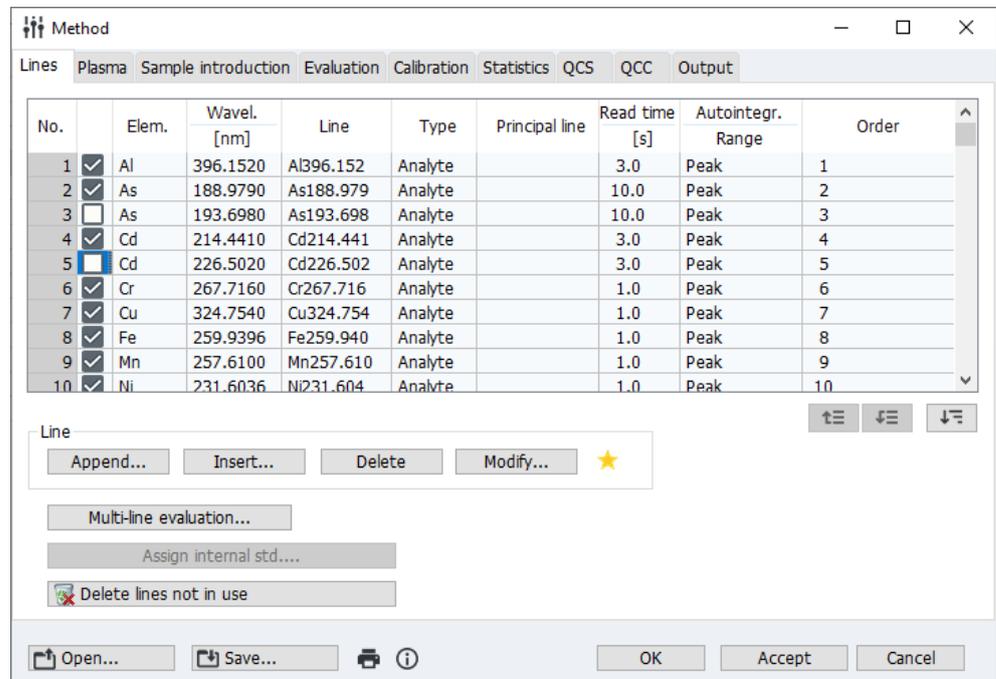
- 📖 Impostazioni dei parametri del metodo [▶ 24]

3.2 Impostazioni dei parametri del metodo

3.2.1 Selezione delle linee di analisi – scheda Lines

Nella finestra **Method / Lines** selezionare le linee di analisi per la misurazione.

Finestra Method / Lines



Parametri della tabella delle linee

Colonna	Descrizione
No.	Sequenza delle linee selezionate nella tabella
<input type="checkbox"/> / <input checked="" type="checkbox"/>	Disponibile soltanto nella modalità Method development La sottolineatura facilita lo sviluppo dei metodi dove diverse linee di un elemento vengono misurate all'avvio, quindi la linea adatta viene selezionata. Se una linea dell'elemento è attivata con un segno di spunta, questa linea viene utilizzata per l'analisi e misurata. Le linee disattivate sono escluse dall'analisi successiva e non vengono misurate. Le linee disattivate non sono ancora esplicitamente eliminate dalla linea della tabella.
Elem.	Icona dell'elemento da analizzare
Wavelength	Lunghezza d'onda della linea di analisi espressa in nm
Line	Nome della linea di analisi. Nelle impostazioni principali, il nome della linea consiste del simbolo dell'elemento e della lunghezza d'onda. Tuttavia, il nome può essere modificato a piacimento, ma deve rimanere unico.
Type	Selezione tra Analyte (linea da analizzare) e Int.std. (linea di riferimento interna)
Principal line	Indica con quale linea di analisi verrà misurata nello stesso momento la linea attuale (misurazione simultanea). È possibile ridurre il tempo di misurazione rilevando linee vicine con la stessa configurazione dello spettrometro. Cliccando su [Multi-line evaluation] compaiono le combinazioni possibili.
Read time	Tempo di misurazione totale per una linea di analisi

Colonna	Descrizione
Autointegr. Range	<p>Il tempo di integrazione viene selezionato automaticamente per un'esposizione ottima del rivelatore CCD e per evitare una sovraesposizione. In caso di sovraesposizione, la carica assorbita da un pixel si estende ai pixel adiacenti, producendo errori di misurazione (effetto Blooming). Per determinare il tempo di integrazione dell'area in questione deve essere selezionato:</p> <p>Spectrum Il tempo di integrazione è ottimizzato per il picco maggiore del campo spettrale della linea. Questa è l'opzione predefinita, e porta a un risultato sicuro.</p> <p>Peak Il tempo di integrazione è ottimizzato per il picco di analisi. Se si seleziona questa opzione, l'intervallo dinamico del rivelatore CCD viene usato in modo ottimale per l'analisi. Deve essere comunque garantito che non sia presente alcun picco più grande nelle immediate vicinanze del pixel di analisi. In questa eventualità, i risultati di misurazione potrebbero risultare distorti a causa dell'effetto Blooming.</p> <p>etector Il tempo di integrazione è adattato al picco maggiore sul rivelatore. In questa opzione, nessun'area del rivelatore è sovraesposta; potrebbe essere possibile che i pixel del picco di analisi non siano ottimamente esposti.</p>
Order	<p>Ordine di analisi L'ordine di misurazione può essere impostato a piacimento.</p> <p>Nota: dopo aver evidenziato un numero, i numeri vengono assegnati alle righe seguenti in ordine crescente dopo aver cliccato su . Le righe evidenziate (linee degli elementi) possono quindi essere disposte nell'ordine di misurazione desiderato nella tabella mediante  e ; inserire "1" in "Order" nella prima riga e assegnare l'ordine di misurazione a tutte le linee di analisi in ordine crescente mediante .</p>

Tasti nel gruppo Lines

Con i tasti **[Append]**, **[Insert]** e **[Modify]** è possibile aggiungere alla tabella delle linee ulteriori linee di analisi o modificare la linea selezionata. Una volta cliccato su questi tasti, la finestra **Select element/line** serve per voci aggiuntive. Usando il tasto **[Delete]** è possibile eliminare una linea selezionata o varie linee di analisi dal metodo.

Tasti supplementari

Tasto	Descrizione
[Multi-line evaluation]	Le linee di analisi rilevate assieme con la stessa configurazione del monocromatore possono essere misurate simultaneamente.
[Assign internal std.]	Abbina le linee di analisi a uno standard interno e le corregge.
[Delete lines not in use]	Disponibile soltanto nella modalità di programma Method Development . Elimina tutte le linee disattivate dall'elenco dei metodi. Nota: i metodi possono essere salvati come metodi di routine se tutte le linee nella tabella delle linee sono in uso.

Vedere a riguardo anche

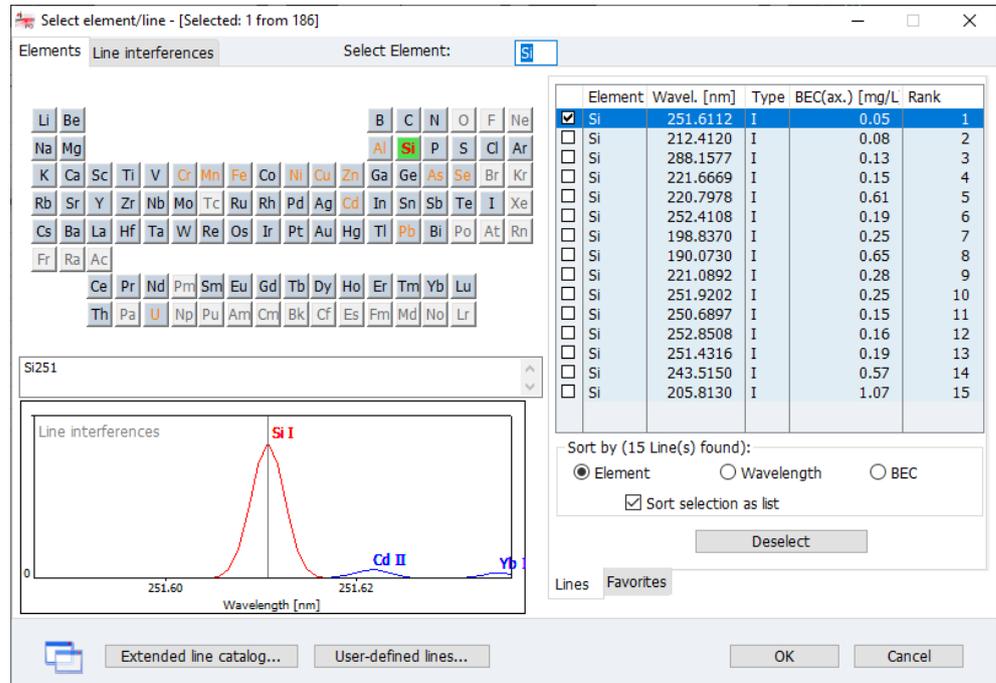
-  Misurazione simultanea di linee [▶ 28]
-  Comandi di uso comune [▶ 14]
-  Assegnazione di standard interni [▶ 29]

3.2.1.1 Aggiunta di linee di analisi nella tabella delle linee

Le linee di analisi vengono selezionate nella finestra **Select element/line**.

Elementi della finestra Select element/line

La scheda **Elements** rappresenta il sistema periodico con tutti gli elementi analizzabili mediante la tecnologia ICP OEP (tasti grigio scuro e simboli degli elementi neri). Gli elementi in grigio chiaro sono disabilitati. La scheda **Line interferences** mostra le possibili interferenze conosciute per una linea selezionata con la relativa sensibilità.



Il foglio di lavoro **Favorites** contiene una preselezione delle linee con le applicazioni raccomandate (parole chiave). Quando si selezionano queste linee, i parametri del metodo ottimizzati vengono simultaneamente trasferiti al metodo. È inoltre possibile aggiungere le proprie linee a questi preferiti.

Il foglio di lavoro **Lines** contiene tutte le linee selezionabili con le seguenti informazioni:

Colonna	Descrizione
Element	Elemento
Wavel.	Lunghezza d'onda analitica in nm
Type	Indica il tipo di atomizzazione: I: linea dell'atomo II: linea dello ione
BEC	Valore BEC tipico della linea dell'analita. Il valore BEC (concentrazione equivalente di fondo) rappresenta la concentrazione dell'analita che produce un'intensità equivalente a quella di fondo. Un valore più basso corrisponde ad una maggiore sensibilità. I valori BEC sono stati determinati nelle seguenti condizioni: osservazione assiale, uscita 1.200 W, flusso di gas plasma 12 L/min, flusso di gas ausiliario 0,5 L/min, flusso di gas nebulizzatore 0,6 L/min.
Range	Classificazione delle linee di analisi consigliate Una linea di analisi viene consigliata a seconda della sensibilità nonché della possibile interferenza generata dalle linee contigue o da altri elementi. Più una linea è alta nella classificazione, maggiori sono le possibilità che la linea di analisi consenta di ottenere buoni risultati.

Utilizzando le opzioni **Element**, **Wavelength** o **BEC** è possibile ordinare la tabella delle linee in ordine crescente per simbolo chimico, lunghezza d'onda o BEC.

Se l'opzione **Sort selection as list** è attivata, le linee sono inserite nella tabella del metodo nell'ordine dell'elenco (**Sort by**). Se tale opzione è disattivata, le linee sono inserite nell'ordine in cui vengono selezionate.

Selezione delle linee

- ▶ Nella finestra **Method / Lines** cliccare su **[Append]** o **[Insert]**.
Comparare la finestra **Select element/line**.
- ▶ Nel sistema periodico, cliccare sul simbolo di un elemento (i tasti grigi rappresentano gli elementi selezionabili). Questo visualizza soltanto le linee dell'elemento selezionato nella tabella delle linee / tabella dei preferiti.
In alternativa, inserire il simbolo di un elemento nel campo **Select Element**.
Eliminare la voce nel campo **Select Element** per visualizzare l'intero elenco degli elementi nella tabella delle linee.
- ▶ Nel foglio di lavoro **Favorites** selezionare le linee per la vostra applicazione o attivare le caselle delle linee desiderate nella tabella **Lines**.
- ▶ Passare alla scheda **Line interferences**, quindi abilitare le caselle delle linee desiderate nella tabella delle linee e verificare la presenza di interferenze note.
- ▶ Continuare fino a che si siano selezionate le linee per ogni analita. Uscire dalla finestra mediante **[OK]**.
 - ✓ Le linee selezionate sono trasferite alla finestra **Method / Lines**.

Nota:

selezionare diverse linee per ogni analita quando si lavora attraverso i metodi.

Catalogo esteso delle linee

Dopo l'installazione, l'elenco delle linee contiene una preselezione delle linee di analisi. Questo può essere integrato dalle linee di analisi dal catalogo esteso delle linee.

- ▶ Nella finestra **Select element/line / Elements** cliccare su **[Extended line catalog]**.
- ▶ Selezionare le linee dall'elenco tramite il mouse.
La selezione viene eliminata cliccando col mouse su una singola linea. Con **[Deselect]** si elimina ogni selezione.
- ▶ Cliccando su **[Add to lines table]** la selezione viene trasferita all'elenco delle linee.



NOTA

Le linee aggiunte dal catalogo esteso delle linee non possono essere eliminate dal catalogo standard.

Creazione e modifica delle proprie linee di analisi

È possibile creare le proprie linee di analisi e utilizzarle per l'analisi.

- ▶ Nella finestra **Select element/line** cliccare su **[User-defined lines]**.
- ▶ Nella finestra **Edit lines** inserire i dati per **Element** (Elemento) e per **Wavelength** (Lunghezza d'onda) e selezionare il **Type** (Tipo) nel campo dell'elenco.
- ▶ Il tasto **[Add]** permette di trasferire le voci al proprio elenco delle linee.
- ▶ Il tasto **[Close]** permette di trasferire le proprie linee all'elenco delle linee.

Le proprie linee possono essere nuovamente modificate ed eliminate dall'elenco delle linee.

- ▶ Per modificare una linea nel proprio elenco, selezionare la linea con il mouse dall'elenco della finestra **Edit lines**.
Inserire i dati della nuova linea, quindi cliccare su **[Modify]**.
- ▶ Il tasto **[Delete]** consente di eliminare una voce selezionata dall'elenco.

Vedere a riguardo anche

 Definizione delle proprie linee di analisi preferite [▶ 29](#)

3.2.1.2 Misurazione simultanea di linee

Quando si uniscono le linee, viene effettuata una ricerca nel programma di misurazione corrente per le linee che possono essere registrate assieme con la stessa configurazione del monocromatore mediante il rilevatore, e perciò anche misurate contemporaneamente.

- ▶ Nella finestra **Method / Save offset in line data** cliccare su **[Multi-line evaluation]**. Compare l'omonima finestra con una panoramica delle possibili combinazioni di linee.

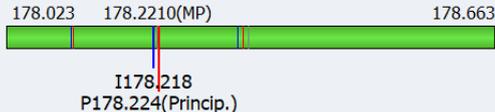
Elementi della finestra Multi-line evaluation

La finestra **Multi-line evaluation** elenca le possibili combinazioni di linee. Un diagramma a barre mostra la posizione delle linee sul rilevatore per la riga dell'elenco selezionata.

Multi-line evaluation

Principal line		Additional line		Meas.wavel. [nm]	Status	
Line	Wavel. [nm]	Line	Wavel. [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

Colonne della tabella / tasto	Contenuto
Casella	Se spuntata, la rispettiva combinazione di linee verrà misurata contemporaneamente nel metodo.
Principal line	Per la misurazione della combinazione di linee vengono utilizzati i parametri di misurazione di Principal line . Line Nome della linea principale Wavel. Lunghezza d'onda in nm della linea principale
Additional line	Line Nome della linea addizionale da analizzare Wavel. Lunghezza d'onda in nm della linea addizionale da analizzare
Meas.wavel.	Lunghezza d'onda della misurazione in nm (centro della linea del rilevatore)
Action status	Osservazioni

Colonne della tabella / tasto	Contenuto
[No combined lines]	Eliminare tutte le selezioni. Nessuna linea nel metodo verrà misurata assieme ad un'altra.
[Swap line priority]	Scambia la linea principale e quella addizionale nella combinazione di linee.

In una combinazione di linee, la linea principale e la linea addizionale sono determinate in modo automatico. Le linee addizionali accettano tutti i parametri del metodo che determinano la misurazione dalla linea principale. **[Swap line priority]** permette di invertire questa assegnazione.

3.2.1.3 Definizione delle proprie linee di analisi preferite

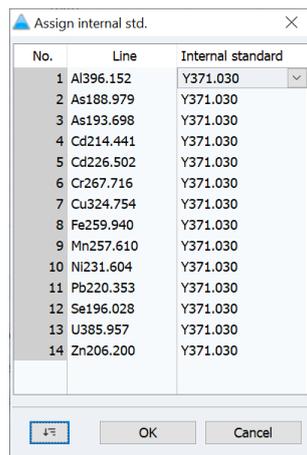
È possibile aggiungere linee di analisi preferite ad un elenco di preferiti, comprese note riguardo le applicazioni predefinite. In questa voce vengono salvate le informazioni riguardo le linee di analisi con tutti i parametri del metodo attinenti alla linea. L'elenco dei preferiti è disponibile ogni volta che si selezionano le linee degli elementi.

- ▶ Selezionare la linea nella tabella della finestra **Method / Lines** e cliccare su .
- ▶ Modificare il nome della linea nella finestra **Add to favorites**.
- ▶ Il campo **Comment** consente di inserire note e commenti riguardo la linea.
- ▶ Selezionare una o più di un'applicazione dall'elenco **Tags**.
È possibile integrare l'elenco delle parole chiave inserendo proprie voci. Le parole chiave predefinite sono evidenziate in blu.
 - ✓ La linea si trova nella finestra **Select element/line**.

3.2.1.4 Assegnazione di standard interni

Gli standard interni sono utilizzati principalmente per correggere l'interferenza non spettrale causata, ad es., da errori nel trasporto del campione. Gli standard interni possono essere definiti nella tabella delle linee della finestra **Method / Lines**.

- ▶ Inserire la linea di analisi che si desidera utilizzare come standard interno nella tabella delle linee, e nella colonna **Type** selezionare l'opzione **Int.std..**
- ▶ Cliccare su **[Assign internal std.]**.
Compare la finestra **Assign internal std..**
- ▶ È ora possibile assegnare uno standard interno a ciascuna linea di analisi nella tabella.
- ▶ Il tasto  permette di trasferire le impostazioni di una linea di analisi a tutte le linee successive nella tabella.
- ▶ Le impostazioni vengono trasferite al metodo con **[OK]**.

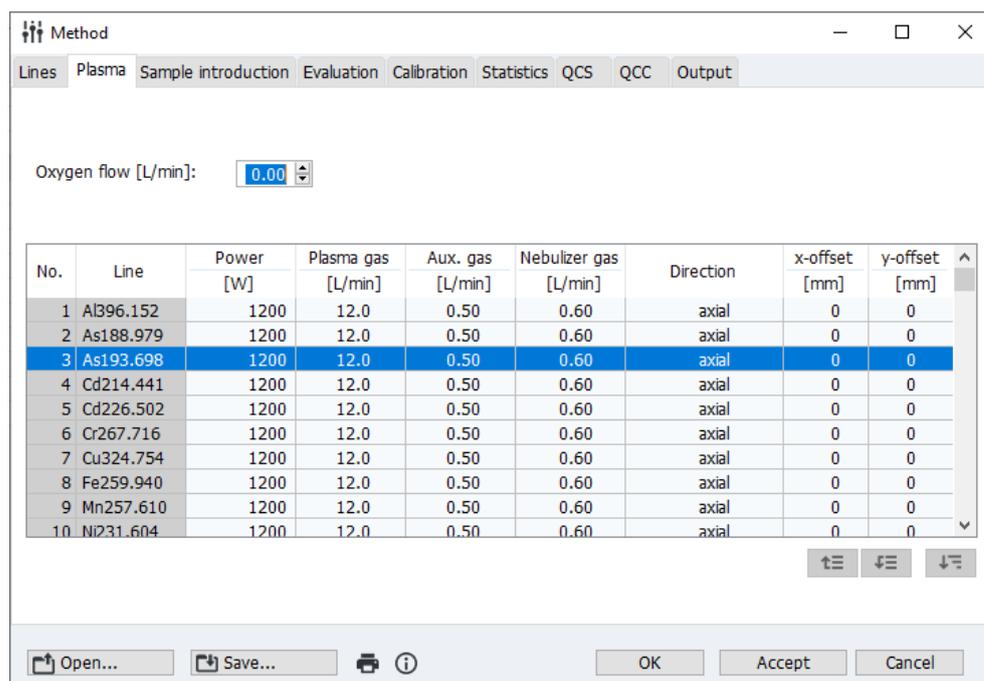


3.2.2 Configurazione dei parametri per il plasma e il sistema ottico di trasferimento – finestra Method / Plasma

Nella finestra **Method / Plasma** effettuare le seguenti impostazioni:

- flussi di gas per il plasma nella torcia
- selezione della direzione di osservazione del plasma e della sua regolazione

Elementi della finestra Method / Plasma



Colonna	Descrizione
No.	Sequenza delle linee selezionate nella tabella
Line	Nome della linea di analisi
Power	Potenza del plasma effettiva in watt Un aumento della potenza del plasma consente di migliorarne la stabilità, ad es. con solventi organici o campioni molto salini come soluzione di misurazione. Una potenza del plasma maggiore richiede allo stesso tempo anche un flusso di gas plasma superiore al fine di evitare lo scioglimento o il danneggiamento della torcia.
Plasma gas	Flusso di gas plasma in L/min

Colonna	Descrizione
	Il flusso di gas plasma passa tra il tubo di quarzo esterno e quello interno della torcia. Mediante induzione della bobina, il gas viene convertito allo stato del plasma e contemporaneamente raffredda il tubo esterno della torcia. Un flusso di gas plasma superiore può migliorare la durata utile della torcia.
Aux. gas	Flusso gas ausiliario in L/min Il gas ausiliario scorre tra il tubo in quarzo interno e l'iniettore. Supporta lo sviluppo del canale di misurazione e allontana il plasma dalla punta dell'iniettore. Un flusso di gas ausiliario superiore è richiesto ad es. nel caso di soluzioni di misurazione con solventi organici o elevate concentrazioni di sale.
Nebulizer gas	Flusso gas nebulizzatore in L/min Il gas nebulizzatore è introdotto nel nebulizzatore. Nebulizza il campione e lo sposta nel plasma attraverso la camera di nebulizzazione e l'iniettore.
Direction	Direzione di osservazione del plasma Mediante il sistema ottico di trasferimento, le radiazioni d'emissione dal plasma possono essere accoppiate allo spettrometro da due direzioni. È possibile selezionare la direzione di osservazione ottimale a seconda dell'analita. radial Il plasma viene osservato dal lato a un'altezza specifica sopra il bordo superiore della bobina. axial L'osservazione avviene dall'alto lungo l'asse longitudinale del plasma. È possibile indebolire entrambe le direzioni di osservazione. Ciò permette di evitare un eccessivo flusso del rilevatore per elevate intensità, ed aumenta il range analitico.
x-offset e y-offset	Correzione del sistema ottico di trasferimento in mm Spostando il sistema ottico lungo il canale di misurazione (osservazione radiale) e dal centro del canale di misurazione (osservazione radiale e assiale), aree dal differente calore possono essere scansionate e la temperatura di emissione ottimale della linea di analisi può quindi essere registrata. L'optimum per una linea può essere determinato automaticamente nella finestra Plasma.



NOTA

Durante la prima fase dello sviluppo del metodo (selezione delle linee adatte), i parametri preimpostati del plasma sono sufficienti. Tali parametri possono essere modificati dopo avere definito le linee di analisi, le necessarie correzioni di fondo e la determinazione del campo di linearità per ottimizzare ulteriormente i parametri del metodo.

Utilizzo di ossigeno

Per applicazioni speciali, ad esempio matrici organiche, l'ossigeno può essere utilizzato come gas supplementare.

- Impostare il flusso di gas nel campo Oxygen flow.

Vedere a riguardo anche

- 📖 Regolazione e ottimizzazione del plasma [► 106]

3.2.3 Configurazioni per il trasporto del campione - finestra Method / Sample delivery

Nella finestra **Method / Sample delivery** effettuare le seguenti impostazioni per l'analizzatore:

- Portata della pompa all'analizzatore
- Uso del campionatore
- Opzione di lavaggio

Finestra Method / Sample delivery

Tempi della pompa del dispositivo ICP-OES

Opzione	Descrizione
Normal mode	La normale velocità della pompa con la quale il campione viene trasportato durante l'analisi. Tale velocità dovrebbe assicurare una nebulizzazione ottimale del campione e orientarsi alla portata della pompa consigliata del nebulizzatore utilizzato.
Fast mode	Velocità aumentata con la quale il liquido di lavaggio viene trasportato durante le pause di misurazione e con la quale il campione può essere trasportato fino al nebulizzatore. Attivare questa modalità ottimizzerà il tempo di trasporto. Tuttavia, tale velocità non deve essere utilizzata durante il tempo di misurazione dal momento che non potrebbe essere assicurata una nebulizzazione omogenea del campione.
Delay time	Periodo di tempo dall'avvio dell'aspirazione del campione fino all'effettivo avvio della misurazione. Questo tempo è richiesto per lavare l'intero percorso del campione fino e inclusa la torcia con il campione, e per assicurare un'atomizzazione stabile. Nota: il tempo di ritardo comprende anche il tempo impostato nel campo [s].
Fast mode time	Tempo nel quale il campione viene trasportato con un'elevata portata della pompa durante il periodo di tempo del "Delay time".



NOTA

Nella finestra **Method / Sample delivery** impostare la portata del pompaggio del tubo del dispositivo ICP-OES. La portata della pompa del campionatore per il trasporto del liquido di lavaggio può essere controllata dalla manopola girevole posta sopra la pompa o nei sampler di Cetac tramite la finestra **Autosampler / Techn. parameters**.

Utilizzo del campionatore

Se il campionatore viene utilizzato per le analisi, attivare l'opzione **Autosampler**. In [**Parameters**] è possibile accedere alle impostazioni dell'autocampionatore.

Lavaggio

Durante il completamento di una sequenza sarà possibile impostare il lavaggio dopo ogni misurazione di campione. Il liquido di lavaggio viene quindi preso dal recipiente di lavaggio del campionatore durante la misurazione automatica. Durante la misurazione manuale verrà mostrato un messaggio per avviare l'erogazione del liquido di lavaggio.

- ▶ Nel gruppo **Purging** selezionare dal campo d'elenco l'opzione **Between samples** se si desidera lavare il percorso del campione durante la sequenza.
- ▶ Impostare la durata in secondi del lavaggio dal campo di inserimento **Wash time**.
- ▶ Se l'intera operazione di lavaggio deve avvenire solo in modalità veloce, attivare l'opzione **Wash only in fast mode**. Se l'opzione è disattivata, il lavaggio viene effettuato inizialmente in modalità veloce per il tempo indicato per questa modalità (**Fast mode time**) e per il resto del tempo di lavaggio in modalità normale.
- ▶ Selezionare l'opzione **off** se non si desidera effettuare il lavaggio.

Controllo della pulizia

Se i campioni vengono analizzati e l'intervallo operativo del grafico di calibrazione viene superato di più del 10%, il percorso del campione e la torcia possono essere lavati per rimuovere la contaminazione procurata dalla misurazione precedente. Per controllare i risultati di pulizia, l'intensità viene misurata durante il lavaggio; il lavaggio prosegue finché non si raggiunge il limite di controllo. Il controllo automatico della pulizia è consigliato dopo la misurazione o per campioni altamente concentrati.

Opzione	Descrizione
Controlled cleaning	Se attiva, innescherà automaticamente la pulizia controllata sul livello specificato di concentrazione in eccesso.
Control limit (Ints.)	Il valore al quale il livello del segnale deve essere tornato durante il lavaggio prima che venga misurata la soluzione successiva.
Line	Linea dell'elemento utilizzata come linea di controllo

3.2.4 Analisi dei picchi – finestra **Method / Evaluation**

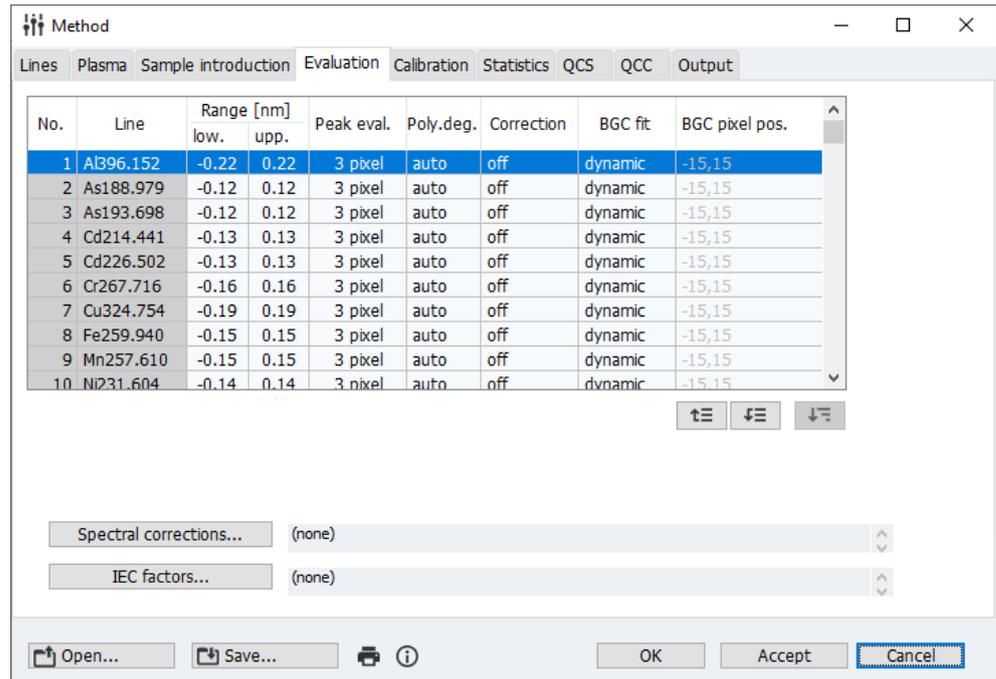
Nella finestra **Method / Evaluation** definire i parametri per la valutazione dei picchi.



NOTA

In **Method Development** si possono determinare le impostazioni ottimali per la correzione del fondo della rispettiva linea di analisi nella finestra **Edit spectra / Analysis** e quindi trasferirle al metodo.

Finestra Method / Evaluation



Colonna	Descrizione
No.	Sequenza delle linee selezionate nella tabella
Line	Nome della linea di analisi
Range	<p>low. Limite inferiore dell'intervallo di lunghezza d'onda per le analisi spettrali relative alla lunghezza d'onda di misurazione</p> <p>upp. Limite superiore dell'intervallo di lunghezza d'onda relativa alla lunghezza d'onda di misurazione</p>
Poly.deg.	<p>Selezione del grado polinomiale del grafico di regressione per la correzione statica del fondo</p> <p>Sono disponibili gradi polinomiali di ordine 0, primo, secondo e terzo per la selezione o per una ricerca automatica del grado polinomiale (opzione auto).</p>
Peak evaluation	<p>Selezione della valutazione del picco</p> <p>Pixels Numero dei pixel utilizzati per analizzare l'intensità e quindi per generare i valori della misurazione. Le intensità dei pixel di valutazione sono sommate. In tal modo, le imprecisioni di analisi possono essere ridotte dalle fluttuazioni nella posizione di picco. Numero consigliato pixel da selezionare 3</p> <p>Height Interpolazione del picco massimo</p> <p>User defined Selezione libera dei pixel di valutazione, ad es. per l'analisi di multipletti. Esempio di immissione: 50,120-130 forma il totale attraverso i valori di misurazione dei pixel 50 e 120-130.</p>
Correction	<p>Algoritmo per correzione spettrale (vedere in basso).</p> <p>off Non applicare alcuna correzione spettrale</p> <p>LSM Correzione spettrale con metodo dei quadrati più piccoli</p>

Colonna	Descrizione
	IEC Correzione spettrale con correzione inter-elementi
BGC fit	Regola i pixel per la correzione del fondo dynamic I pixel per la correzione del fondo sono individuati automaticamente dal software. static I pixel per la correzione del fondo sono specificati dall'utente nella colonna BGC pixel pos..
BGC pixel pos.	Posizione dei pixel relativa al pixel di misurazione per l'adattamento statico della correzione del fondo. Immettere il numero dei pixel per la correzione del fondo.
Tasti	Descrizione
[Spectral corrections]	Specificare un modello per la correzione spettrale per la linea di analisi.
[IEC factors]	Specificare una correzione inter-elementi per la linea di analisi.

Vedere a riguardo anche

- ☰ Valutazione dei picchi e determinazione della correzione di fondo – finestra Edit spectra / Evaluation [▶ 81]

3.2.4.1 Correzione spettrale con metodo dei quadrati più piccoli

Con la correzione spettrale, le emissioni di fondo strutturate possono essere eliminate mediante calcoli che sono stati causati da una sovrapposizione delle linee di analisi con linee degli elementi della matrice. Una preconditione è che per la rispettiva linea di analisi i possibili spettri di interferenza siano stati combinati in un modello correttivo.

- ▶ Nella finestra **Method / Evaluation** cliccare su **[Spectral corrections]** e configurare un modello correttivo adatto separato per ogni linea.
 - ✓ Le linee a cui è stato assegnato un modello correttivo sono identificate nella colonna **Correction** da **LSM**.

Vedere a riguardo anche

- ☰ Rimozione dell'interferenza spettrale – finestra Edit spectra / Spectral corrections [▶ 83]

3.2.4.2 Correzione inter-elementi

Mediante la correzione inter-elementi è possibile correggere le sovrapposizioni dirette delle linee. Una condizione è la continuità dell'assenza di interferenze nella lunghezza d'onda dell'interferente.

Con una soluzione ad elemento singolo (soluzione IEC) viene determinato il rapporto delle due linee dell'interferente (linea di analisi sovrapposta e linea priva di interferenze). Il quoziente (fattore IEC) viene utilizzato durante le seguenti misurazioni di campioni per sottrarre l'intensità apparente o la concentrazione dell'interferente dalla linea dell'analita.

Finestra 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

Elemento di controllo	Spiegazione
[IEC solutions]	Ingresso del nome, concentrazione, unità e posizione del campione delle soluzioni di elementi IEC e valori del bianco utilizzati per la correzione inter-elementi.
[Append]	Aggiunge una nuova riga alla fine di un elenco
[Insert]	Inserisce una nuova riga nel luogo selezionato nell'elenco
[Delete adjustment value]	Elimina la riga evidenziata
Interelement correction is based on	<p>Intensities La correzione avviene sottraendo le intensità.</p> <p>Concentration La correzione avviene sottraendo le concentrazioni apparenti.</p>
[Extract factors from results data]	Estrae i fattori IEC calcolati da un file di risultati caricato

Colonna	Descrizione
Specify IEC solutions	Nome della linea di analisi con interferenza
Interferent	Nome della linea di interferenza.
IEC solution	Nome della soluzione a elemento singolo che contiene l'interferente. Le soluzioni IEC sono specificate tramite il tasto [IEC solution].
IEC blank	Nome della soluzione del bianco sottratta dall'intensità o concentrazione dell'interferente. Le soluzioni del bianco sono specificate tramite il tasto [IEC solution].
IEC factor	Fattore di correzione IEC I fattori calcolati sono evidenziati in grigio.
manually	Se attivato, un fattore IEC può essere inserito manualmente. Non sono richieste soluzioni di misurazione.

Assegnazione di una correzione inter-elementi

- ▶ Nella finestra **Method / Evaluation** cliccare su [IEC factors].
 Comparare la finestra **Assign IEC Elements**.
- ▶ Specificare innanzitutto le soluzioni IEC. È necessario un valore del bianco e una soluzione IEC (soluzione a elemento singolo) per ogni interferente.
- ▶ Cliccare su [IEC solutions].
 Si apre la finestra **Analyte line**

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

- ▶ Aggiungere in tabella un valore del bianco e una soluzione IEC per ogni interferente cliccando su **[Add blank]** e **[Add IEC solution]**.
- ▶ Inserire un nome per ogni soluzione nelle celle della tabella corrispondente.
- ▶ Per le soluzioni IEC, inserire la concentrazione dell'interferente della soluzione IEC nella colonna **Concentration**.
- ▶ Confermare gli inserimenti con **[OK]**.
- ▶ Di nuovo nella finestra **Assign IEC Elements** selezionare la linea dell'analita con interferenza nella colonna **Specify IEC solutions**.
- ▶ Nella colonna **Interferent**, selezionare la linea dell'interferente priva di interferenze.
- ▶ Nelle colonne **IEC solution** und **IEC blank**, configurare la corrispondente soluzione a singolo elemento e soluzione del bianco.
- ▶ Selezionare il tipo di correzione inter-elementi basata sulle **Intensities** (intensità) o sulle **apparent concentrations** (concentrazioni apparenti).
- ▶ Confermare gli inserimenti con **[OK]**.
 - ✓ Le linee che hanno una correzione inter-elementi assegnata sono identificate con IEC nella tabella delle linee della finestra **Method / Evaluation** nella colonna **Correction**.

Nella sequenza, la misurazione delle soluzioni IEC deve essere effettuata in seguito alla misurazione degli standard di calibrazione o del calcolo della calibrazione.

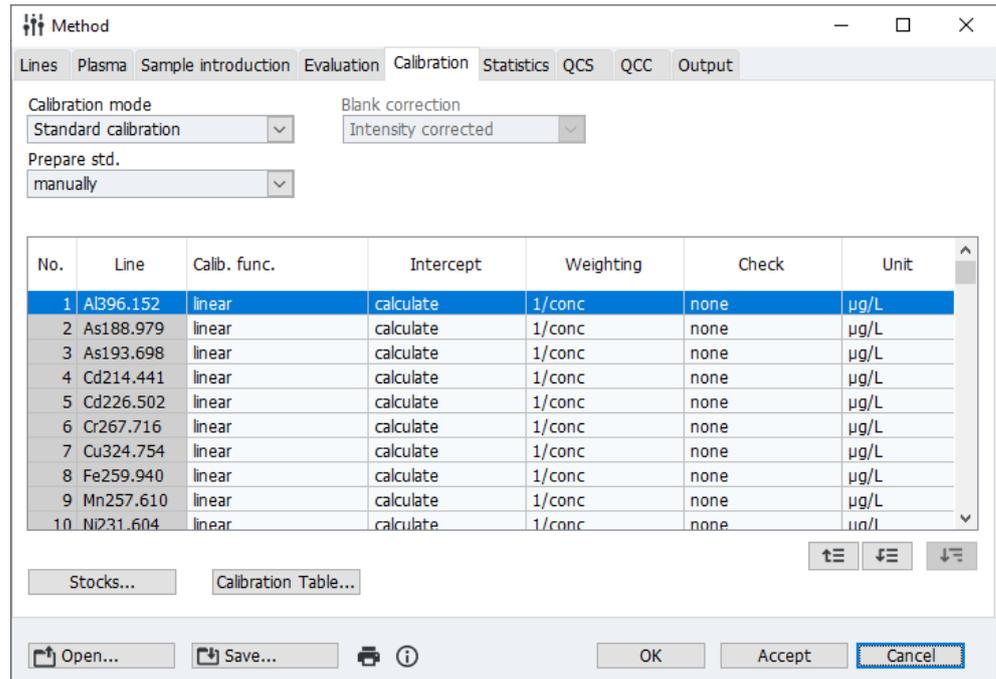
Immissione manuale dei fattori Invece che determinare i fattori della correzione inter-elementi mediante la misurazione della soluzione a elemento singolo, i fattori noti possono essere inseriti direttamente nella tabella.

- ▶ Dopo aver inserito la **Specify IEC solutions** (linea dell'analita) e **Interferent** (interferente), attivare la casella **manually**.
- ▶ Inserire il fattore già calcolato nella colonna **IEC factor**.

3.2.5 Inserimento dei parametri di calibrazione – finestra Method / Calibration

Nella finestra **Method / Calibration** definire il tipo di calibrazione e la correzione del valore del bianco. Per la calibrazione si utilizzano generalmente standard per elementi multipli che possono essere immessi come standard madre.

Finestra Method / Calibration



Selezione della tecnica di calibrazione

Selezionare la tecnica nell'elenco **Calibration mode**:

Tecniche di calibrazione	Descrizione
No calibration	I risultati dei campioni sono presentati soltanto come intensità. Per tali misurazioni non è necessaria la calibrazione.
Standard calibration	La calibrazione avviene con campioni dalla calibrazione nota negli analiti (standard). I campioni dalla concentrazione sconosciuta saranno misurati rispetto a tali standard di calibrazione.
Method of additions	Differenti concentrazioni di uno standard vengono aggiunte al campione sconosciuto e misurate. La concentrazione dell'analita risulta dalla comparazione.
Method of additions calibration	La curva di calibrazione, tramite la quale altre concentrazioni possono essere determinate, viene impostata dal metodo di aggiunta standard. Allo stesso tempo, la concentrazione del primo campione viene individuata mediante questo metodo.

Definizione delle correzioni dal valore del bianco

I metodi di aggiunta standard e le calibrazioni di aggiunta richiedono una correzione del valore del bianco. Selezionare la tecnica nell'elenco **Blank correction**:

Correzione	Descrizione
Intensity corrected	In ogni procedura di aggiunta standard viene misurato anche il valore del bianco, e il valore dell'intensità misurato è sottratto da tutti i valori misurati prima che le linee di regressione vengano calcolate. Questo metodo è stato il più utilizzato per lungo tempo; tuttavia, con molti campioni reali porta a risultati erranei.
Concentration corrected	Viene prima condotto una aggiunta standard separata per la soluzione del bianco utilizzando le stesse aggiunte di concentrazione del campione. La concentrazione che ne risulta è automaticamente sottratta da tutte le altre concentrazioni determinate (conc. 2) dall'aggiunta standard.

Produzione degli standard

Opzione	Descrizione
manually	Le soluzioni degli standard di calibrazione sono preparate manualmente.
by diluter system	Solo quando si utilizza il campionatore Cetac SDXHPLD con funzione di diluizione automatica Gli standard vengono prodotti tramite diluizione di uno standard madre nel miscelatore vortex (recipiente di miscelazione) del campionatore.

Parametri di calibrazione specifici per linee

I parametri specifici per linee vengono impostati nella tabella:

Colonna	Descrizione
No.	Sequenza delle linee selezionate nella tabella
Line	Nome della linea di analisi
Calib. func.	Solo per la calibrazione effettuata mediante metodo standard linear Progressione lineare della funzione di calibrazione $y = a + bx$ nonlin. ratio. Progressione non lineare della funzione di calibrazione descritta da una funzione sigmoidea $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$ nonlin. quadr. Progressione non lineare della funzione di calibrazione descritta da una funzione quadratica $y = a + bx + cx^2$ automatically Per la calibrazione, sono calcolate sia una funzione lineare che una non lineare. La somma dei quadrati dei prodotti residui sono comparati tra loro (test di Mandel). Se la somma della funzione non lineare è significativamente inferiore a quella della funzione lineare, verrà selezionata la curva di calibrazione non lineare. In caso contrario, verrà utilizzata la curva di calibrazione lineare. La funzione non lineare può essere selezionata nella finestra Options / Analysis sequence . Come impostazione predefinita è stata fornita la funzione sigmoidea. Nota: per i metodi di aggiunta standard e di calibrazione in aggiunta sono consentiti soltanto progressioni grafiche lineari.
Intercept	Set zero Il grafico di calibrazione intercetta esattamente il punto zero misurato. calculate Il valore zero viene incluso nel calcolo come qualsiasi altro punto di calibrazione.
Weighting	none Sono tenuti in eguale considerazione tutti i punti di calibrazione. 1/conc I punti di calibrazione ottenuto con le concentrazioni più basse devono essere tenuti in maggior considerazione. 1/SD I punti con deviazioni più basse entro diverse ripetizioni di misurazione di uno standard hanno una considerazione maggiore (condizione: statistiche medie attivate).

Colonna	Descrizione
	1/(SD*conc) Combinazione dei metodi di calcolo 1/conc e 1/SD
Check	<p>Il software fornisce un controllo automatico di determinate curve di calibrazione mediante un range di previsione calcolato in base a una certezza statistica selezionata manualmente.</p> <p>none Tutti i punti di calibrazione misurati e non cancellati sono utilizzati per calcolare il grafico. I punti di calibrazione non sono marcati né eliminati.</p> <p>Elim .outliers Se i punti di calibrazione sono al di fuori del range di previsione, i valori erratici verranno eliminati mediante un test F (test per valutare se l'esclusione di un punto comporti un miglioramento significativo della deviazione residua):</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Un test F viene eseguito per i punti di calibrazione maggiormente al di fuori del range di previsione. Se l'esclusione di questo punto non conduce a un miglioramento significativo della deviazione residua, il punto verrà incluso e il grafico di calibrazione non sarà ulteriormente ottimizzato. ▪ Se l'esclusione di questo punto comporta un significativo miglioramento, il punto di calibrazione verrà definito come valore erratico (contrassegnato con "!" nella tabella, e segnato in rosso nel grafico) e la calibrazione verrà ricalcolata senza questo punto. ▪ Per i punti che ora risiedono maggiormente al di fuori del range di previsione (deviazione maggiore), viene eseguito un altro test F. Questa procedura si ripete fino ad eliminare ogni valore erratico. ▪ Tutti i punti che sono esterni al range di previsione e che non sono stati eliminati come valore erratico sono indicati con "?" nella tabella e con il colore blu nel grafico.
Unit	Inserire separatamente le unità di concentrazione per ogni elemento.

Con  si trasferisce il valore della cella attiva ad ogni seguente cella nelle colonne. La tabella per inserire la concentrazione standard si apre con il tasto **[Calibration Table]**.

Vedere a riguardo anche

 Opzioni per la sequenza di analisi [[▶ 134](#)]

3.2.5.1 Specificazione degli standard madre

Se si utilizzano gli standard madre, è possibile inserire i rispettivi fattori di diluizione per i singoli standard invece che le concentrazioni. È necessario specificare gli standard madre prima di completare la tabella di calibrazione, ed è possibile utilizzare diversi standard madre con differenti elementi e concentrazioni.

- ▶ Nella finestra **Method / Calibration** cliccare su **[Stocks]**.
Si apre la schermata **Stock standards**.
- ▶ Aggiungere una nuova riga nell'elenco degli standard madre mediante **[New]** o **[Insert]**.
Numero massimo di standard madre: 20
- ▶ Per l'opzione **From stock database**, selezionare il nome dello standard madre nell'elenco. Il database degli standard madre può essere gestito nella finestra **Data / Stock std/QC samples**.
- ▶ Se non si utilizzano standard madre dal database, selezionare l'opzione **Enter manually**.

- ▶ Di nuovo nella finestra **Stock standards**, inserire i dati dello standard madre direttamente nella tabella:

Colonna	Descrizione
Name	Nome dello standard
Elements and concentrations	<p>Gli elementi e le corrispondenti concentrazioni standard</p> <p>Mediante [Concentrations] si apre un elenco per l'inserimento delle concentrazioni.</p> <p>In alternativa, inserire il valore direttamente nella riga nel seguente formato di inserimento: <i>Simbolo dell'elemento-spazio-Concentrazione</i>; ad es. nichel con una concentrazione di 0,5 mg/L: Ni 0.5</p> <p>Elementi addizionati e le loro concentrazioni sono semplicemente aggiunti separati da un punto e virgola. Un esempio del formato di inserimento è fornito nell'elenco di standard madre.</p>
Unit	Unità della concentrazione degli elementi nello standard.

Vedere a riguardo anche

- 📖 Gestione dei database per campioni madre e QC [▶ 128]

3.2.5.2 Inserimenti nella tabella di calibrazione

I dati standard sono inseriti nella tabella di calibrazione.

Finestra Calibration Table

Calibration Table

Number of standards

Calib-Zero standards: 1

Calibration standards: 5

Name	Unit	Cal-Zero1	Cal-Std1	Cal-Std2	Cal-Std3	Cal-Std4	Cal-Std5
Position		101	102	103	104	105	106
Stock							
Dil.fac.							
Recal.							
Al396.152	µg/L	0	1	5	10	50	200
As188.979	µg/L	0	1	5	10	50	
As193.698	µg/L	0	1	5	10	50	
Cd214.441	µg/L	0	1	5	10	50	
Cd226.502	µg/L	0	1	5	10	50	
Cr267.716	µg/L	0	1	5	10	50	
Cu324.754	µg/L	0	1	5	10	50	200
Fe259.940	µg/L	0	1	5	10	50	200
Mn257.610	µg/L	0	1	5	10	50	

Shift selected column

inc.

OK

- ▶ Nella finestra **Method / Calibration** cliccare su **[Calibration Table]**.
- ▶ Inserire prima il numero di standard nei campi di inserimento. In base al metodo di calibrazione selezionato, devono essere selezionati diversi standard.

Per il metodo standard si devono immettere il numero degli **Calibration standards** e **Calib-Zero standards**. Sono possibili diversi valori per **Calib-Zero standards**, ad es. gli elementi da essere analizzati sono sciolti in diversi solventi. In questo caso la concentrazione della linea dell'elemento relativa deve essere impostato su "0", le altre colonne rimangono vuote.

Per **Method of additions** e **Method of additions calib.** si deve immettere il rispettivo numero di **Addition standards**.

- ▶ Per la produzione di standard con un sistema di diluizione collegato, per ogni standard di calibrazione si deve selezionare nella riga **Stock** lo standard madre utilizzato e nella riga **Dil.fac.** il fattore di diluizione.
Per la diluizione si può scegliere tra i seguenti fattori: 1, 2, 5, 10, 15, 20, 25, 50, 75, 100, 200, 250, 500, 1000, 1500, 2000, 2500, 5000. Il numero dei fattori di diluizione è limitato da quanto impostato per il relativo intervallo nella finestra **Auto-sampler / Dilution**. Per i fattori di diluizione 1-100, la diluizione avviene in una fase, mentre per valori superiori in due fasi.
- ▶ Se gli standard di calibrazione vengono prodotti manualmente, le loro concentrazioni possono essere anche calcolate selezionando uno standard madre e immettendo un fattore di diluizione.
In alternativa, inserire per ciascuno standard la concentrazione del singolo elemento per ogni linea di analisi nella tabella.
- ▶ Nel caso degli standard prodotti manualmente, è possibile definire la loro posizione nel campionatore nella riga **Pos.**
Se non viene utilizzato un campionatore, i valori inseriti in questa riga non avranno alcun effetto.
Nei campionatori con funzione di diluizione, per la posizione dello standard madre si applica quella contenuta nel relativo database.
Le posizioni nel campionatore possono essere assegnate o modificate nella sequenza.
- ▶ Per ricalibrazioni (sequenza o reazione QC) deve essere selezionato almeno un **Calib-Zero standards** e un **Calibration standards** o almeno due **Calibration standards** nella riga **Recal.** Se più di due standard di ricalibrazione sono stati specificati per una linea di analisi, verranno utilizzati lo standard più alto e quello più basso.

Vedere a riguardo anche

- 📄 Specificazione degli standard madre [▶ 40]
- 📄 Funzione di diluizione [▶ 112]

3.2.6 Specificazione delle analisi statistiche – finestra Method / Statistics

Selezionare i metodi statistici da applicare alla calibrazione e alla misurazione del campione nella finestra **Method / Statistics**. Le impostazioni selezionate qui sono indipendenti dai metodi di calibrazione scelti e rimangono impostati ad ogni cambio di metodo.

Finestra Method / Statistics

Tipi di statistica

Opzione	Descrizione
Sigma statistics	Calcola il valore medio e la deviazione standard. Errori statistici basati sulla media aritmetica: Il campione è misurato ripetutamente dopo i cicli a vuoto. Basati sui risultati di misurazione, vengono calcolate la media aritmetica, la deviazione standard e la deviazione standard relativa.
Median statistics	Calcola la mediana e l'intervallo (R). Errori statistici basati sul metodo della mediana: Il campione è misurato ripetutamente dopo i cicli a vuoto. I valori misurati sono ordinati per dimensione. La mediana visualizzata è: <ul style="list-style-type: none"> Il valore al centro dell'elenco ordinato, se il numero dei cicli di misurazione è dispari. Il valore medio dei due valori misurati al centro dell'elenco ordinato se il numero dei cicli di misurazione è pari. Dal momento che il più grande e il più piccolo valore singolo misurato non influenzano i risultati di misurazione, il metodo "Median statistics" è adatto all'eliminazione dei valori erratici.

Numero di misurazioni ripetute

Opzione	Descrizione
Samples	Numero di ripetizioni della misurazione per campione
Calib.std.	Numero di ripetizioni della misurazione per campione di calibrazione
QC	Numero di ripetizioni della misurazione per misurazione QC
Pre-runs	Numero di ripetizioni delle misurazioni del bianco Le misurazioni del bianco sono misurazioni dei campioni che precedono le serie statistiche e ignorate per i calcoli dei risultati di misurazione.

Test dei valori erratici di Grubbs Questa funzione è fornita per il valore medio statistico con almeno 3 misurazioni ripetute per campione.

Stato	Descrizione
Disattivato	Include tutti i valori delle serie statistiche per il calcolo del valore medio.
Disattivato	I valori erratici sono eliminati e non sono utilizzati nel calcolo delle statistiche. I valori medi così individuati nella tabella dei risultati sono indicati da "!".

Calcolo dell'intervallo di confidenza

Il calcolo dell'intervallo di confidenza si basa sulla certezza statistica scelta (si veda sotto). Nel calcolo dell'intervallo di confidenza, sono inclusi gli errori nella misurazione del campione e in particolare gli errori di calibrazione, in modo che un valore verrà presentato anche se la funzione statistica è stata disattivata.

Regolazione	Descrizione
off	L'intervallo di confidenza non viene calcolato.
absolute	Mostra il livello di confidenza nei valori assoluti (in unità di concentrazione)
relative	Mostra l'intervallo di confidenza in valori relativi (in percentuale del valore di concentrazione)

Probabilità

La **Confidence level** (selezionabile tra 68,3- 99,9%) viene utilizzata per il calcolo dell'intervallo di confidenza del calcolo e i range di previsione dei grafici di calibrazione.

Vedere a riguardo anche

- 📄 Specificazione dei campioni per controllo qualità per le schede QC – finestra Method / QCS [▶ 44]

3.2.7 Specificazione dei campioni per controllo qualità per le schede QC – finestra Method / QCS

Nella finestra **Method / QCS** si possono specificare i campioni QC per le schede di controllo qualità. Il sistema delle schede di controllo QC serve a monitorare la qualità su un lungo periodo di tempo. Ciò comporta l'inserimento di misurazioni di controllo, con campioni in posizioni predeterminate durante la misurazione. Queste misurazioni di controllo dovrebbero produrre risultati noti. Ciò che è noto è il valore assoluto (intensità o concentrazione) o la differenza di concentrazione del campione precedente.

I risultati delle misurazioni per il controllo qualità sono registrate automaticamente nei cosiddetti Grafici QC (detti anche grafici degli standard di qualità o grafici di controllo). Le schede sono salvate con il metodo e continuate per ogni ulteriore misurazione effettuata con il metodo.

In un'analisi è possibile definire diversi campioni per controllo qualità (campioni QC). I dati delle concentrazioni di questi campioni e le loro tolleranze sono inseriti nella finestra **Method / QCS**.

Elementi della scheda QCS

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	-	-

Elementi	Descrizione
Type	Tipo di campione QC selezionato i cui parametri (limiti di errore e procedure) vengono visualizzati nell'elenco delle linee. È possibile selezionare un campione QC dall'elenco per la visualizzazione e la modifica.
Name	Nome del campione QC visualizzato
Reaction	Selezionare la procedura da effettuare se i risultati del campione QC eccedono o scendono sotto i limiti di errore definiti.
[New/Modify]	Da attivare per definire un campione QC nuovo o modificarne uno esistente.
[Delete]	Elimina il campione QC visualizzato.
Unit	Selezione dell'unità di concentrazione corrispondente
[QC samples overview]	Apri un elenco con i parametri specifici della linea di tutti i campioni QC.
Table	La tabella visualizza i parametri del campione QC selezionato nella casella di elenco "Type".

Immissione dei parametri dei campioni QC

- ▶ Con **[New/Modify]** creare un nuovo documento parametri per un tipo di campione QC o modificare quello visualizzato al momento.
Si apre la schermata **Add/modify QC sample type**.
- ▶ Selezionare il tipo di campione dall'elenco **Type**, e se si desidera definire diversi campioni QC dello stesso tipo, assegnare loro un numero nell'elenco adiacente (ad es. "**QC std. 2**"). È possibile selezionare i seguenti tipi di campione:

Opzione	Descrizione
QC sample	Definisce un campione come campione QC. Le concentrazioni del campione QC possono essere caricate database o inserite direttamente. Per richiamare dei dati salvati nel database per il campione QC, attivare l'opzione from database e selezionare il campione QC corrispondente dall'elenco adiacente

Opzione	Descrizione
	In alternativa, è possibile inserire le concentrazioni del campione QC direttamente nella tabella della finestra Method / QCS . Per fare ciò, attivare l'opzione enter manually . Numero massimo di campioni QC: 50
QC std.	Definisce uno standard come campione QC. Ogni standard definito nella tabella di calibrazione (finestra Method / Calibration) può essere utilizzato come standard QC. Le posizioni del campionatore saranno trasferite dalla Calibration Table . I numeri assegnati definiscono allo stesso tempo lo standard di calibrazione utilizzato, ad es. "QC std. 2" - il secondo standard di calibrazione viene utilizzato come campione QC. Possibile numero di standard QC = numero di standard nella tabella di calibrazione (max. 65)
QC blank	Definisce il valore del bianco come campione QC.
QC spike	Definisce un campione "spiked" come campione QC. Per il recupero/l'aggiunta, i risultati di misurazione di una aggiunta di concentrazione definita vengono controllati in rapporto a uno o più campioni. A tale scopo, deve essere definito un campione madre QC dopo ogni campione nella tabella dei campioni (campione madre QC = campione + aggiunta con una soluzione di concentrazione nota). Dopo la misurazione, la differenza di concentrazione (Conc1 del campione e del campione madre QC) viene comparata all'"Aumento di concentrazione previsto" qui specificato, e viene calcolato il tasso di recupero.

Se non sono disponibili campioni per controllo qualità, il controllo qualità può anche essere effettuato mediante doppie determinazioni:

Opzione	Descrizione
QC trend	I valori di concentrazione misurati sono salvati quando il campione per controllo qualità appare per la prima volta nella procedura analitica. Quando il campione QC appare una volta successiva, la differenza di concentrazione si forma e viene valutata. Si consiglia di misurare questi campioni QC all'inizio e al termine di una serie di misurazione del campione.
QC matrix	Un campione viene diviso prima della sua preparazione. Le due parti sono sottoposte separatamente a tutti i passaggi della preparazione dei campioni e occupano due posizioni diverse nel campionatore in qualità di QC trend e QC matrix. Verrà valutata la differenza tra le concentrazioni.

Procedura in caso di superamento dei limiti di errore

- Nell'elenco **Reaction** selezionare la procedura in caso di superamento dei limiti di errore.

Per QC sample , QC std. und QC spike:

Opzione	Descrizione
flag	Il valore misurato viene contrassegnato nella tabella dei campioni; il programma di misurazione continua a misurare il campione successivo.
recal. + continue	Viene avviata una ricalibrazione. Successivamente, il campione QC viene nuovamente misurato. Se il campione QC rientra ora nell'intervallo accettabile, la misurazione continua con il campione successivo; in caso contrario, il programma di misurazione verrà arrestato.
cal. + continue	Avviene una nuova calibrazione. Successivamente, il campione QC viene nuovamente misurato. Se il campione QC rientra ora nell'intervallo accettabile, la misurazione continua con il campione successivo; in caso contrario, il programma di misurazione verrà arrestato.

Opzione	Descrizione
recal. + rerun	Viene avviata una ricalibrazione. Successivamente, il campione QC viene nuovamente misurato. Se il campione QC non rientra nell'intervallo, il programma di misurazione verrà arrestato. Se rientra nell'intervallo, tutti i campioni misurati dopo l'ultimo campione QC o l'ultima (ri)calibrazione verranno nuovamente misurati. Se il campione QC è di nuovo oltre i limiti di errore tollerati, il programma di misurazione verrà arrestato.
cal. + rerun	Avviene una nuova calibrazione. Successivamente, il campione QC viene nuovamente misurato. Se il campione QC non rientra nell'intervallo accettabile, il programma di misurazione verrà arrestato. Se rientra nell'intervallo, tutti i campioni misurati dopo l'ultimo campione QC o l'ultima (ri)calibrazione verranno nuovamente misurati. Se il campione QC è di nuovo oltre i limiti di errore tollerati, il programma di misurazione verrà arrestato.
next method	L'attuale programma di misurazione viene arrestato e viene avviato il programma di misurazione del metodo successivo, se la sequenza contiene un altro metodo.
Stop	L'attuale programma di misurazione viene arrestato.

Per QC blank è possibile scegliere tra le seguenti reazioni:

- **flag**
- **next method**
- **Stop**

Per QC spike è possibile scegliere tra le seguenti reazioni:

- **flag**
- **recal. + continue**
- **cal. + continue**
- **next method**
- **Stop**

Per **QC trend** e **QC matrix** non è prevista alcuna reazione.

Attivazione delle correzioni dal valore del bianco

- ▶ Per **QC trend** e **QC matrix** è prevista opzionalmente una correzione del valore del bianco. Per avvalersi della funzione, attivare la casella **Blank**.

Definizione di parametri che dipendono dalla linea

- ▶ Nella tabella è possibile definire per ogni linea i parametri specifici per la linea in questione a seconda del tipo di campione QC.

Opzione	Descrizione
Line	Nome della linea
Exp. conc.	Per QC sample e QC std. Concentrazione prevista per il QC sample
Exp. conc. increase	Per QC spike Aumento di concentrazione previsto del campione rispetto al campione "spiked" Inserire il valore corrispondente al volume madre e la concentrazione della soluzione madre.
Exp. ints.	Per QC blank Intensità prevista nel valore del bianco QC
lower lim.	Intervallo inferiore del limite di errore in percentuale
upper lim.	Intervallo superiore del limite di errore in percentuale
QC chart	Se contrassegnato da "+", il risultato del controllo qualità per questa linea verrà presentato nella tabella QC nell'elenco dei risultati.
React.	Se i limiti di errore dell'intervallo vengono superati, verrà applicata la procedura selezionata nell'elenco "Reaction".

Opzione	Descrizione
	Se più linee sono contrassegnate da "+", basta che i limiti di errore vengano superati per una di queste linee per attivare una reazione (logica O).
Unit	Per QC std. Unità della concentrazione prevista

Vedere a riguardo anche

📄 Gestione dei database per campioni madre e QC [▶ 128]

3.2.8 Specificazione del controllo di qualità nella sequenza – finestra Method / QCC

Nella finestra **Method / QCC** è possibile specificare i parametri per il controllo di qualità durante una sequenza:

- deviazione standard relativa (valore medio) o intervallo relativo (valore mediano)
- controllo della calibrazione e controllo della ricalibrazione
- procedura da avviare se i limiti di errore sono superati

È possibile selezionare contemporaneamente varie opzioni di controllo con diverse reazioni.

Finestra Method / QCC

No.	Line	RSD/RR% <	RSD !	R ² (adj.) >	R ² !	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	+

Tipi di controllo di qualità

Tipo di controllo	Descrizione
RSD/RR% check	Controllo della deviazione standard relativa o dell'intervallo relativo
Calib. check	Controllo del coefficiente di determinazione della calibrazione
Recal. check	Controllo del fattore di ricalibrazione

Reazioni in caso di superamento dei limiti di errore

Reazione	Descrizione
none	Il relativo controllo non viene effettuato.

Reazione	Descrizione
flag	In caso di superamento dei limiti di errore, verranno selezionati nella tabella dei campioni il campione in questione, la calibrazione o la ricalibrazione.
repeat + continue	Solo controllo RSD/RR% Ripete la misurazione del rispettivo campione, se il limite di precisione seriale viene superato, prima che il campione successivo venga misurato.
cal. + continue	Solo controllo della calibrazione o della ricalibrazione In caso di superamento dei limiti di errore per la calibrazione o del fattore di ricalibrazione, esegue una nuova calibrazione e successivamente continua la misurazione con il campione successivo.
next method	Solo controllo della calibrazione o della ricalibrazione L'attuale programma di misurazione viene arrestato e viene avviato il programma di misurazione del metodo successivo, se la sequenza contiene un altro metodo.
Stop	Solo controllo della calibrazione o della ricalibrazione In caso di superamento dei limiti di errore, interrompe la misurazione del metodo in corso in quel momento.

Parametri specifici della linea dei controlli qualità

Inserire nella tabella i parametri specifici della linea dei diversi controlli qualità. È possibile definire per ogni linea di analisi se questa deve essere considerata per il controllo. Se una o più delle linee controllate eccedono i limiti di errore, le reazioni sopra selezionate verranno attivate.

Controllo qualità	Parametro / significato
RSD/RR% check	RSD/RR% < Il sistema risponderà con la procedura definita se le deviazioni standard o gli intervalli relativi sono maggiori o uguali al valore specificato. RSD ! Per le linee contrassegnate da "+", verrà controllato RSD% o RR%.
Calib. check	R²(adj.) Il coefficiente di determinazione della regressione R ² (adj.) deve essere maggiore o uguale al valore specificato. In caso contrario, il sistema risponderà come selezionato. R² ! Per le linee contrassegnate da "+", verrà controllato R²(adj.) .
Recal. check	Rec.Fact. > Limite superiore del fattore di ricalibrazione Rec.Fact. < Limite inferiore del fattore di ricalibrazione. La risposta selezionata verrà attivata se i fattori di calibrazione si trovano oltre questi limiti specificati. Rec. ! Per le linee contrassegnate da "+", verrà controllato il fattore di ricalibrazione.

Vedere a riguardo anche

📖 Specificazione delle analisi statistiche – finestra Method / Statistics [▶ 42]

3.2.9 Specificazione dei formati per i risultati - finestra Method / Output

Nella finestra **Method / Output** specificare il numero di cifre decimali dei risultati presentati sullo schermo e sui tabulati, i tipi di output aggiuntivi, e l'ordine delle linee per un'analisi dei diversi elementi nel tabulato.

Nell'elenco, definire per ogni singolo elemento il numero delle cifre decimali per la visualizzazione e i tabulati dell'intensità e dei valori di concentrazione, e l'ordine col quale appariranno sul tabulato.

Elementi della finestra 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

Elementi	Descrizione
Signif. figures / (Ints.)	Numero di cifre significative dei valori di intensità
Dec. places / Conc.	Numero di cifre decimali dei valori di concentrazione
Signif. figures / Conc.	Numero di cifre significative dei valori di concentrazione
100% norm.	La concentrazione del campione originale (Conc. 2) viene convertita nel valore percentuale in relazione alla concentrazione totale. La concentrazione totale è la somma delle concentrazioni delle linee contrassegnate da "+".
Oxide factor	Se viene selezionato un ossido, la concentrazione del campione originale (Conc. 2) viene convertita in concentrazione/contenuto dell'ossido. Il fattore dell'ossido viene visualizzato tra parentesi, ad es. Ti viene convertito in TiO ₂ moltiplicandolo per 1.6681.
Print order	Ordine nel quale i dati della linea vengono visualizzati nel report.

4 Sequenze

La sequenza serve a specificare campioni e azioni nell'ordine di esecuzione desiderato in una misurazione. Si basa su un metodo caricato, il quale contiene le informazioni sul tipo di calibrazione, le analisi statistiche, il controllo qualità, ecc. È inoltre possibile inserire direttamente alcuni dati di descrizione dei campioni, quali il nome del campione e la posizione sulla griglia dei campioni. Questi dati vengono salvati con la sequenza.

4.1 Creazione, salvataggio e apertura di sequenze

Come i metodi, le sequenze vengono salvate in un database comune. Salvare e aprire le sequenze nella finestra del database.

Finestra del database per sequenze

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

Creazione di una nuova sequenza

- ▶ Per aprire la finestra **Sequence**, cliccare su  nella barra delle icone. In alternativa si possono selezionare le voci di menu **File | New Sequence** o **Method Development | Sequence**.
- ▶ Impostare le seguenti voci.
- ▶ Cliccare su **[Accept]** per rilasciare la sequenza per le successive misurazioni o salvare la sequenza.

Salvataggio di una sequenza

- ▶ Nella finestra **Sequence** cliccare su **[Save]**. In alternativa, selezionare la voce di menu **File | Save | Sequence**.
- ▶ Nel campo **Name** della finestra del database, inserire il nome della sequenza.
- ▶ Nel campo **Cat.** (categoria), è possibile, in via facoltativa, inserire un identificatore supplementare di tre caratteri per facilitare una futura ricerca di sequenze nel database.
- ▶ Nel campo **Description**, è possibile, in via facoltativa, inserire informazioni riguardo la sequenza.
- ▶ Salvare la sequenza con **[Save]**.
 - ✓ In tal modo, la sequenza verrà salvata nel database. Se si sceglie un nome della sequenza esistente, il metodo già esistente non verrà sovrascritto, ma verrà invece creata una nuova versione nel database.

Apertura di una sequenza

- ▶ Aprire la finestra del database in uno dei seguenti modi:
 - Cliccare sull'icona  posta vicino al campo **Sequ** sulla barra degli strumenti.
 - Selezionare la voce di menu **File | Open Sequence**.
 - Nella finestra **Sequence** cliccare su **[Open]**.
- ▶ Selezionare la sequenza desiderata dall'elenco.
- ▶ Nel campo **Cat.** è possibile definire di visualizzare soltanto una sequenza della categoria specificata.
Se si desidera vedere le sequenze di tutte le categorie, cancellare la voce inserita nel campo **Cat.**
- ▶ Attivare la casella **Current version only** se si desidera soltanto vedere la sequenza dal numero di versione più alto in caso di sequenze dallo stesso nome.
- ▶ Aprire la sequenza selezionata con **[OK]**.

Vedere a riguardo anche

 Gestione dei metodi e delle sequenze [▶ 121]

4.2 Funzioni di dialogo nella finestra Sequence

Dopo aver cliccato su , si apre la finestra **Sequence**.

Finestra Sequence

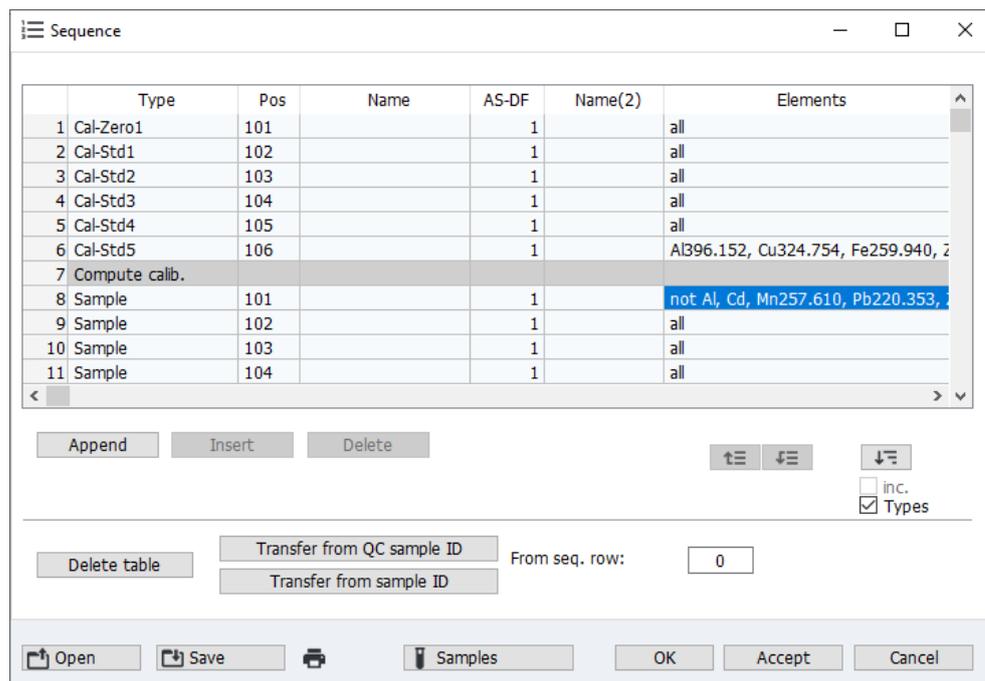


Tabella delle sequenze di campioni ed azioni

La tabella mostra i campioni e le sequenze di azioni selezionati nell'ordine di trattamento. Sono visualizzate le seguenti informazioni:

Colonna	Spiegazione
Type	Tipo di campione o fase di analisi
Pos	Posizione del campione sul vassoio del campionatore (se utilizzato)

Colonna	Spiegazione
Name	<p>Nome del campione</p> <p>Questa voce è opzionale. Il nome dei campioni di calibrazione e QC viene preso dal metodo, nel caso in cui questo specifichi un nome per il campione.</p> <p>Per i campioni di analisi e QC, i nomi possono essere trasferiti dal file di informazioni del campione.</p>
Name (2)	Designazione supplementare per l'identificazione del campione (opzionale).
Elements	<p>Selezionare gli elementi che devono essere analizzati in un campione o per i quali si devono eseguire azioni speciali.</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ none La selezione attuale verrà cancellata. ▪ all Tutti gli elementi definiti nel metodo verranno determinati (impostazione predefinita). ▪ Simbolo dell'elemento Verranno determinati soltanto gli elementi specificati, ad es. "Cu, Pb". ▪ Linea dell'elemento (simbolo + lunghezza d'onda) Verrà determinata soltanto la linea dell'elemento specificata, ad es. "Mn 257.610, Ca 315.887". ▪ not Simbolo dell'elemento o linea dell'elemento Gli elementi o le linee dell'elemento specificati non verranno determinati, ad es. "not Cu, Pb", "not Mn 257.610, Ca 315.887"

Tasti

I tasti consentono di aggiungere o eliminare campioni e azioni all'elenco delle sequenze, o accettare i dati del campione esistenti.

Tasto	Spiegazione
[Append]	Aggiunge una nuova riga al termine dell'elenco e apre la finestra Edit sequence .
[Insert]	Inserisce una nuova riga sopra al punto selezionato nell'elenco.
[Delete]	Elimina le righe selezionate.
[Delete table]	Elimina l'intero elenco delle sequenze.
[Transfer from QC sample ID]	<p>Trasferisce informazioni riguardo il campione QC e la posizione nel campionatore dalla finestra Samples / QC sample information.</p> <p>Le informazioni dalla tabella ID dei campioni QC sono inserite nella tabella delle sequenze. La prima riga con il nuovo ID campione deve essere definita nel campo From seq. row.</p>
[Transfer from sample ID]	<p>Trasferisce informazioni riguardo il nome del campione, la posizione nel campionatore e gli elementi da analizzare dalla finestra Samples.</p> <p>Le informazioni dalla tabella ID dei campioni sono inserite nella tabella delle sequenze. La prima riga con il nuovo ID campione deve essere definita nel campo Samples.</p>
[Samples]	Apri la finestra Sample ID .

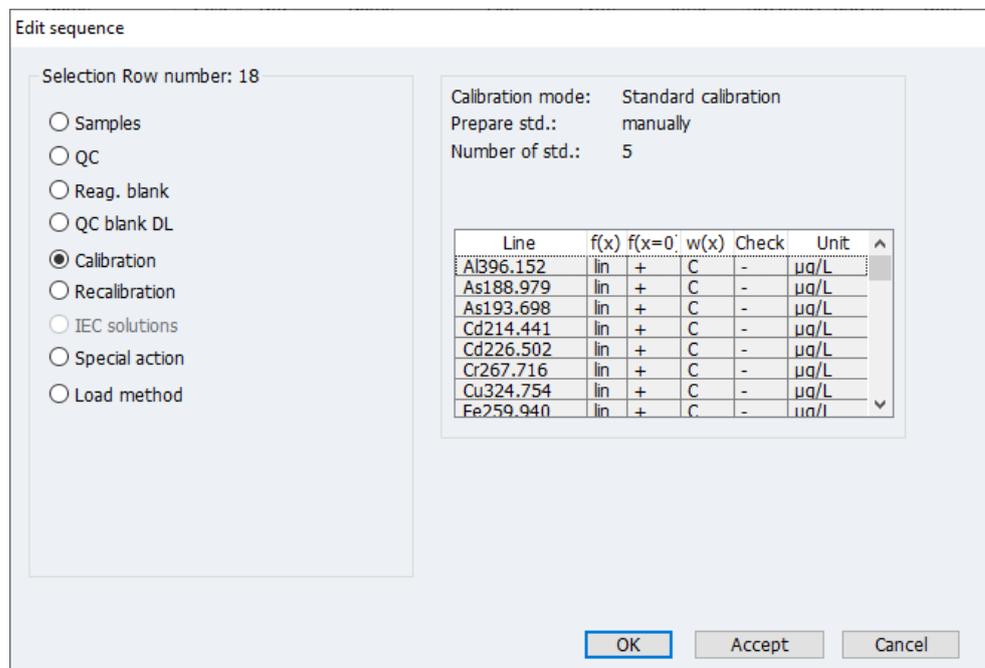
Vedere a riguardo anche

- 📖 Comandi di uso comune [▶ 14]
- 📖 Selezione di linee/elementi per un'azione/analisi del campione [▶ 56]

4.3 Combinazione di campioni e sequenze di azioni per la sequenza

- ▶ Caricare o creare un metodo.
- ▶ Aprire la finestra **Sequence** cliccando su .
- ▶ Cliccare su **[Append]**. Comparire la finestra **Edit sequence**.

Finestra Edit Sequence con la selezione della calibrazione



Edit sequence

Selection Row number: 18

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

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

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

- ▶ Selezionare una dopo l'altra l'opzione per i campioni e le azioni e trasferirle all'elenco delle sequenze mediante **[Accept]**:

Campione/azione	Descrizione
Samples	Misura il numero dei campioni specificati in Number .
QC samples	Misura un campione QC e lo valuta come specificato nel metodo. Selezionare dall'elenco un campione QC specificato nel metodo. I parametri del campione QC sono visualizzati nel campo opposto.
Reag. blank	Misura il valore del bianco.
QC blank DL	Misura il valore del bianco per la determinazione dei limiti di rivelabilità e determinazione in conformità al metodo del valore del bianco.
Calibration	Misura i campioni di calibrazione e avvia la calibrazione in base alle opzioni definite nel metodo.
Recalibration	Misura i campioni di calibrazione forniti per la ricalibrazione ed esegue la ricalibrazione.
IEC solutions	Soltanto per le correzioni del picco con IEC Misura le soluzioni IEC.
Special action	Esegue azioni che non influenzano direttamente la misurazione dei campioni.
Load method	Carica un metodo salvato, ad es. per avviare l'analisi di un altro elemento dentro una sequenza. Con  si può aprire la finestra del database con i metodi salvati. Selezionare uno dei due metodi salvati.

- ▶ Dopo aver selezionato l'ultima combinazione campione/azioni della sequenza, accettarla mediante **[OK]**, quindi tornare alla finestra **Sequence**.

- ▶ L'opzione **all** è stata selezionata nella tabella delle sequenze per ogni combinazione campione/azione come predefinita per l'elemento da analizzare. Cliccando sulla cella della tabella **Elements** della combinazione campione/azione in questione è possibile modificare questa impostazione nella finestra.
- ▶ Quando si utilizza il campionatore:
Definire la posizione (Pos) dei campioni nel campionatore. Le posizioni della calibrazione e dei campioni QC sono presi automaticamente dal metodo. Tuttavia è possibile modificare le posizioni; le posizioni impostate nella sequenza hanno sempre la priorità.



NOTA

I dati dei campioni da analizzare dovrebbero essere inseriti nella finestra **Sample ID** e quindi trasferiti all'elenco delle sequenze.

Vedere a riguardo anche

- 📖 Combinazione di campioni e sequenze di azioni per la sequenza [▶ 54]
- 📖 Inserimento di azioni speciali nella sequenza [▶ 55]

4.4 Inserimento di azioni speciali nella sequenza

Le azioni speciali nella sequenza sono azioni che non influenzano direttamente la misurazione. Le azioni speciali possono essere selezionate nella finestra **Edit sequence**.

Azioni speciali selezionabili nella finestra Edit sequence

Edit sequence

Selection Row number: 25

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

Special action

Plasma off
 Dark current meas.

 Waiting time
 Pause
 Beep
 Repeat autom.
 While:
 Show calib. plots
 Clean system [s]:

OK Accept Cancel

Azione	Descrizione
Extinguish plasma	Spegne il plasma.
Dark current meas.	Esegue una ulteriore misurazione dell'oscurità. Misura l'oscurità del segnale quando l'otturatore è chiuso. La misurazione dell'oscurità viene sempre effettuata automaticamente, anche nel caso in cui non sia stata inserita nella sequenza.

Azione	Descrizione
Waiting time	Attendere il tempo immesso nel campo (in minuti), quindi continuare l'analisi. Se si utilizza un campionatore, la cannula rimane in posizione di lavaggio e il liquido di lavaggio continua a essere aspirato.
Pause	Arresta l'analisi. La sequenza può essere continuata mediante  o mediante la voce del menu Routine Continue .
Beep	Consente al PC di generare un segnale acustico, ad es. per indicare il termine della calibrazione. (Richiede una scheda audio e casse.)
Repeat / While	Definisce un loop (ripetizione) nella sequenza. La parte della sequenza racchiusa da punto di avvio Repeat e il punto di fine While viene ripetuta fino al raggiungimento del criterio di cancellazione. Come criterio di cancellazione, è possibile specificare un numero di loop o un tempo espresso in minuti. Per una misurazione online (quale parte della manutenzione a distanza) deve essere attivata l'opzione autom.. Ciò previene il messaggio di segnalazione per il dosaggio del campione nella modalità manuale.
Show calib. plots	Mostra la curva di calibrazione durante la sequenza in corso. In questo caso si prosegue con la misurazione solo in seguito alla conferma della calibrazione con [OK] .
Clean system	Lava il percorso del campione fino alla torcia con la soluzione di lavaggio in modalità normale. Immettere il tempo di lavaggio nel relativo campo.

4.5 Selezione di linee/elementi per un'azione/analisi del campione

Nella sequenza, tutti gli elementi per l'analisi dei campioni o per l'esecuzione di azioni sono preimpostati per essere attivati. Se si desidera escludere degli elementi per l'analisi di un campione o un'azione, procedere nel modo seguente:

- ▶ Nella finestra **Sequence** cliccare sulla cella della tabella del campione o azione corrispondente. Compare la finestra **Select elements and lines**. Tutti gli elementi/linee impostati nel metodo sono preimpostati per essere attivati. Nell'elenco **Elements**, tutti gli elementi sono evidenziati in blu.
- ▶ Per escludere completamente un elemento, rimuovere la selezione cliccando sull'elemento corrispondente. Per attivare l'elemento, cliccare nuovamente su quell'elemento.
- ▶ Se sono state impostate diverse linee per un elemento nel metodo e si desidera utilizzare soltanto alcune linee, selezionare tali linee con un click del mouse nell'elenco **Line**.
- ▶ I tasti **[all]** e **[none]** servono rispettivamente a selezionare o escludere tutti gli elementi per l'analisi/azione.
- ▶ L'opzione **Not (invert selection)** serve a escludere tutte le linee / gli elementi selezionati dall'analisi/azione. Verranno analizzati soltanto gli elementi / le linee non selezionati. Nell'elenco, gli elementi/linee saranno preceduti da **"not"**.

Il campo di output elenca tutti gli elementi/linee selezionati. Gli elementi/linee possono essere modificati direttamente nella cella della tabella tornando alla finestra "Sequence".

Finestra 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

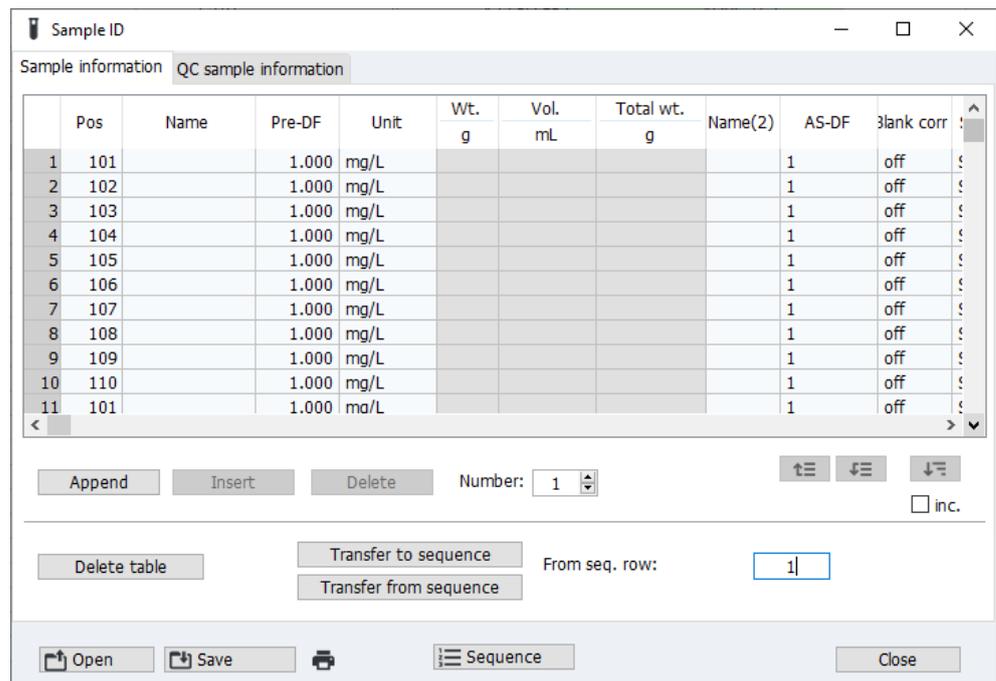
Al, Cr, Fe, As188.979, Cd226.502

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

5 Dati del campione (ID campione)

I dati del campione (ID campione) includono i dati specifici per i campioni dell'analisi corrente e i campioni QC, quali il nome del campione, la posizione sul campionatore, il peso, la diluizione o l'unità della concentrazione. I nomi e le posizioni dei campioni possono essere trasferiti alla tabella delle sequenze con un click del mouse. I dati sono salvati come una tabella nel formato CSV e possono essere modificati in un foglio elettronico, ad es. Excel. È possibile anche il percorso inverso: tabelle di campioni create esternamente possono essere importate nell'ASpect PQ.

La finestra **Sample ID** può essere aperta cliccando su  nella barra delle icone.



5.1 Creazione, salvataggio e apertura dei dati del campione

- Creazione di un nuovo record di ID campione
 - ▶ Per aprire la finestra **Sample ID**, cliccare su  nella barra delle icone. In alternativa, aprire la finestra **Sample ID** con i comandi di menu **Method Development | Sample ID** o **File | New Sample Information File**.
 - ▶ Effettuare le impostazioni per i campioni e i campioni QC.
 - ▶ Salvare il record di dati.

- Salvataggio di ID campione
 - ▶ Nella finestra **Sample ID** cliccare su **[Save]**. In alternativa, selezionare il comando di menu **File | Save | Sample information**. Si apre la finestra standard **Save as**.
 - ▶ Nel campo **File name**, inserire il nome desiderato per i dati del campione.
 - ▶ Salvare i dati del campione con **[Save]**.

- Apertura dei dati del campione
 - ▶ Aprire un file dei dati del campione mediante uno dei modi seguenti:
 - Cliccare sull'icona  posta vicino al campo **Samples** sulla barra degli strumenti.
 - Selezionare la voce di menu **File | Open Sample Information File**.

- Nella finestra **Sample ID** cliccare su **[Open]**.
Apparirà la finestra standard **Open**.
- ▶ Selezionare il file desiderato dall'elenco e aprirlo mediante **Open**.

Vedere a riguardo anche

- 📄 Specificazione delle informazioni dei campioni [▶ 60]

5.2 Informazioni per i campioni - finestra **Sample ID / Sample information**

La finestra **Sample ID / Sample information** include un elenco dei campioni e delle loro proprietà.

Colonna	Descrizione
Pos	Posizione del campione sul campionatore
Name	Nome del campione Questa voce è opzionale. Numero massimo di caratteri: 20
Pre-DF	Per tipo di unità liquid e solid Il fattore di pre-diluizione del campione è il fattore con il quale il campione originale è stato diluito prima di essere posizionato sul campionatore o erogato al plasma, se nessun campionatore viene utilizzato. Questo fattore è richiesto per il calcolo della concentrazione del campione originale (conc. 2).
Unit	Unità della concentrazione del campione
Wt.	Porzione pesata in grammi (soltanto per il tipo di unità solid) Massa del campione originale che è stato dissolto nella preparazione del campione. In peso è richiesto per il calcolo della concentrazione del campione originale (Conc.2).
Vol.	Volume totale o volume di riempimento in mL (soltanto per il tipo di unità solid)
Total wt.	Porzione pesata totale del campione e del solvente in grammi (soltanto per il tipo di unità liquid grav. , ad es. per gli oli).
Name(2)	Nome supplementare del campione Questa voce è opzionale. Numero massimo di caratteri: 20
Blank corr.	Correzione del valore del bianco (soltanto per il tipo di campione Sample) off Nessuna correzione del valore del bianco eseguita. on Per il calcolo della concentrazione del campione originale, il valore del bianco misurato per ultimo nella sequenza verrà sottratto.
Sample type	Scelta tra Sample e Blank
Elements	Elementi o linee da analizzare nel campione Dopo aver cliccato sulla cella della tabella, si apre la finestra Select elements and lines , nella quale sono impostate tali voci.
Tasti	Descrizione
[Append]	Inserisce il numero di nuove righe al termine dell'elenco.
[Insert]	Inserisce il numero di nuove righe prima del punto selezionato dell'elenco.
[Delete]	Elimina la riga evidenziata.

Tasti	Descrizione
Number	Campo di inserimento per il numero di file che devono essere inserite.
[Delete table]	Elimina la tabella completa o i dati del campione.
[Transfer to sequence]	Trasferisce i nomi dei campioni, le posizioni nel campionatore e gli elementi da analizzare nell'elenco delle sequenze. La prima riga dell'elenco delle sequenze dal quale i dati del campione dovrebbero essere trasferiti deve essere definita nel campo di inserimento From seq. row.
[Transfer from sequence]	Trasferisce i nomi dei campioni, le posizioni nel campionatore e gli elementi da analizzare dall'elenco delle sequenze alla tabella degli ID dei campioni. La prima riga dell'elenco delle sequenze dal quale i dati del campione dovrebbero essere trasferiti deve essere definita nel campo di inserimento From seq. row.

Vedere a riguardo anche

-  Selezione di linee/elementi per un'azione/analisi del campione [▶ 56]
-  Specificazione delle unità di misurazione [▶ 128]

5.3 Informazioni per i campioni QC – finestra **Sample ID / QC sample information**

Nella finestra **Sample ID / QC sample information** sono elencati i campioni QC.

La struttura della tabella è analoga a quella della scheda **Sample information**. Inoltre, le colonne **Type** includono le informazioni riguardo il tipo QC. La colonna delle unità è omessa dal momento che l'unità è stata definita nel metodo. La correzione del valore del bianco per i campioni QC è definita nel metodo ed è visualizzata nella colonna **Blank corr.** a scopo informativo (**on/off**).

I dati possono essere trasferiti all'elenco delle sequenze mediante il tasto **[Transfer to sequence]**.

Vedere a riguardo anche

-  Informazioni per i campioni - finestra **Sample ID / Sample information** [▶ 59]

5.4 Specificazione delle informazioni dei campioni

- ▶ Cliccare su  per aprire la finestra **Sample ID**.
- ▶ Nel campo **Number** inserire il numero dei campioni da analizzare. Quindi, cliccare su **[Append]** per inserire il corrispondente numero di righe nell'elenco.
- ▶ Nella tabella, inserire le informazioni richieste per ogni campione.
 - Se le voci da inserire nella colonna sono identiche, è possibile utilizzare  per copiare la voce della cella selezionata in tutte le successive celle della colonna.
 - Se si attiva la casella **inc.** (incremento), il valore viene aumentato di 1 nel momento in cui le informazioni sono trasferite alla cella successiva. In tal modo, è facile ad es. assegnare successive posizioni sul vassoio del campionatore o numerare consecutivamente il nome di un campione.

- I testi dei campi di inserimento possono essere copiati e incollati negli Appunti di Windows con le voci di menu **Edit | Copy** e **Edit | Insert** oppure tramite la combinazione di tasti [Ctrl+C] e [Ctrl+V]. É anche possibile selezionare il testo e aprire il menu contestuale con il tasto destro del mouse per copiarlo e incollarlo.
- ▶ Una volta inserite tutte le informazioni, specificare nel campo **From seq. row** da quale riga in avanti si desidera trasferire le informazioni del campione alla sequenza. Trasferire le informazioni con **[Transfer to sequence]**.

6 Esecuzione delle analisi e calcolo dei risultati

6.1 Descrizione dei comandi del menu e dei tasti per avviare le analisi nella finestra principale

Le sequenze sono eseguite mediante le icone nella barra degli strumenti o tramite il menu **Routine**.

Icona	Voce del menu	Funzione
	Routine Run sequence	Avvia un processo di analisi.
	Routine Run Selected Sequence Row... F6	Ripete le righe selezionate nella sequenza. Diverse righe possono essere contrassegnate utilizzando il mouse in combinazione con il tasto Ctrl e/o Shift.
	Routine Stop	Arresta il processo di analisi.
	Routine Continue	Continua una sequenza arrestata.

6.2 Accensione e spegnimento del plasma

Accensione del plasma

- ▶ Accendere il dispositivo ICP-OES mediante l'interruttore di accensione.
- ▶ Accendere il PC mediante l'interruttore di accensione e avviare il sistema operativo.
- ▶ Aprire l'erogazione del gas assicurando una pressione preliminare di 6 bar.
- ▶ Accendere il sistema di aspirazione.
- ▶ Accendere il refrigeratore a ricircolo mediante l'interruttore di accensione.
- ▶ Verificare che la torcia sia in posizione di avvio. La punta dell'iniettore deve essere situata a circa 1-2 mm sotto il bordo inferiore della bobina di induzione.
- ▶ Chiudere lo sportello dello scomparto del plasma.
- ▶ Controllare i tubi della pompa. Sostituire i tubi che non sono più flessibili o che mostrano gravi segni di abrasione.
- ▶ Serrare i tubi della pompa tra i due tappi nella pompa sul dispositivo ICP-OES.

Posizionare le guide dei tubi sopra i tubi e attaccarle con le leve di serraggio. Assicurarsi che le leve di serraggio scattino in posizione!

Attenzione!

Tenere conto della direzione del flusso della pompa. Questa pompa ruota in senso antiorario.

- ▶ Assicurare che la bottiglia per le analisi contenga sufficiente soluzione di lavaggio.

Nota:

la soluzione di lavaggio deve avere lo stesso contenuto di acido dei campione e degli standard. Utilizzare una soluzione di acido nitrico al 2% salvo diversamente specificato.

- ▶ Controllare il livello di riempimento della bottiglia di scarico e svuotarla se lo spazio rimasto per le analisi è troppo poco.

- ▶ In caso di funzionamento manuale senza campionatore, Immergere il tubo di aspirazione del campione nella soluzione di lavaggio. Durante la procedura di accensione del plasma non deve fluire più aria.
- ▶ Avviare il programma ASpect PQ.
- ▶ Se il sistema non è stato utilizzato per un lungo periodo di tempo (più di una settimana) o se la camera del nebulizzatore è stata smontata, spurgare la camera e la torcia utilizzando gas nebulizzatore per espellere ogni residuo d'aria dal sistema:
 - Aprire con  la finestra **Plasma / Control** Cliccare su **[Purge spray chamber]**.
- ▶ Accendere il plasma.
 - Aprire con  la finestra Plasma / Control e cliccare su **[Ignite plasma]**.
- ▶ Seguirà una fase iniziale nella quale la torcia viene lavata con argon e i circuiti di sicurezza del dispositivo ICP-OES vengono controllati. Questa fase dura circa 1 min. Nel caso sia tutto a posto, il plasma viene acceso. Verificare che il plasma si stia formando correttamente, ossia che il plasma assuma una forma conica, che si estenda oltre la bobina di induzione e che si assottigli verso l'alto.
- ▶ In caso di formazione di un anello di plasma (il plasma si forma soltanto all'interno della bobina di induzione) o se è possibile udire un tintinnio, premere l'interruttore rosso di disattivazione del plasma (OFF) sul lato sinistro del dispositivo. Prima del successivo tentativo di accensione, verificare che il tubo del campione sia immerso nella soluzione di spurgo e che l'erogazione del gas e il refrigeratore a ricircolo funzionino correttamente.
 - ✓ Il plasma si accende, la pompa peristaltica e il raffreddamento del rilevatore si avviano. Il dispositivo ICP-OES è pronto per la misurazione dopo un breve periodo di riscaldamento.



NOTA

Prima dell'accensione del plasma, circuiti di sicurezza interni controlleranno il flusso del gas, il raffreddamento e lo scarico, e verificheranno che la torcia sia in posizione operativa (fissata alla regolazione dell'altezza) e che lo sportello della camera del campione sia chiuso. Se viene rilevato un guasto in uno dei componenti, il plasma non si accenderà.

Spegnimento del plasma e del dispositivo ICP-OES

- ▶ Una volta completata l'analisi, lasciare scorrere la soluzione di spurgo per circa 3 minuti, quindi fare scorrere acqua attraverso il sistema per 1 minuto. Quindi, lasciare funzionare a secco il dispositivo. Qualora sia necessario sostituire dei tubi, questi saranno svuotati dell'acido!
- ▶ Spegnere il plasma nel software ASpect ICP cliccando su  nella barra degli strumenti. In alternativa, con  aprire la finestra **Plasma** e cliccare su **[Extinguish plasma]**.
- ▶ Uscire dal programma ASpect PQ mediante **File | Quit**.
- ▶ Confermare la richiesta riguardo lo spegnimento del gas di lavaggio per il rilevatore con **[Yes]** se si desidera spegnere il gas di lavaggio. Se il funzionamento viene interrotto per un breve periodo di tempo (massimo 30 minuti), non spegnere il gas di lavaggio. Ciò consentirà di risparmiare tempo durante la procedura di accensione fino a che il rilevatore è sufficientemente spurgato.
- ▶ Attendere la comparsa del messaggio che dichiara che il dispositivo e il raffreddamento possono essere spenti.
- ▶ Spegnere il dispositivo ICP-OES e il campionatore, se applicabile dai loro rispettivi interruttori.

- ▶ Staccare i tubi della pompa del dispositivo ICP-OES.
 - Allentare le leve di serraggio per assicurare che le guide dei tubi non esercitino più pressione sui tubi.
 - Estrarre i tappi dei tubi su un lato della pompa dal loro blocco.
- ▶ Nel caso in cui venga utilizzato il campionatore, staccare il tubo della pompa nello stesso modo del tubo della pompa del dispositivo ICP-OES.
- ▶ Chiudere l'erogazione di gas dopo aver spento i dispositivi.
- ▶ Spegnerne il refrigeratore a ricircolo mediante l'interruttore di accensione.
- ▶ Spegnerne l'unità di aspirazione.
- ▶ Arrestare Windows e spegnere il PC.
 - ✓ L'analizzatore è ora spento.



NOTA

Attendere che il dispositivo ICP-OES si raffreddi prima di spegnerlo!
Dopo lo spegnimento del plasma, attendere almeno 30 secondi prima di spegnere il dispositivo mediante l'interruttore di accensione.

Vedere a riguardo anche

 Avvio di ASpect PQ [▶ 7]

6.3 Avvio di un'analisi

Dopo aver selezionato il metodo, la sequenza ed eventualmente i dati del campione, il sistema possiede tutte le informazioni necessarie all'avvio di un processo di analisi.

Il dispositivo deve essere stato preparato per la misurazione:

- Il plasma è stato acceso e sta bruciando per il tempo di riscaldamento necessario per il metodo.
- Quando si utilizza il campionatore: I campioni sono pronti sul campionatore.

Salvataggio dei risultati durante il processo di analisi

I risultati dell'analisi vengono salvati in un database nella cartella preimpostata o in una sottocartella impostata dall'utente direttamente durante la misurazione. È inoltre possibile salvarli in un nuovo database o aggiungerli ad un database esistente. Non è comunque possibile sovrascrivere un risultato di un database scegliendo lo stesso nome.

Finestra Start

Ad ogni routine di misurazione apparirà automaticamente una richiesta per il salvataggio dei risultati. A questo scopo si apre una finestra **Start** con le seguenti opzioni per il file dei risultati:

Opzione	
Name	Inserire qui il nome desiderato per il database. New file/list Se attivata, deve essere inserito un nuovo nome del file. Il programma controlla che il nome sia già esistente. Il file esistenti non possono essere sovrascritti. Append to file/list I nuovi risultati verranno aggiunti ai file dei risultati esistenti. Aprire la finestra di dialogo cliccando su Scegliere un file esistente dall'elenco visualizzato.
Folder	Scegliere la cartella di destinazione del file.
Description	Qui è possibile inserire un commento che verrà salvato assieme ai risultati di analisi. Questa voce è opzionale.
Extinguish plasma if error occurs	Spegne il plasma se la misurazione viene cancellata con un messaggio di errore.

Il file contiene i risultati della misurazione e della valutazione e le informazioni sull'ID del campione. Inoltre, i parametri del metodo vengono salvati nei database dei risultati.

Il database dei risultati viene salvato con l'estensione ".tps" (parametri del metodo, intensità e concentrazioni) e ".spk" (dati spettrali grezzi).

Avvio della misurazione

- ▶ Avviare la misurazione di routine cliccando su  o selezionando la voce di menu **Routine | Run sequence**.
- ▶ Nella finestra **Start**, selezionare un nome del file per il file dei risultati. È inoltre possibile salvare il risultato in un nuovo file o aggiungerlo a un file esistente. Non è possibile sovrascrivere un file esistente. In seguito alla selezione del nome del file, la misurazione di routine si avvierà in base alle impostazioni effettuate nel metodo e nella sequenza.
- ▶ Se si inseriscono i campioni manualmente senza campionatore, seguire le istruzioni per la disposizione dei campioni sullo schermo. Se si utilizza un campionatore, la misurazione opera in automatico.

Visualizzazione durante il processo di analisi

Mentre la misurazione è in corso, i risultati vengono visualizzati in tempo reale nella finestra principale. Nell'elenco delle sequenze della finestra principale, viene registrato il progresso della misurazione. Le righe con le azioni successive sono contrassegnate nelle colonne dai simboli seguenti:

Icona	Significato
-	Non ancora misurato/eseguito.
O	Misurazione in corso.
+	Già misurato/eseguito.

Visualizzazione della finestra dei risultati

Opzionalmente è inoltre possibile visualizzare le finestre **Spectrum Plot**, **Signal plot**, **Bar graph**, **Report window** e **Sample conc. in calibration curve** con il risultato attuale. Queste finestre di visualizzazione possono essere selezionate nella finestra **Options / Analysis sequence**. Le finestre dei risultati possono essere mostrate o nascoste durante le analisi.

- ▶ Per aprire le finestre, utilizzare il comando del menu **View | Open Results Windows F7** o il tasto funzione F7.
- ▶ Per chiudere le finestre, utilizzare il comando del menu **View | Close Results Windows F8** o il tasto funzione F8.
- ▶ La finestra può anche essere aperta durante l'analisi mediante .

Tasti della barra delle icone

Durante la misurazione vengono mostrati nella barra delle icone i tasti indicati di seguito.

Tasto	Descrizione
	Aprire la finestra Results windows , dove possono essere attivate tutte le finestre dei risultati indipendentemente dalle voci inserite nella finestra Options / Analysis sequence . Attiva l'opzione delle finestre dei risultati, e rilascia la finestra cliccando su [Results windows] .
	Attiva la finestra del metodo. È possibile leggere un metodo, ma non cambiarlo.
	Attiva la finestra della sequenza. La sequenza può essere espansa quando l'analisi è in corso. La finestra della sequenza contiene il tasto [Samples] con il quale si apre la finestra Sample ID per l'aggiunta dei dati del campione.

Vedere a riguardo anche

- 📖 Opzioni per la sequenza di analisi [▶ 134]

6.4 Interruzione e ripresa della sequenza di analisi

I processi di analisi possono essere interrotti e ripresi più tardi.

- ▶ Con la voce di menu **Routine | Stop** o cliccando su  si interrompe immediatamente il processo di analisi.
- ▶ Mediante **Routine | Continue** o  una routine interrotta può essere ripresa.

La finestra **Continue sequence** si apre allo stato dell'azione prima dell'interruzione.

Per cambiare il metodo, attivare l'opzione **Continue with modified method**. Ciò comporta un nuovo inserimento del metodo nei file dei risultati, e il salvataggio di un'altra versione del metodo.

La misurazione può essere proseguita nel modo seguente:

Opzione	Descrizione
Continue	Continua con il campione corrente, la linea corrente e la serie statistica corrente.
First statistical run	Continua con il campione corrente, la linea corrente e la prima serie statistica.
First element	Continua con il campione corrente, la prima linea e la prima serie statistica.
From table row ->	Riprende la sequenza dal punto successivo nella tabella.

6.5 Ripetizione delle azioni della sequenza

È possibile ripetere singole azioni in una sequenza.

- ▶ Nella finestra principale, sulla scheda **Sequence** oder **Sequence/Results**, selezionare la riga (o le righe) la cui azione deve essere ripetuta.
Per effettuare selezioni multiple, cliccare sulle rispettive righe premendo i tasti Ctrl o Shift.
- ▶ Avviare la misurazione di routine cliccando su o utilizzando il comando del menu **Routine | Run Selected Sequence Row... F6**.
- ▶ Nella finestra **Start** selezionare il nome del file in cui salvare il risultato della misurazione ripetuta.
È inoltre possibile salvare il risultato in un nuovo file o aggiungerlo a un file esistente. Non è possibile selezionare un file di risultati esistenti e sovrascriverlo.
✓ Quindi, verrà avviata la ripetizione dell'azione selezionata.



NOTA

Se nel frattempo si effettuano delle modifiche nel metodo, durante la ripetizione della sequenza o di singole righe viene utilizzato il metodo modificato, il quale viene salvato come nuova versione assieme ai risultati.

6.6 Rielaborazione dei risultati di analisi

La rielaborazione dei risultati di analisi è utilizzata per le modifiche delle condizioni di analisi, ad es. modifica della funzione di calibrazione o del metodo, per essere effettivi durante l'analisi. Anche una modifica nei dati del campione, ad es. del nome del campione o dei fattori di diluizione, richiede una rielaborazione affinché i risultati di analisi ne tengano conto.

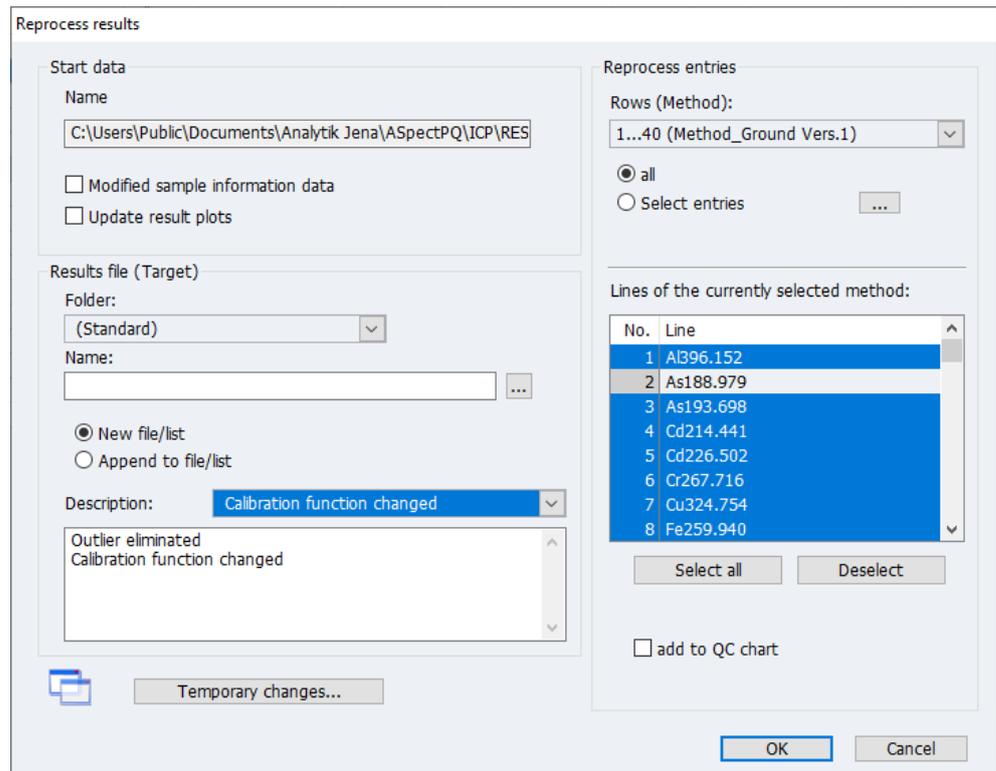
L'utente può quindi decidere se aggiungere i dati rielaborati al file dei risultati correnti o salvarli in un nuovo file. Non è possibile manipolare i dati originali. Se in un file dei risultati la rielaborazione è ripetuta diverse volte con parametri differenti, ogni rielaborazione fa riferimento ai dati originali del file dei risultati.



NOTA

Ad ogni rielaborazione verrà salvato una nuova versione del metodo.

Opzioni di inserimento nella finestra Reprocess results



Opzione/campo	Descrizione
Start data	<p>Selezione dei dati di inserimento</p> <p>Name Visualizzazione dei nomi dei file dei risultati i cui dati sono rielaborati</p> <p>Modified sample information data Da attivare se i dati nel file delle informazioni del campione, quale ad es. il fattore di diluizione, sono stati cambiati</p> <p>Update result plots Le finestre dei risultati, ad es. Display spectra, sono attualizzate come durante la misurazione. Nota: ciò ha l'effetto di rallentare la rielaborazione.</p>
Results file Target	<p>Seleziona il luogo di salvataggio dei dati dei risultati rielaborati.</p> <p>New file/list Salva i risultati dei dati in un nuovo file Per i file dei risultati, selezionare in Folder e Name la cartella di destinazione dei dati calcolati. Le osservazioni inserite in Description vengono salvati assieme ai dati dei risultati.</p> <p>Append to file/list I dati rielaborati sono aggiunti al file dei risultati esistente.</p>
Reprocess entries	<p>Selezionare le righe per la rielaborazione.</p> <p>all Rielabora tutte le voci inserite nell'elenco dei risultati.</p> <p>Select entries Rielabora solo le righe della sequenza selezionate. Cliccare su ... e selezionare nella finestra Select entries tutte le righe della sequenza da rielaborare.</p>

Opzione/campo	Descrizione
	Lines of the currently selected method Selezionare nell'elenco tutte le linee che devono essere rielaborate. Con [Select all] si selezionano tutte le linee. [Deselect] rimuove tutte le selezioni effettuate nell'elenco delle linee.
[Temporary changes]	Salva modifiche temporanee per la rielaborazione (offset della lunghezza d'onda, marcatori di cancellazione) (estensione ".rep"). I dati vengono successivamente caricati in modo automatico con i file dei risultati corrispondente (con lo stesso nome).
add to QC chart	Se attivo, i risultati del tipo di campione QC sono inseriti nei grafici QC durante la rielaborazione.

Rielaborazione dei dati

- ▶ Le modifiche avvengono nei parametri del metodo o nella finestra **Sample ID**.
- ▶ Cliccare su  o selezionare la voce di menu **Routine | Reprocess**. Si apre la finestra **Reprocess results**.
- ▶ Specificare i dati di inserimento (nome, informazione modificata sul campione, la visualizzazione modificata dei risultati), la cartella di destinazione e il nome del file di destinazione.
Nota: se si effettua una rielaborazione a causa della modifica delle informazioni sul campione, attivare l'opzione **Modified sample information data**. In caso contrario, queste modifiche non saranno considerate.
- ▶ Selezionare le righe/linee per le quali eseguire la rielaborazione.
- ▶ Avviare la rielaborazione con **[OK]**. Se non si specifica il file di destinazione, compare la richiesta "Reprocess data without saving to a permanent file??".

Sostituzione di uno standard di calibrazione

- Uno standard di calibrazione esistente può essere sostituito da uno che è stato misurato in un momento successivo. Per fare ciò, procedere nel modo seguente:
- ▶ Nella finestra principale, selezionare la riga dello standard di calibrazione da sostituire nella scheda **Sequence** o **Sequence/Results**.
 - ▶ Avviare la misurazione della riga della sequenza cliccando su .
 - ▶ Nella finestra **Start**, definire i risultati da aggiungere al file già esistente. Quindi, si avvia la misurazione dello standard di calibrazione.
 - ▶ Aprire la finestra **Reprocess results** cliccando su .
 - ▶ Attivare l'opzione **Select entries** e cliccando su  aprire l'omonima finestra.
 - ▶ Selezionare l'ultimo standard misurato e spostarlo con i tasti freccia alla posizione dello standard che deve essere sostituito.
 - ▶ Selezionare tutte le righe che devono essere rielaborate. Nel farlo, disattivare il vecchio standard che non deve più essere incluso nel calcolo.
 - ▶ Con **[OK]** ritornare alla finestra **Reprocess results** e specificare i dati di inserimento, la cartella di destinazione e il nome del file di destinazione.
 - ▶ Avviare la rielaborazione con **[OK]**.
✓ I dati delle righe selezionate vengono rielaborati.

Sostituzione di singole linee di uno standard di calibrazione

- In alternativa è possibile sostituire uno standard anche nel modo indicato di seguito.
- ▶ Nella finestra principale, selezionare la riga dello standard di calibrazione da sostituire nella scheda **Sequence** o **Sequence/Results**.
 - ▶ Avviare la misurazione della riga della sequenza cliccando su .
 - ▶ Nella finestra **Start**, definire i risultati da aggiungere al file già esistente. Quindi, si avvia la misurazione dello standard di calibrazione.

- ▶ Nell'elenco dei risultati, cliccare col tasto destro del mouse sullo standard (la linea) che si desidera sostituire. Nel menu contestuale, selezionare la voce del menu **Sample single values**.
- ▶ Nella finestra **Sample single values** attivare la casella **Replace with entry number** e inserire il numero delle righe dello standard da sostituire nel campo di inserimento.
- ▶ Avviare la rielaborazione come descritto sopra.
 - ✓ I dati delle righe selezionate vengono rielaborati.

Vedere a riguardo anche

- 📖 Specificazione dei campioni per controllo qualità per le schede QC – finestra Method / QCS [▶ 44]

6.7 Valutazione delle misurazioni parallele all'analisi in corso (modalità offline)

Quando le misurazioni sono in corso, non è possibile valutare i risultati nella stessa finestra di programma. È tuttavia possibile avviare una seconda finestra di programma dell'applicazione in modalità offline, mentre le misurazioni sono in corso nella prima finestra. Questa modalità non consente la comunicazione con il dispositivo. Ciò nonostante, ogni altra funzione quale lo sviluppo dei metodi o il caricamento e l'analisi dei risultati può essere utilizzata parallelamente alle misurazioni attive della prima finestra del programma.

- ▶ Avviare ASpect PQ nella seconda finestra del programma utilizzando la voce del menu **File | Start Offline Program Instance**.
- ▶ Aprire il file dei risultati della misurazione attualmente in corso con la voce di menu **File | Open Results**.
I risultati misurati fino a quel momento vengono caricati nella finestra dei risultati.
- ▶ Risultati ulteriori dalla misurazione in corso sono caricati cliccando su  nella barra degli strumenti o tramite la voce del menu **View | Update results list**.

I risultati possono essere modificati ulteriormente.



NOTA

Nella rielaborazione, i risultati ricalcolati vengono salvati in un nuovo database. Non è possibile accedere al file dei risultati originale.

6.8 Visualizzazione dei risultati e progresso dell'analisi nella finestra principale

I risultati di misurazione e la sequenza sono dettagliatamente visualizzati nella finestra principale nello sfondo dello spazio di lavoro.

La presentazione di schede differenti nella finestra principale fornisce una buona panoramica dei risultati di misurazione e delle analisi statistiche.

È possibile selezionare le seguenti schede:

- **Sequence/Results** (contenuto delle schede **Sequence** e **Results** in una scheda)
- **Sequence** (visualizza la sequenza corrente)

- **Results** (visualizzazione grafica dei risultati di misura)
- **Overview** (riepilogo dei risultati di misurazione)

La barra di stato della finestra dei risultati mostra in nome dei file dei risultati correnti.

Finestra principale di ASpect PQ con i risultati

No.	Sample type	Name	Line	Type	Ints.	SD(Ints.)	RSD%	Date	Time	Single values(Ints.)
1	Cal-Zero1		26	Zn206.200	219181	6819	3.11	09.06.2020	7:53	222056 215223 215215
2	Cal-Std1		29	Cal-Std2	259867	8899	3.42	09.06.2020	7:54	269949 256546 253106
3	Cal-Std2		30	As188.979	415005	9621	2.32	09.06.2020	7:54	405645 424866 414504
4	Cal-Std3		31	As193.698	412714	5921	1.43	09.06.2020	7:54	411585 407439 419119
5	Cal-Std4		32	Cd214.441	405201	1450	0.36	09.06.2020	7:54	406871 404261 404472
6	Cal-Std5		33	Cd226.502	413262	5665	1.37	09.06.2020	7:54	407083 418211 414493
7	Compute calb.		34	Cr267.716	415541	5289	1.27	09.06.2020	7:54	415435 410306 420883
8	Sample		35	Cu324.754	261896	10959	4.18	09.06.2020	7:54	274421 254071 257197
9	Sample		36	Fe259.940	269011	10728	3.99	09.06.2020	7:54	273929 276399 256706
10	Sample		37	Mn257.610	413670	935	0.23	09.06.2020	7:54	412597 414302 414111
11	Sample		38	Ni231.604	413624	4909	1.19	09.06.2020	7:54	410915 410666 419291
12	Sample		39	Pb220.353	413864	5528	1.34	09.06.2020	7:54	412523 409129 419939
13	Sample		40	Se196.028	406450	5125	1.26	09.06.2020	8:00	412259 404525 402567
14	Sample		41	U385.957	407953	1446	0.35	09.06.2020	8:00	409300 406425 408135
15	Sample		42	Zn206.200	263820	7084	2.69	09.06.2020	8:00	261144 258463 271852
16	Sample		43	Cal-Std3	309575	7233	2.34	09.06.2020	8:01	306787 304150 317787
17	Sample		44	As188.979	614152	2497	0.41	09.06.2020	8:01	612360 617003 613093
			45	As193.698	608941	4714	0.77	09.06.2020	8:01	605608 606881 614334
			46	Cd214.441	615167	8965	1.46	09.06.2020	8:01	604957 618795 621750
			47	Cd226.502	618917	8841	1.43	09.06.2020	8:01	609181 626442 621128
			48	Cr267.716	616188	7454	1.21	09.06.2020	8:01	607762 621925 618875
			49	Cu324.754	309952	7909	2.55	09.06.2020	8:01	308892 302627 318338
			50	Fe259.940	317570	6085	1.92	09.06.2020	8:01	323616 317647 311446
			51	Mn257.610	618582	9122	1.47	09.06.2020	8:01	608675 620437 626634
			52	Ni231.604	615698	3553	0.58	09.06.2020	8:01	614263 613087 619744
			53	Pb220.353	610927	7989	1.31	09.06.2020	8:01	601705 615329 615747
			54	Se196.028	611533	3186	0.52	09.06.2020	8:01	610296 609151 615152
			55	U385.957	614426	8685	1.41	09.06.2020	8:01	623457 613687 606134
			56	Zn206.200	313301	4395	1.40	09.06.2020	8:01	308946 313222 317735

6.8.1 Scheda Sequence/Results

La scheda **Sequence/Results** contiene i dati di entrambe le tabelle **Sequence** e **Results**.

Vedere a riguardo anche

- 📄 Scheda Sequence [▶ 71]
- 📄 Scheda Results [▶ 72]

6.8.2 Scheda Sequence

Nella scheda **Sequence**, è elencata la sequenza attiva.

In questa scheda, è possibile seguire il progresso dell'analisi in corso. I diversi campioni e le funzioni speciali sono indicati nella prima colonna della tabella nel modo seguente:

Icona	Significato
-	Non ancora misurato/eseguito.
O	Misurazione in corso.
+	Già misurato/eseguito.



NOTA

Dopo la misurazione, è possibile misurare nuovamente un campione selezionato. A tale scopo, la riga del campione nella sequenza deve essere stata selezionata dalla barra degli strumenti, e quindi premuta.

6.8.3 Scheda Results

La scheda **Results** contiene tutti i risultati di misurazione e le analisi statistiche. I valori sono divisi in ulteriori tabelle per una chiara presentazione. Le schede di indice per queste tabelle si trovano nella parte inferiore della finestra.

I valori sono ordinati secondo l'ordine di misurazione dei campioni. Sono elencati gli elementi analizzati per ciascun campione.

Tabella Ints./Time

La tabella contiene le intensità e le analisi statistiche in base alle impostazioni del metodo selezionate (finestra **Method / QCC**).

Colonna	Descrizione
No.	Numero nella sequenza di analisi
Name	Nome del campione, standard o campione/standard QC
Line	Linea dell'elemento
Type	Standard interno o analita
Ints.	Valore medio delle intensità individuali misurate del campione
SD(Ints.)	Deviazione standard (valore medio)
RSD%	Deviazione standard relativa (valore medio)
Date / Time	Orario della misurazione
Single values(Ints.)	Valori individuali delle misurazioni dell'intensità

Tabella Conc.1

La tabella **Conc.1** mostra le concentrazioni analizzate del campione erogato al dispositivo ICP-OES. L'unità adottata è quella della calibrazione impostata nel metodo.

Colonna	Descrizione
No.	Numero nella sequenza di analisi
Name	Nome del campione, standard o campione/standard QC
Line	Linea dell'elemento
Type	Standard interno o analita
Unit	Unità della concentrazione
Conc.1	Concentrazione dell'analita nel campione / concentrazione dell'analita nello standard
SD1	Deviazione standard della conc. 1 (valore medio)
RSD%	Deviazione standard relativa della conc. 1 (valore medio)
R	Intervallo della conc. 1 (valore mediano)
R%	Intervallo relativo della conc. 1 (valore mediano)
Cf	Intervallo di confidenza
DF	Fattore di pre-diluizione del campione Fattore con il quale il campione originale è stato diluito prima di essere posizionato sul campionatore o erogato al plasma, se nessun campionatore viene utilizzato
Rem.	Particolarità del calcolo del valore
Ints.	Valore medio delle intensità individuali misurate delle misurazioni ripetute
SD(Ints.)	Deviazione standard dell'intensità (valore medio)
Date / Time	Data e ora della misurazione
Single values (Ints.)	Valori individuali delle intensità delle misurazioni ripetute

Tabella Conc.2

La tabella **Conc.2** mostra le concentrazioni del campione originale. Calcolando Conc.2, i dati del campione considerati sono:

- Pre-diluizione
- Porzione pesata dei solidi e volume delle soluzioni
- Fattori di conversione per altre unità

Colonna	Descrizione
No.	Numero nella sequenza di analisi
Name	Nome del campione, standard o campione/standard QC
Line	Linea dell'elemento
Type	Standard interno o analita
Unit	Unità della concentrazione
Conc.	Concentrazione del campione originale che tiene conto dei dati del campione
SD2	Deviazione standard della conc. 2 (valore medio)
RSD%	Deviazione standard relativa della conc. 2 (valore medio)
Cf	Intervallo di confidenza di Conc. 2
100% norm.	Conc. 2 normalizzata alla percentuale
Ints.	Valore medio dalle intensità determinate individualmente
SD(Ints.)	Deviazione standard dell'intensità (valore medio)
R(Ints.)	Intervallo dell'intensità (valore mediano)
Date / Time	Data e ora della misurazione
Single values (Ints.)	Valori individuali delle misurazioni dell'intensità

Tabella QC Res.

Nella tabella **QC Res.**, i risultati dei campioni QC sono:

- Valore desiderato e valore reale della concentrazione
- Tasso di recupero (tutti i tipi tranne il valore del bianco)
- Reazioni a qualsiasi deviazione (tutti i tipi tranne il valore del bianco).

Colonna	Descrizione
No.	Numero nella sequenza di analisi
Name	Nome del campione, standard o campione/standard QC
Line	Linea dell'elemento
Type	Standard interno o analita
QC (per funzioni di calibrazione)	R²(adj.) o R Slope BEC Background Equivalent Concentration
QC(per campioni QC, non per valore del bianco QC)	Conc.1 Valore desiderato Recovery Recovery rate Con campioni QC e "QC Std." viene determinato il tasso di recupero della concentrazione. Con "QC-Stock", "QC-Trend" e "QC-Matrix", viene determinato l'aumento del tasso di recupero della concentrazione generato dalle aggiunte.
QC (per limite di rivelabilità del bianco)	SD Deviazione standard delle misurazioni del bianco

Colonna	Descrizione
	LOD Limite di rivelabilità
	LOQ Limite di determinazione
Rem.	Osservazioni sugli eventi QC (ad es. >Cal.)
Ints.	Valore medio delle intensità individuali misurate
SD	Deviazione standard dell'intensità (valore medio)
Date / Time	Data e ora della misurazione
Single values (Ints.)	Valori individuali delle misurazioni dell'intensità

Tabella Error

Se durante le misurazioni si verificano errori, le corrispondenti misurazioni saranno indicate in rosso in tutte le tabelle. Nella tabella **Error**, i rispettivi errori di misurazione, inclusi errori numerici, sono documentati per iscritto.

Tabella Single values

La tabella **Single values** contiene i valori delle intensità misurati individualmente e le corrispondenti intensità di fondo.

Tabella Sample ID

La tabella **Sample ID** contiene i dati del campione.

Colonna	Descrizione
No.	Numero nella sequenza di analisi
Name	Nome del campione, standard o campione/standard QC
Line	Linea dell'elemento
Pos	Posizione del campione sul campionatore
Pre-DF	Fattore di per-diluizione Fattore con il quale il campione originale è stato diluito prima di essere posizionato sul campionatore o erogato allo spettrometro, se nessun campionatore viene utilizzato. Questo fattore è richiesto per il calcolo della concentrazione del campione originale.
Wt.	Porzione pesata in grammi La massa del campione originale in grammi che è stata dissolta nella preparazione del campione (in g). La massa è richiesta per il calcolo della concentrazione del campione originale (Conc.2).
Vol.	Volume del solvente utilizzato per diluire la porzione pesata del campione (in mL). Questo valore è richiesto per il calcolo della concentrazione del campione originale (Conc.2).
Total wt.	Porzione pesata totale (campione e solvente) (solo per il tipo di unità liquid, liquid grav.)
Name(2)	Nome supplementare del campione dalla tabella delle informazioni del campione
AS-DF	Fattore di diluizione del campionatore
Blank corr.	Correzione del valore del bianco off Nessuna correzione del valore del bianco è stata eseguita. on Per il calcolo della concentrazione del campione originale, il valore del bianco misurato per ultimo nella sequenza è stato sottratto.

Tabella User defined

Nella tabella **User defined** è possibile selezionare direttamente i parametri per i risultati di uscita e il loro ordine nella tabella.

- ▶ Cliccare su sul tasto **[Select columns]** nell'angolo in basso a destra della tabella.
- ▶ Nella finestra **Select columns**, selezionare i parametri desiderati cliccando con il mouse.
- ▶ Per cambiare l'ordine di visualizzazione, selezionare il parametro di cui si desidera modificare la posizione e spostarlo all'interno dell'elenco con i tasti **↕** e **↕**.
- ▶ Dopo essere ritornati alla finestra principale, i risultati verranno visualizzati. La larghezza delle colonne della tabella può essere modificata portando il cursore del mouse sulla linea di separazione nell'intestazione della tabella (il cursore si trasforma in una doppia freccia) e trascinando la colonna alla larghezza desiderata tenendo premuto il tasto del mouse.

Nota:

la larghezza della colonna viene memorizzata in questa schermata. Nelle altre tabelle della finestra principale, le modifiche della larghezza delle colonne vengono resettate una volta usciti dalla schermata.

Vedere a riguardo anche

- 📖 Opzioni per la sequenza di analisi [▶ 134]
- 📖 Descrizione dei contrassegni utilizzati nella visualizzazione dei valori [▶ 138]
- 📖 Dati del campione (ID campione) [▶ 58]

6.8.4 Scheda Overview

La scheda **Overview** presenta il riepilogo dei risultati di analisi. È possibile selezionare tra varie opzioni di presentazione:

- **Conc.1** – concentrazione 1
- **Conc.(RSD%)** – concentrazione 1 (deviazione standard relativa)
- **Conc.2** – concentrazione 2

Valore	Descrizione
Conc.2(RSD%)	Concentrazione 2 (deviazione standard relativa)
Ints.	Intensità
Ints.(RSD%)	Intensità (deviazione standard relativa)
Ints.(SD)	Intensità (deviazione standard)
LOD	Limite di rivelabilità
LOQ	Limite di determinazione
Recovery(Nominal val.)	Tasso di recupero (valore desiderato)
R ²	Coefficiente di determinazione
100% norm.	Conc. 2 normalizzata alla percentuale

Attivando le caselle corrispondenti è possibile visualizzare i tipi di campione indicati di seguito.

- Sample
- QC sample
- Cal-Std
- Altri

Con  si apre la finestra **Print Overview**, nella quale si può avviare la stampa dei dati visualizzati nella panoramica attuale.

Vedere a riguardo anche

📄 Funzioni di stampa in ASpect PQ [▶ 114]

6.9 Visualizzazione e modifica dei valori individuali dei campioni

È possibile visualizzare i valori individuali di un campione ed escludere valori individuali dal calcolo della concentrazione del campione.

- ▶ Cliccare con il tasto destro sulla riga della tabella dei risultati e selezionare la voce **Sample single values** nel menu contestuale.
In alternativa selezionare la riga del campione e selezionare il comando del menu **View | Sample single values**.

Finestra Sample single values

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

Summary Statistics:

- No.: 60
- Type: Cal-Std4
- Name: Kal.-Std.4
- Date/Time: 24.02.2020 16:03
- Ints.(Mean): 49046
- SD: 383
- RSD: 0.8

Buttons: Delete, Replace with entry number: 0, Edit spectra, Close

Visualizzazione dei valori individuali (tabella)

Questa tabella mostra i valori individuali del campione.

Colonna	Descrizione
No.	Numero dei singoli valori all'interno della misurazione del campione
Ints.	Intensità del singolo valore
Conc.1	Concentrazione dell'analita nel campione analizzato
Rem.	<p>none Il singolo valore entra nel calcolo del valore medio del campione.</p> <p>#MAN. Il valore è stato escluso manualmente dal calcolo del valore del campione.</p> <p>#COR. Il valore è stato automaticamente escluso dal calcolo del valore del campione a causa del test dei valori erratici di Grubbs.</p>

Dati del campione

Campo	Descrizione
No.	Numero di misurazioni nella tabella dei risultati
Type	Tipo di campione (campione, standard o campione QC)

Campo	Descrizione
Name	Nome del campione
Date / Time	Data e ora della misurazione selezionata nella tabella
Ints.(Mean)	Media calcolata dell'intensità per ogni singolo valore
SD	Deviazione standard (valore medio). Questo parametro viene visualizzato indipendentemente dal metodo statistico scelto per la misurazione (valore medio/mediano).
RSD	Deviazione standard relativa (valore medio) Questo parametro viene visualizzato indipendentemente dal metodo statistico scelto per la misurazione (valore medio/mediano).

Opzioni e tasti aggiuntivi nella finestra Sample single values

Opzione / tasti	Descrizione
[Delete] / [React.]	Esclude il singolo valore dal calcolo medio o lo include nuovamente.
[Edit spectra]	Mostra gli spettri misurati delle linee che dipendono dalla lunghezza d'onda
Replace with entry number	Soltanto per standard di calibrazione Il campione corrente deve essere sostituito durante la rielaborazione da un campione alla posizione Enr. nella tabella dei risultati.
	Per passare tra le linee dei campioni individuali a da un campione al successivo nella tabella dei risultati.

Esclusione dei singoli valori del campione

Se lo si desidera, è possibile escludere manualmente un singolo valore dal calcolo della media del campione.

- ▶ A tale scopo, marcare il singolo valore da escludere nella tabella.
- ▶ Cliccare **[Delete]** per escludere il valore del calcolo della media del campione per la rielaborazione dei risultati.
- ▶ Per includere nuovamente i valori singoli precedentemente esclusi nel calcolo della media, cliccare su **[React.]**.



NOTA

Attivando l'opzione del test dei valori erratici di Grubbs, i valori erratici possono essere rilevati tra i singoli valori ed eliminati automaticamente durante l'analisi.

Vedere a riguardo anche

-  Visualizzazione e modifica degli spettri di intensità [▶ 77]

6.10 Visualizzazione e modifica degli spettri di intensità

La visualizzazione degli spettri di intensità nella finestra **Edit spectra** viene utilizzata per i seguenti compiti:

- Calcolare il picco principale di una linea di analisi e salvarlo nel file della linea
- Calcolare la correzione di fondo con considerazione della matrice del campione e trasferirla al metodo
- Creare correzioni spettrali
- Identificare le linee adiacenti alla linea di analisi

Gli spettri di intensità possono essere visualizzati e modificati per ogni misurazione nella finestra dei risultati.

- ▶ Aprire la finestra **Edit spectra** con doppio click sulla riga del campione corrispondente nella tabella dei risultati.
In alternativa, cliccare col tasto destro del mouse sulla riga di interesse della tabella dei risultati e cliccare su **Edit spectra** nel menu contestuale. È anche possibile selezionare la riga del campione, quindi selezionare il comando del menu **View | Edit spectra**.

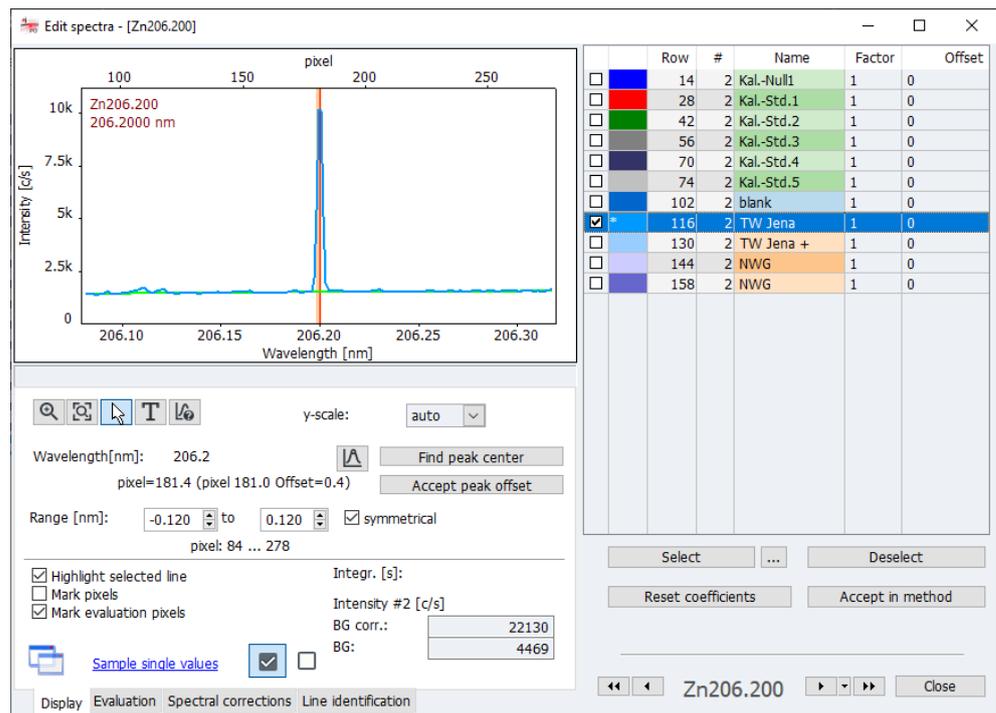
Nella finestra **Edit spectra**, tutti i campioni misurati con ogni singolo valore sono elencati per una linea di analisi alla volta. È possibile passare tra le linee individuali di analisi.

Il lato sinistro della finestra **Edit spectra** contiene il grafico dello spettro di intensità del campione (o campioni) selezionato e quattro schede per l'analisi e modifica dello spettro. Sul lato destro, i valori individuali del campione da visualizzare sono selezionati dalla panoramica.

6.10.1 Visualizzazione degli spettri – finestra Edit spectra / Display

La finestra **Edit spectra / Display** contiene una panoramica degli spettri dei campioni. È possibile determinare la posizione di un picco e applicare i parametri trovati nel file delle linee/della lunghezza d'onda come pure il metodo.

Finestra Edit spectra / Display



Selezione degli spettri / elenco dei campioni

La tabella sul lato destro elenca tutti i valori individuali del campione della linea di analisi.

- ▶ Attiva le caselle dei singoli valori che si desidera visualizzare nel grafico. Gli spettri dei valori individuali dei campioni sono visualizzati in sovrapposizione. Il colore del campo nella parte frontale della tabella è assegnato agli spettri individuali.
- ▶ Il singolo campione selezionato col mouse (barra blu nella tabella) è evidenziata in grassetto nel grafico se l'opzione **Highlight selected line** nell'angolo in basso a sinistra della finestra è attivata.

- ▶ È possibile filtrare la visualizzazione dei campioni/misurazioni ripetute nell'elenco dei campioni e la selezione per la visualizzazione grafica degli spettri (attivare la casella nell'elenco dei campioni) utilizzando i tasti sotto la tabella:
 - Cliccare accanto a **[Select]** su **...**.
 - Nella finestra **Selection** effettuare le seguenti impostazioni::

Opzione	Descrizione
all	Seleziona tutte le righe dell'elenco dei risultati nella finestra principale per la visualizzazione grafica (attiva la casella per la per la visualizzazione grafica).
from/to	Seleziona soltanto gli spettri nell'elenco dei risultati tra le righe "from/to" impostate.
Replicate	Seleziona i valori dei singoli campioni. all Seleziona tutti i valori individuali di un campione. Numero di riferimento, ad.es "2." Seleziona soltanto il valore individuale del campione che è stato selezionato
show selected replicate(s) only	Se la funzione è attiva, verranno visualizzate nell'elenco dei campioni solo le voci per la misurazione ripetuta selezionata. Se invece è inattiva, verranno visualizzati tutti gli spettri singoli e saranno caricate le voci selezionate sopra (all o from/to) della finestra principale.

- Cliccando su **[Select]** è possibile visualizzare ed effettuare la selezione degli spettri con i parametri impostati sopra.
- **[Deselect]** disattiva tutte le caselle per la visualizzazione dei valori individuali.

Immissione di fattore e offset

- ▶ Per ogni spettro, può essere inserito nella tabella un fattore e/o un offset. Uno spettro manipolato in tale maniera è allargato/compresso e spostato lungo l'asse delle x.
- ▶ Cliccando su **[Reset coefficients]**, i fattori e l'offset vengono resettati nuovamente e lo spettro ritorna al suo stato originale.

Visualizzazione degli spettri delle linee

Gli spettri selezionati vengono visualizzati nella parte sinistra. L'intensità è riportata in impulsi al secondo rispetto alla lunghezza d'onda in nanometri. Nel margine superiore del grafico viene mostrata la posizione dei pixel. Lo spettrometro è regolato per mappare il picco massimo del pixel di misurazione, ad es. 180. L'offset del picco principale deve essere corretto per ogni linea di analisi; si veda sotto.

I tasti per la vista spettrale hanno le seguenti funzioni:

Opzione / tasto	Descrizione
	Attiva lo zoom grafico. Dopo avere cliccato, selezionare la sezione spettrale da allargare tenendo premuto il tasto sinistro del mouse.
	Dopo lo zoom, ripristinare le coordinate originali.
	Attiva la modalità di selezione nel grafico dello spettro o del segnale. I punti di misurazione sono selezionati con il tasto sinistro del mouse. I valori dei punti di misurazione selezionati vengono visualizzati nel campo di uscita sotto i tasti.
	Attiva la modalità testuale. Tenendo premuto il tasto sinistro del mouse è possibile disegnare una cornice e inserire del testo nel grafico. Con un doppio click sul testo esistente apparirà una finestra per modi-

Opzione / tasto	Descrizione
	ficare o eliminare il testo. Premendo contemporaneamente il tasto Ctrl e il tasto destro del mouse è possibile spostare il testo esistente all'interno del grafico.
	Attiva la modalità di identificazione della linea. Cliccando o trascinando le linee degli elementi con il mouse alla posizione della lunghezza d'onda selezionata, vengono cercate in un database delle linee. La linea trovata verrà visualizzata sotto al grafico.
y-scale	Seleziona il dimensionamento della scala del grafico: auto. Dimensionamento automatico: Lo spettro è visualizzato con ottimizzazione della larghezza dell'asse delle ordinate. Valore Dimensionamento manuale: Deve essere selezionato dall'elenco il limite superiore dell'asse delle ordinate.
Wavelength	Mostra la lunghezza d'onda della linea di analisi.
	Imposta il picco principale manualmente.
[Find peak center]	Ricerca automaticamente il picco e corregge l'offset.
[Accept peak offset]	Salva l'offset del picco nella libreria delle linee. L'offset verrà utilizzato da questo momento in avanti per ogni misurazione di questa linea dell'elemento.
Range (nm)	Seleziona l'intervallo di lunghezza d'onda sotto e sopra la linea di analisi. L'intervallo di lunghezza d'onda è disponibile per analisi spettrali, ad es. correzione di fondo. Se la casella symmetrical è stata attivata, l'intervallo di lunghezza d'onda è identico sia sopra che sotto la lunghezza d'onda. La gamma di pixel corrispondente viene visualizzata sotto i campi di inserimento. Le impostazioni dell'intervallo di lunghezza d'onda della linea selezionata possono essere applicate cliccando su [Accept in method] nell'attuale metodo di misurazione. Questo intervallo verrà utilizzato ai fini del calcolo per l'adattamento dinamico del fondo (o correzione automatica del fondo). I dati sono modificati anche nella finestra del metodo sulla scheda Evaluation .
[Highlight selected line]	Il singolo spettro selezionato nella panoramica destra è evidenziato nel grafico con una linea in grassetto.
[Mark pixels]	I pixel sono evidenziati con un cerchio nel grafico.
[Mark evaluation pixels]	Il pixel dell'analisi centrale al picco principale è evidenziato con una linea rossa. Se sono utilizzati diversi pixel per l'analisi, la loro gamma è evidenziata in rosso chiaro.
Intensity	BG corr. Intensità di fondo corretta BG Intensità del fondo
Sample single values	Collegamento alla finestra Sample single values
	Se l'icona è stata evidenziata in questa maniera, la linea è utilizzata nel metodo. In questo modo, è possibile selezionare le linee adatte durante lo sviluppo del metodo nella finestra Edit spectra .
	Non utilizzare linee nel metodo.

Impostazione automatica del picco principale

Durante lo sviluppo del metodo è necessario correggere gli offset del picco dovute al dispositivo causate dall'interferenza delle linee, ad es. duplicati.

- ▶ Cliccare su **[Find peak center]**. La determinazione automatica del picco principale è adatta alla determinazione della maggior parte dei picchi.
In alternativa, cliccare su  e selezionare manualmente il picco principale nello spettro.
- ▶ È anche possibile ricalcolare i risultati per valutare il nuovo offset del picco.
Passare alla finestra dei risultati e avviare la rielaborazione cliccando su .
Procedere come descritto nella sezione "Rielaborazione dei risultati di analisi".
- ▶ Salvare l'offset del picco trovato mediante **[Accept peak offset]** sul file della lunghezza d'onda/linea del dispositivo.
 - ✓ I dati sono ora disponibili per ogni analisi successiva della linea di analisi.

Vedere a riguardo anche

-  Selezione delle linee di analisi – scheda Lines [▶ 24]
-  Rielaborazione dei risultati di analisi [▶ 67]
-  Ricerca delle linee – finestra Edit spectra / Line identification [▶ 86]

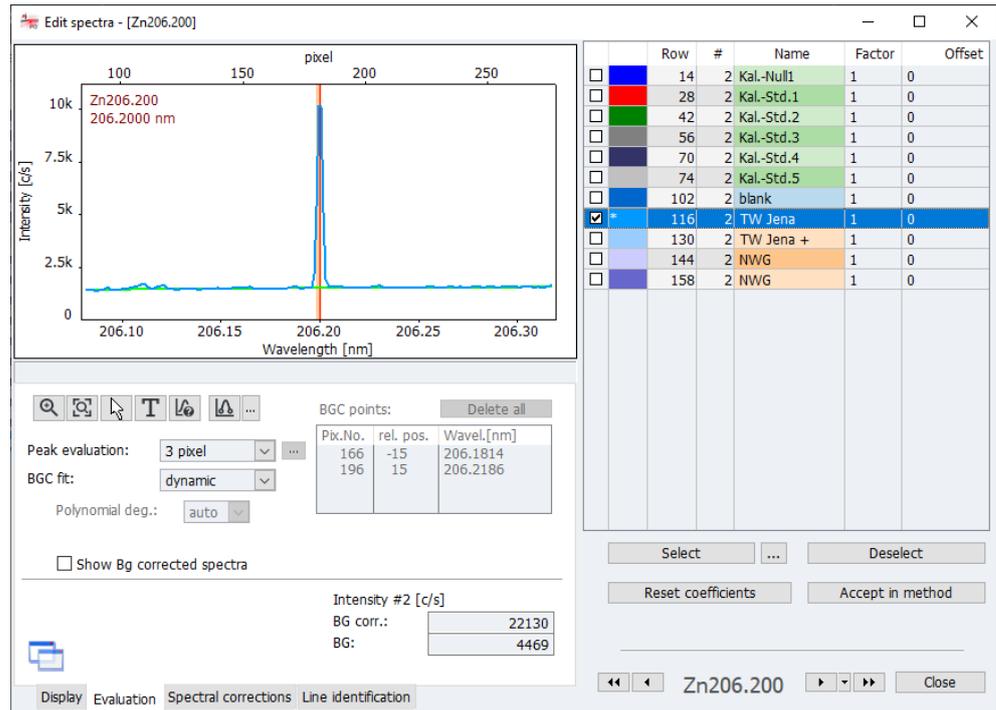
6.10.2 Valutazione dei picchi e determinazione della correzione di fondo – finestra Edit spectra / Evaluation

La continua emissione di fondo, causa di fluttuazioni delle intensità lungo un vasto campo spettrale attorno a una linea di analisi, può essere compensata utilizzando la correzione di fondo. I pixel (punti della correzione di fondo) vengono selezionati su entrambi i lati della linea di analisi, viene calcolata una regressione attraverso i punti e il grafico di regressione utilizzato per la correzione di fondo.

Nel metodo statico per la selezione dei punti della correzione di fondo, questi punti sono impostati manualmente, e il grado polinomiale del grafico della regressione è determinato in modo indipendente. Nel metodo dinamico, il grafico della regressione viene calcolato automaticamente utilizzando l'algoritmo ABC (ABC = correzione automatica della linea di base).

Un'interferenza di fondo discontinua, ad es. dovuta alla sovrapposizione di una linea con un elemento della matrice, può essere minimizzata tramite gli spettri di correzione.

Finestra Edit spectra / Evaluation



Panoramica degli elementi per la valutazione del picco e la correzione di fondo

I tasti per la vista spettrale, alcuni valori di uscita e la selezione dei valori singoli del campione sono descritti nella sezione relativa alla finestra **Edit spectra / Display**

Opzione/ pulsante	Descrizione
Peak evaluation	<p>Imposta il numero dei pixel per la valutazione del picco.</p> <p>1 Il segnale di misurazione si determina soltanto al pixel al quale si trova il picco principale</p> <p>Valore > 1 Numero dei pixel attraverso i quali è determinato il segnale di misurazione I segnali individuali dei pixel sono sommati. Il risultato è quindi più grande del picco massimo. Il pixel con il picco principale si trova al centro della gamma.</p> <p>Height L'altezza del picco utilizzata per la valutazione.</p> <p>User defined L' Intervallo di valutazione è definito dall'utente. Questa è l'opzione di preferenza per la valutazione di duplicati. Dopo avere cliccato su ..., attivare tutti i pixel nell'elenco che sono utilizzati per la valutazione.</p>
BGC fit	<p>Seleziona il tipo di correzione di fondo:</p> <p>dynamic La correzione di fondo è calcolata automaticamente utilizzando un algoritmo matematico. Non sono richieste altre impostazioni per questa opzione.</p> <p>static I punti della correzione di fondo sono impostati manualmente mediante click del mouse nello spettro. Per la funzione di correzione, è necessario selezionare in aggiunta il grado polinomiale.</p>

Opzione/ pulsante	Descrizione
	<p>Per l'adattamento statico, impostare o eliminare i punti della correzione di fondo.</p> <p>Quando si muove il mouse sopra il grafico spettrale verrà visualizzata una croce. Cliccare su  per aprire l'elenco delle funzioni:</p> <p>Set background correction points Tramite click del mouse sullo spettro, impostare i punti della correzione alla lunghezza d'onda desiderata. Per selezionare un campo intero, passare sul campo tenendo premuto il tasto del mouse.</p> <p>Delete background correction points Cliccare su un punto già selezionato per eliminare il rispettivo punto della correzione di fondo. Gli intervalli possono essere eliminati trascinando il mouse.</p> <p>Delete all background correction points Elimina tutti i punti selezionati.</p>
BGC points [Delete all]	Elimina tutti i punti della correzione di fondo impostati manualmente.
Tabella	Visualizza i punti della correzione di fondo impostati manualmente.
Polynomial deg.	<p>Seleziona il grado polinomiale per la regressione del grafico della correzione di fondo.</p> <p>Per l'opzione auto la regressione è selezionata automaticamente.</p>
Show Bg corrected spectra	<p>Mostra gli spettri con correzione di fondo.</p> <p>Il fondo adattato (linea verde) è sottratto dallo spettro del campione. Il fondo corrisponde quindi alla linea zero.</p>

Trasferimento dei dati al metodo

Trasferire le impostazioni per la valutazione del picco e per la correzione di fondo per la linea selezionata al metodo di misurazione corrente cliccando su **[Accept in method]**. I dati sono modificati sulla scheda **Evaluation** nella finestra del metodo.

Vedere a riguardo anche

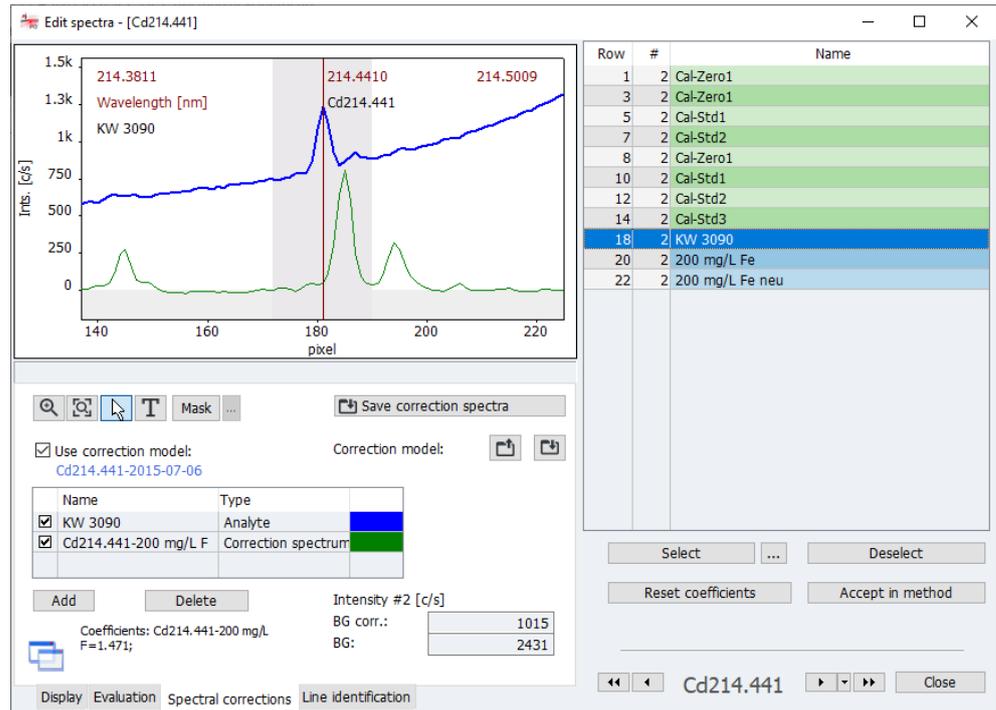
-  Rimozione dell'interferenza spettrale – finestra Edit spectra / Spectral corrections [▶ 83]
-  Visualizzazione degli spettri – finestra Edit spectra / Display [▶ 78]

6.10.3 Rimozione dell'interferenza spettrale – finestra Edit spectra / Spectral corrections

Durante la routine si cerca di selezionare linee per l'analisi che siano prive di interferenze e/o abbiano un'interferenza facilmente correggibile. Laddove non è possibile, l'interferenza discontinua causata ad esempio da una sovrapposizione delle linee con uno o più elementi della matrice può essere rimossa con l'ausilio di spettri di correzione. Gli spettri di correzione per ciascuna matrice sono combinati in un modello e possono quindi essere collegati alla linea nel metodo.

Le funzioni per salvare gli spettri individuali di correzione e combinare il modello di correzione sono disponibili nella finestra **Edit spectra / Spectral corrections**.

Finestra Edit spectra / Spectral corrections



Opzione/pulsante	Descrizione
[Save correction spectra]	Salva gli spettri dei componenti puri di una matrice come spettri di correzione.
Use correction model	Se attivata, il modello di correzione viene applicato agli analiti.
Correction model	 Salva il modello di correzione corrente.  Carica un modello di correzione esistente.

La tabella delle linee elenca gli analiti e gli spettri di correzione utilizzati nel modello. Attivando le caselle, i singoli spettri vengono visualizzati nel diagramma. Ulteriori spettri sono aggiunti al modello di correzione con **[Add]**. Lo spettro selezionato col mouse è eliminato dal modello con **[Delete]**.

Nota:

Tutti gli spettri di correzione nella tabella delle linee sono utilizzati per il calcolo, a prescindere da fatto che la rispettiva casella per la visualizzazione sia stata abilitata. Se si desidera escludere uno spettro di correzione, questo deve essere eliminato.

6.10.3.1 Creazione di un modello di correzione per correzioni spettrali

Per creare e utilizzare un modello di correzione per una linea di analisi è necessario effettuare i passaggi indicati di seguito.

- ▶ Identificare le possibili interferenze.
- ▶ Creare e salvare gli spettri di correzione.
- ▶ Creare un modello di correzione.
- ▶ Trasferire i parametri della linea di analisi con il modello di correzione al metodo.

- Fase 1: identificare le interferenze
- ▶ Creare un metodo con la linea di analisi.
 - ▶ Misurare l'analita nella matrice e caricare lo spettro nella finestra **Edit spectra** (fare doppio click sulla riga del campione nella finestra principale).
 - ▶ Nella finestra **Edit spectra / Line identification** identificare le possibili linee di interferenza.
- Fase 2: misurare e salvare gli spettri di correzione
- ▶ Aggiungere alla sequenza la misurazione dei componenti della matrice che causano la sovrapposizione spettrale e misurare queste componenti nelle soluzioni a singolo elemento.
- Nota:**
le concentrazioni dei componenti della matrice non devono necessariamente combaciare con quelle dei campioni, ma devono essere sufficientemente alte affinché gli spettri abbiano valori di intensità chiari. Per una correzione spettrale adeguata, misurare soltanto un componente alla volta come sostanza pura.
- ▶ Caricare uno spettro di una componente della matrice nella finestra **Edit spectra / Spectral corrections**.
 - ▶ Cliccare su **[Save correction spectra]**.
- Si aprirà la finestra del database per il salvataggio degli spettri di correzione.
- ▶ Inserire un nome e terminare il processo di salvataggio con **[Save]**.
 - ▶ Salvare gli spettri delle altre matrici seguendo la stessa procedura.
- Fase 3: creare un modello di correzione
- ▶ Caricare nuovamente lo spettro dell'analita nella matrice.
 - ▶ Attivare la casella **Use correction model**.
 - ▶ Aprire la selezione degli spettri di correzione già salvati con **[Add]**.
 - ▶ Selezionare uno spettro di correzione dall'elenco e cliccare su **[Load]**.
 - ▶ Aggiungere tutti gli spettri di correzione seguendo tale procedura.
 - ▶ Verificare nella vista spettrale che lo spettro del campione che ne risulta sia privo di interferenze.
 - ▶ Utilizzando il tasto **[Mask]** e tenendo premuto il tasto del mouse è possibile nascondere gli intervalli che non devono essere inclusi nel calcolo del modello di correzione. La gamma della linea di analisi (± 9 pixel) è nascosta di come impostazione predefinita. Potrebbe essere necessario nascondere ulteriori intervalli se non sono disponibili sostanze pure per la registrazione e se queste contaminazioni fossero presenti in proporzioni variabili.
 - ▶ Per salvare il modello di correzione cliccare su  ed inserire un nome per il modello. Terminare il processo con **[Save]**.
- Fase 4: trasferire i parametri della linea di analisi con il modello di correzione al metodo:
- ▶ Trasferire i parametri della linea di analisi con il modello di correzione al metodo corrente mediante **[Accept in method]**.
 - ✓ Nella finestra **Method / Evaluation** la linea di analisi nella colonna **Correction** è identificata con **LSM** (Modello dei minimi quadrati).

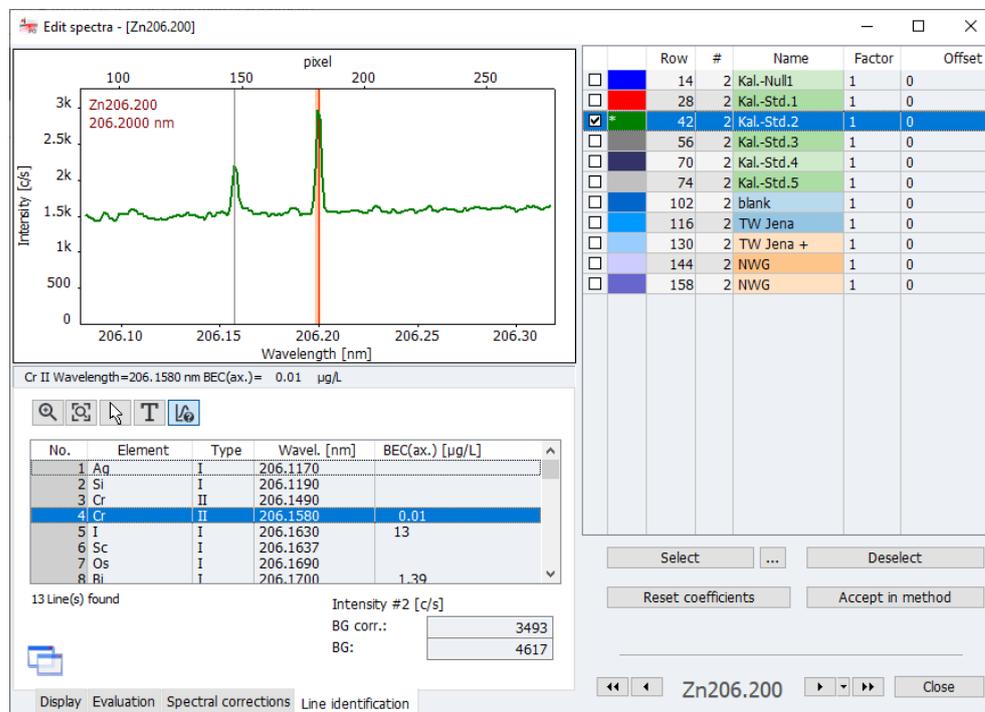
Una volta salvato il metodo, le misurazioni future verranno eseguite con questo metodo e il modello di correzione creato. Le misurazioni già effettuate possono essere rielaborate con la nuova versione del metodo, rendendo superfluo ripetere la misurazione.

I modelli di correzione spettrale e gli spettri di correzione vengono salvati con i dati dei risultati. Se i dati dei risultati sono trasferiti ad un computer diverso sul quale il modello di correzione non sono stati salvati, i modelli verranno importati dopo una query.

6.10.3.2 Ricerca delle linee – finestra Edit spectra / Line identification

Nella finestra **Edit spectra / Line identification** è possibile identificare le linee degli spettri misurati sulla base del database delle linee.

Finestra Edit spectra / Line identification



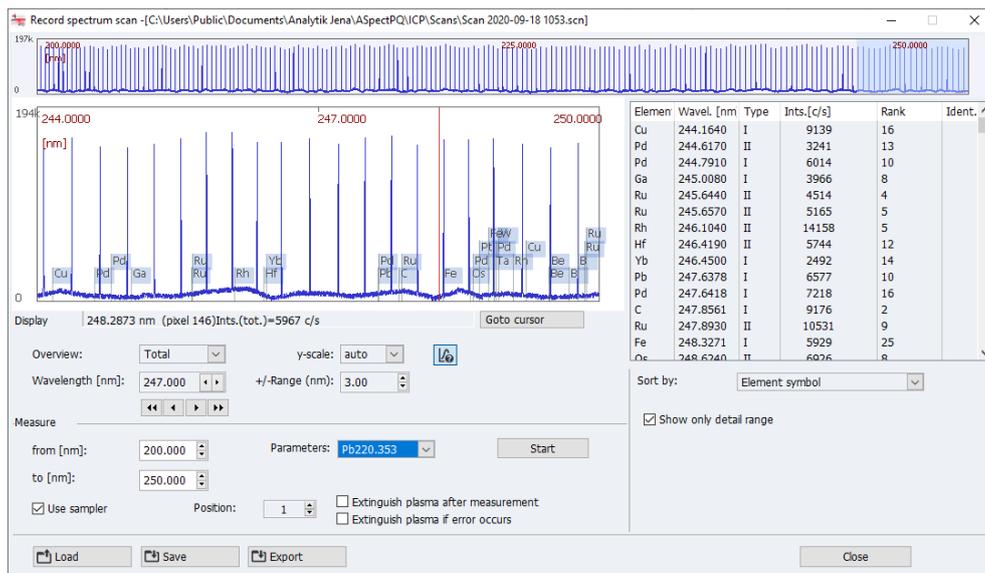
Nella tabella che si trova sotto gli spettri vengono visualizzati tutte le linee identificate nella sezione spettrale.

- ▶ Attivare il tasto
- ▶ Cliccare sui picchi di interesse nello spettro.
La linea più vicina viene visualizzata sotto lo spettro ed evidenziata nella tabella.
- ▶ Al contrario, è inoltre possibile selezionare una linea nella tabella che sia poi visualizzata nello spettro.

6.11 Registrazione di uno spettro d'insieme

Con la voce del menu **Method Development | Record spectrum scan** è possibile registrare uno spettro d'insieme entro un intervallo di lunghezza d'onda specificato.

Finestra Record spectrum scan



- ▶ Selezionare la voce di menu **Method Development | Record spectrum scan**.
- ▶ Nel campo **Measure** immettere l'intervallo di lunghezza d'onda desiderato (**from / to**).
- ▶ Se è stato attivato un metodo, i parametri di una linea del metodo possono essere selezionati per la registrazione degli spettri. Se non è stato caricato alcun metodo, si utilizzano i parametri predefiniti.
- ▶ Approntare il campione. Se si desidera utilizzare un campionatore, attivare l'opzione **Use sampler** e selezionare la posizione del campione sul campionatore.
- ▶ Avviare la registrazione con **[Start]**.
Al termine della registrazione, lo spettro d'insieme comparirà nella parte superiore della finestra.
- ▶ Se si clicca su una sezione dello spettro d'insieme, verrà visualizzata un'area dettagli con la linea selezionata nel grafico. La larghezza dell'area dettagli può essere impostata nell'elenco **+/-Range**.
- ▶ Le linee trovate sono presentate nella tabella sul lato destro. La visualizzazione può essere limitata al campo spettrale mostrato tramite l'opzione **Show only detail range**.

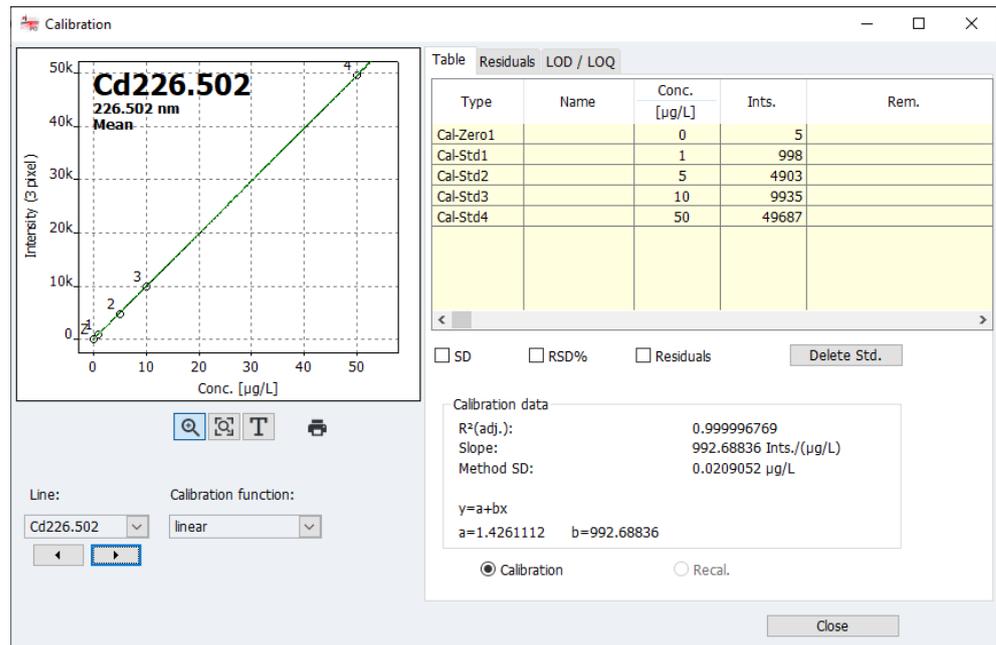
7 Calibrazione

La calibrazione viene eseguita durante la misurazione in base alle opzioni selezionate nella sequenza. I grafici di calibrazione e le funzioni possono essere visualizzate e modificate dopo la misurazione.

- ▶ La finestra **Calibration** può essere aperta cliccando su  nella barra delle icone. In alternativa, fare doppio click su una delle righe della sequenza **Compute calib.** o selezionare la voce del menu **Method Development | Calibration**.

Finestra Calibration

La finestra **Calibration** mostra il grafico di calibrazione tenendo in considerazione i parametri del grafico.



La finestra contiene, per ognuna delle linee di analisi definite nella sequenza

- Rappresentazione grafica della curva di calibrazione
- Tabella di calibrazione
- Parametri
- Residui
- Limiti di rivelabilità e limiti di determinazione

Selezione di una linea

Nel campo **Line** selezionare la linea di analisi per la vista calibrazione. Mediante i tasti freccia che si trovano sotto l'elenco, passare tra le visualizzazioni delle singole linee.

Selezione di una funzione di calibrazione

Nell'elenco **Calibration function**, selezionare tra i possibili calcoli di regressione del grafico di calibrazione:

Opzione di calibrazione	Descrizione
linear	Progressione lineare della funzione di calibrazione $y = a + bx$
nonlin. ratio.	Progressione non lineare della funzione di calibrazione descritta da una funzione sigmoidea $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$

Opzione di calibrazione	Descrizione
nonlin. quadr.	Progressione non lineare della funzione di calibrazione descritta da una funzione quadratica $y = a + bx + cx^2$
automatically	Per la calibrazione, sono calcolate sia una funzione lineare che una non lineare. A questo segue un test di Mandel nel quale sono comparate le somme dei quadrati dei residui. Se la somma della funzione non lineare è significativamente inferiore a quella della funzione lineare, verrà selezionata la curva di calibrazione non lineare. In caso contrario, verrà utilizzata la curva di calibrazione lineare. La funzione non lineare può essere selezionata nella finestra Options / Analysis sequence . Come impostazione predefinita è stata fornita la funzione sigmoidea.

Vedere a riguardo anche

 Opzioni per la sequenza di analisi [▶ 134]

7.1 Rappresentazione grafica della curva di calibrazione

Nel grafico sono visualizzati i punti di misurazione, la curva di calibrazione calcolata e i residui. I numeri nei punti di misurazione corrispondono a quelli utilizzati nella scheda **Table**. Il punto zero di calibrazione è stato identificato con Z (Zero).

Colori identificativi

I punti di misurazione sono stati identificati nel modo seguente:

Colore	Significato
Nero	Punto di misurazione normale
Grigio chiaro	Eliminato/valore erratico (non incluso nel calcolo)
Blu	Sospetto valore erratico (incluso nel calcolo)

Anche le curve sono identificate da un colore:

Colore della curva	Significato
Nero	Curva di calibrazione dentro l'intervallo di calibrazione valido
Blu	Curva di calibrazione fuori dall'intervallo di calibrazione valido
Verde	Limiti inferiore e superiore del range di previsione dentro l'intervallo di calibrazione valido
Grigio chiaro	Limiti inferiore e superiore del range di previsione dentro l'intervallo di calibrazione valido

Nota sul range di previsione e l'intervallo di confidenza

La posizione del range di previsione dipende dalla certezza statistica selezionata. Questa è una misura della "qualità" della calibrazione, dalla quale dipende anche la certezza statistica della misurazione dei campioni analitici. Inoltre, il range di previsione serve a identificare i sospetti valori erratici tra i punti di calibrazione. La certezza statistica può essere selezionata nella finestra **Method / Statistics**. Nella finestra **Options / Analysis sequence** è possibile scegliere tra la visualizzazione del range di previsione o quella del range di confidenza.

Ingrandimento della curva di calibrazione

Cliccando su , un'area del grafico può essere ingrandita tenendo premuto il tasto sinistro del mouse. Il tasto  consente di ritornare alle dimensioni originali del grafico.

Inserimento di un commento	<p>È possibile inserire un campo di testo con un commento.</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Cliccare su T. ▶ Tenendo premuto il tasto sinistro del mouse, trascinare sul grafico la cornice del campo di testo. ▶ Nella finestra di inserimento, selezionare il font del testo in [Font !Kurz]. ▶ Inserire il testo e cliccare su [OK]. <ul style="list-style-type: none"> ✓ Il testo viene visualizzato sul grafico.
Stampa della curva di calibrazione	<p>La curva di calibrazione e i dati di calibrazione sono inviati alla stampante cliccando su .</p> <p>Vedere a riguardo anche</p> <ul style="list-style-type: none">  Specificazione delle analisi statistiche – finestra Method / Statistics [▶ 42]  Opzioni per la sequenza di analisi [▶ 134]  Stampa dei dati dei risultati [▶ 114]

7.2 Visualizzazione dei risultati di calibrazione

7.2.1 Calibrazione – scheda Table

Nella finestra **Calibration**, le coppie di valori degli standard (concentrazione calcolata / valore misurato) vengono fornite nella scheda **Table**.

Se gli standard sono stati misurati ripetutamente ed è stata definita un'opzione di analisi statistica nel metodo, la deviazione standard (SD) e la deviazione standard relativa (RSD%) o l'intervallo (R) e l'intervallo relativo (**R%**) possono essere emessi attivando le caselle corrispondenti.

Per escludere dal calcolo standard di calibrazione singoli, selezionare lo standard nella tabella con un click del mouse, quindi cliccare su **[Delete Std.]**.

La misurazione viene così soltanto indicata come eliminata, e può essere riattivata in ogni momento.

I dati di calibrazione vengono visualizzati sotto la tabella dei valori misurati, se possono essere significativamente calcolati:

Parametri	Significato
R²(adj.)	Coefficiente di determinazione
Slope	Coefficiente angolare della funzione di calibrazione
Method SD	Deviazione standard del metodo
BEC	Il valore BEC (concentrazione equivalente di fondo) rappresenta la concentrazione dell'analita che produce un'intensità equivalente a quella di fondo. Un valore più basso corrisponde ad una maggiore sensibilità.

7.2.2 Calibrazione – scheda Residuals

Nella finestra **Calibration** le deviazioni dei punti di calibrazione dal grafico di calibrazione calcolato e i limiti dell'intervallo di previsione sono indicati nel grafico della scheda **Residuals**.

7.2.3 Calibrazione – scheda LOD/ LOQ

Nella finestra **Calibration**, nella scheda **LOD/ LOQ**, sono forniti i limiti di rivelabilità e di determinazione del dispositivo ICP-OES. Questi limiti sono calcolati sulla base dei risultati di calibrazione correnti. In quest'area, i valori del metodo del valore del bianco e del metodo del grafico di calibrazione verranno visualizzati soltanto se il dispositivo è già stato calibrato.

Parametri	Significato
Limit of detection	La massa (concentrazione) dell'elemento da analizzare che può essere ancora rilevata con una sicurezza statistica predefinita.
Limit of quantification	Il peso minimo (concentrazione) dell'elemento da analizzare che può essere rilevato con un livello di confidenza definito.
SD Blank (DL)	Soltanto per metodo del valore del bianco Deviazione standard misurata del valore del bianco (campione DL)

Avviare il calcolo dei limiti di rivelabilità e dei limiti di determinazione con **[calculate]**.

Metodo del grafico di calibrazione

Il calcolo dei limiti di rivelabilità e determinazione in base al metodo del grafico di calibrazione richiede un grafico di calibrazione lineare. La calibrazione dovrebbe essere effettuata nell'intervallo di concentrazione più basso. I parametri di calibrazione che sono essenziali per i risultati del calcolo includono:

- Numero e posizione dei punti di calibrazione
- Numero di misurazioni ripetute per standard
- Qualità della regressione
- Coefficiente angolare della curva di calibrazione
- Certezza statistica relativa (livello di probabilità)

I valori ottenuti dal metodo del grafico di calibrazione possono essere considerati utili soltanto se la calibrazione è stata avviata nell'intervallo di concentrazione più basso.

Metodo del bianco

La deviazione standard del bianco è determinata nella misurazione del campione. A tale scopo, la misurazione del bianco (**QC blank DL**) è inclusa nella sequenza.

Per il metodo del bianco, viene utilizzata la seguente regola di calcolo:

- Il bianco deve essere misurato 11 volte.
- Dai valori ottenuti, viene determinata la deviazione standard assoluta **SD** del bianco.
- Le formule seguenti si applicano ai limiti di rivelabilità e determinazione:

Limite di rivelabilità (**LOD**)

$$\text{LOD} = 3 * \text{SD} / (\text{coefficiente angolare della curva di calibrazione})$$

Limite di determinazione (**LOQ**)

$$\text{LOQ} = 9 * \text{SD} / (\text{coefficiente angolare della curva di calibrazione})$$

Vedere a riguardo anche

- 📖 Combinazione di campioni e sequenze di azioni per la sequenza [▶ 54]

7.2.4 Calibrazione – scheda LOD/ LOQ

Nella finestra **Calibration**, nella scheda **LOD/ LOQ**, sono forniti i limiti di rivelabilità e di determinazione del dispositivo ICP-OES. Questi limiti sono calcolati sulla base dei risultati di calibrazione correnti. In quest'area, i valori del metodo del valore del bianco e del metodo del grafico di calibrazione verranno visualizzati soltanto se il dispositivo è già stato calibrato.

Parametri	Significato
Limit of detection	La massa (concentrazione) dell'elemento da analizzare che può essere ancora rilevata con una sicurezza statistica predefinita.
Limit of quantification	Il peso minimo (concentrazione) dell'elemento da analizzare che può essere rilevato con un livello di confidenza definito.
SD Blank (DL)	Soltanto per metodo del valore del bianco Deviazione standard misurata del valore del bianco (campione DL)

Avviare il calcolo dei limiti di rivelabilità e dei limiti di determinazione con **[calculate]**.

Metodo del grafico di calibrazione

Il calcolo dei limiti di rivelabilità e determinazione in base al metodo del grafico di calibrazione richiede un grafico di calibrazione lineare. La calibrazione dovrebbe essere effettuata nell'intervallo di concentrazione più basso. I parametri di calibrazione che sono essenziali per i risultati del calcolo includono:

- Numero e posizione dei punti di calibrazione
- Numero di misurazioni ripetute per standard
- Qualità della regressione
- Coefficiente angolare della curva di calibrazione
- Certezza statistica relativa (livello di probabilità)

I valori ottenuti dal metodo del grafico di calibrazione possono essere considerati utili soltanto se la calibrazione è stata avviata nell'intervallo di concentrazione più basso.

Metodo del bianco

La deviazione standard del bianco è determinata nella misurazione del campione. A tale scopo, la misurazione del bianco (**QC blank DL**) è inclusa nella sequenza.

Per il metodo del bianco, viene utilizzata la seguente regola di calcolo:

- Il bianco deve essere misurato 11 volte.
- Dai valori ottenuti, viene determinata la deviazione standard assoluta **SD** del bianco.
- Le formule seguenti si applicano ai limiti di rivelabilità e determinazione:

Limite di rivelabilità (**LOD**)

$$\text{LOD} = 3 * \text{SD} / (\text{coefficiente angolare della curva di calibrazione})$$

Limite di determinazione (**LOQ**)

$$\text{LOQ} = 9 * \text{SD} / (\text{coefficiente angolare della curva di calibrazione})$$

Vedere a riguardo anche

- 📖 Combinazione di campioni e sequenze di azioni per la sequenza [► 54]

7.3 Modifica del grafico di calibrazione

È possibile modificare un grafico di calibrazione esistente nella finestra **Calibration** nei modi indicati di seguito:

- Cambio della funzione di calibrazione utilizzata
- Attivazione/disattivazione degli standard
- Sostituzione di uno standard misurato
- ▶ Per modificare la funzione di calibrazione, selezionare un nuovo modello nel campo di elenco **Calibration function**.
- ▶ Per escludere uno standard dal calcolo, selezionarlo dalla scheda **Table**, quindi cliccare su **[Delete Std.]**. La misurazione viene così soltanto indicata come eliminata, e può essere riattivata in ogni momento.

- ▶ Quando si rielabora i risultati, i parametri di calibrazione modificati verranno applicati ai risultati. A questo scopo, selezionare la voce di menu **Routine | Reprocess results** o cliccare su  nella barra degli strumenti.
- ▶ Uno standard può anche essere nuovamente misurato e i risultati rielaborati.

Vedere a riguardo anche

- 📖 Rielaborazione dei risultati di analisi [▶ 67]

8 Controllo qualità

La funzione di controllo qualità serve a monitorare i risultati di misurazione di un metodo per un lungo periodo di tempo. A tale scopo, campioni QC specifici di diversi tipi vengono definiti per un metodo e inclusi nella sequenza.

Le valutazioni sono presentate in grafici di controllo qualità (Grafici QC) e salvati assieme al metodo. I grafici QC sono disponibili dopo ogni caricamento del metodo e verranno aggiornati all'avvio della misurazione successiva.

Il tipo di campioni QC e i loro parametri possono essere definiti nella finestra **Method / QCS**, mentre nella sequenza si imposta l'integrazione del campione.

È possibile vedere i grafici QC del metodo caricato (attivo) nella finestra **QC**. Qui è inoltre possibile definire i parametri e la configurazione dei grafici QC.

- ▶ Aprire la finestra **QC** cliccando su  nella barra delle icone o selezionare la voce del menu **Method Development | QC**.

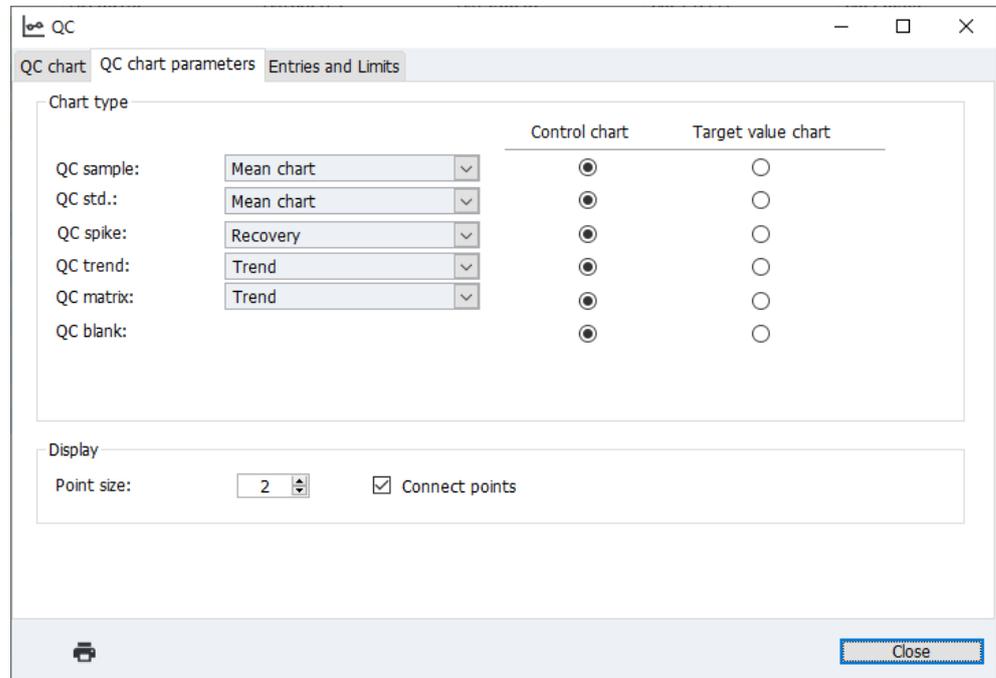
Vedere a riguardo anche

- 📖 Specificazione dei campioni per controllo qualità per le schede QC – finestra **Method / QCS** [▶ 44]
- 📖 Combinazione di campioni e sequenze di azioni per la sequenza [▶ 54]

8.1 Parametri dei grafici QC

Il tipo e la rappresentazione dei grafici QC sono definiti nella finestra **QC / QC chart parameters**.

Finestra QC / QC chart parameters



Tipi di campione QC e valutazioni

Per i diversi tipi di campione QC possono essere selezionati le seguenti tipi di valutazioni:

Tipo di campione QC	Tipo di valutazione QC
QC sample	Mean chart
QC std.	Mean chart (norm.) – non per il grafico del valore di destinazione Recovery
QC spike	Recovery
QC trend	Trend
QC matrix	Ranges – non per il grafico del valore di destinazione Precisions – non per il grafico del valore di destinazione
Blank	Non è prevista alcuna selezione. Viene visualizzata l'intensità dei valori del bianco.

Per il tipo di grafico **Control chart** (grafico di controllo del processo), i parametri di destinazione, i limiti di controllo (C) e i limiti di avvertimento (W) sono calcolati dalla media e dalla variazione dei valori dal periodo di preparazione. Per il tipo **Target value chart**, le grandezze di destinazione e i limiti di esclusione sono determinati dai valori desiderati e dai limiti specificati per i tipi di campione QC.

Visualizzazione

In questo campo è possibile scegliere la dimensione dei punti utilizzati per il grafico, e se i punti devono essere connessi tra loro da una polilinea.

Opzione	Descrizione
Point size	I punti individuali vengono visualizzati come cerchi. Selezionare una dimensione maggiore del punto per cerchi più grandi.
Connect points	Collega i punti nel grafico tra di loro mediante una polilinea.

8.2 Inserimenti e limiti del grafico QC

Il contenuto dei grafici QC è definito nella finestra **QC / Entries and Limits** e può essere personalizzato per i requisiti del vostro laboratorio riguardo la frequenza degli inserimenti.

Opzione	Descrizione
Entry scheme	<p>all values Inserire ogni controllo QC effettuato.</p> <p>1 value/day Inserire soltanto l'ultimo controllo QC del giorno.</p> <p>2 values/day Inserire soltanto il primo e l'ultimo controllo QC del giorno.</p> <p>Nota Un "day" (giorno) corrisponde a un giorno secondo l'orologio del PC, che significa che nel corso di una giornata, ogni inserimento precedente nel grafico QC verrà sovrascritto da un nuovo valore QC; tuttavia, quando comincia un nuovo giorno, verrà generato un nuovo inserimento.</p>
Number prep. period	<p>Per Control chart: Il periodo di preparazione è un numero di inserimenti nel grafico QC utilizzato per il calcolo dei limiti di controllo (C) e di avvertimento (W). Il periodo di preparazione contiene sempre gli inserimenti nel grafico più vecchi. Se impostato su 0 (nessun periodo di preparazione), tutti i dati QC inseriti verranno inclusi nel calcolo dei limiti di controllo ed errore.</p>
Exclusion limits for target value charts	<p>Solo Target value chart: I limiti di esclusione vengono calcolati dai limiti specificati per i campioni di controllo QC moltiplicati per Factor (preimpostato sul valore 1).</p>

Sostituzione dei grafici

Definire la procedura per grafici (quasi) pieni. A tale scopo, selezionare una delle opzioni dall'elenco:

Opzione	Descrizione
Accept prep. period, delete remain	<p>Für Control chart: accetta il periodo di preparazione del grafico vecchio per l'applicazione al grafico nuovo.</p>
Last values -> new prep. period	<p>Per Control chart: I valori dei grafici vecchi misurati per ultimi rappresentano il periodo di preparazione del grafico nuovo, tutti gli altri valori verranno eliminati dal grafico. I nuovi valori misurati verranno valutati in base al nuovo periodo di preparazione.</p>
Delete all, new prep. period	<p>Tutti i valori verranno eliminati. Per Control chart: i nuovi valori misurati riempiranno il periodo di preparazione per primo.</p>

Cliccando su **[Process]** è possibile sostituire i grafici QC secondo l'opzione selezionata sopra.

8.3 Visualizzazione dei grafici QC

I grafici QC sono visualizzati nella finestra **QC / QC chart**. Grafici separati sono generati per ogni tipo di campione QC definito nel metodo e per ogni linea dell'elemento specificata qui.

Opzione/visualizzazione

Opzione/visualizzazione	Descrizione
Type	Selezionare il tipo di campione QC da visualizzare.

Opzione/visualizzazione	Descrizione
Line	Selezionare la linea dell'elemento da visualizzare.
Displayed values	Numero di valori visualizzati e la data del primo e dell'ultimo valore visualizzato.
Saved values	Numero totale di voci inserite nel grafico QC corrente e la data del primo e dell'ultimo valore.
x(max)	Seleziona il numero di voci inserite da visualizzare nel grafico.
y-scale	Entries Il valore massimo dell'asse delle y è dimensionato in base al valore più alto Control limits Il valore massimo dell'asse delle y è dimensionato in base al limite di controllo o di esclusione.
	Stampa il grafico QC comprensivo dei dati alfanumerici e dei valori misurati.

Area del grafico

Colore/identificazione	Significato
Area gialla	Control chart only: periodo di preparazione
Linea orizzontale in grigio chiaro	Control chart only: Valore medio calcolato dal periodo di preparazione Target value chart only: valore desiderato
Linee orizzontali rosse	Control chart only: limiti di controllo superiore e inferiore (C) calcolati dal periodo di preparazione (3 Sigma) Target value chart only: limiti di esclusione superiore e inferiore (EU, EL) in base ai limiti del campione QC.
Linee orizzontali verdi	Control chart only: limiti di avvertimento calcolati (W; 2 Sigma).
Piccoli cerchi	Punti di misurazione (nero: punto di misurazione attivo; grigio: punto di misurazione inattivo)

Se si clicca su un valore misurato nel grafico, si apre una finestra con le seguenti informazioni su questo valore misurato.

Opzione	Descrizione
Number	Numero del valore misurato nella serie QC
Value	Valore misurato (convertito in base al tipo di presentazione del grafico QC)
Date / Time	Data e ora della misurazione
Operator	Utente che ha effettuato l'accesso al momento della misurazione
Version	Versione del metodo utilizzato
Delete entry / Activate entry	Contrassegna un valore misurato come eliminato / riattiva un valore misurato
Add comment	Aggiunge un commento al punto di misurazione, ad es. il motivo per il quale è stato eliminato

9 Controllo e monitoraggio del dispositivo e degli accessori

9.1 Spettrometro

La finestra **Spectrometer** serve a testare le funzioni dello spettrometro e a impostarne i parametri.

È possibile regolare o richiamare i seguenti dati:

- Dati del dispositivo
- Visualizzazione dei parametri di lettura del rilevatore
- Avviare le misurazioni per l'ottimizzazione del dispositivo

► Aprire la finestra **Spectrometer** cliccando su  o selezionare la voce del menu **Method Development | Spectrometer**.

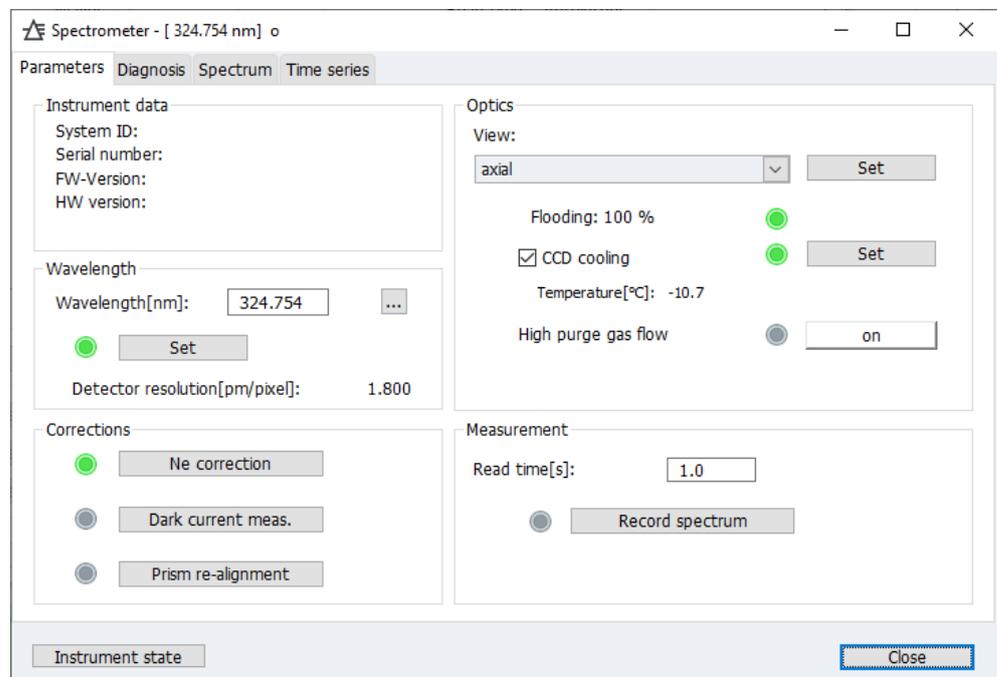
Mediante **[Instrument state]** viene visualizzato un grafico per l'invio dei messaggi dei sensori di sicurezza. In caso di problemi con il plasma, qui è possibile vedere i messaggi di errore dei sensori.

9.1.1 Configurazione dei parametri dello spettrometro e test delle funzioni

La finestra **Spectrometer / Parameters** comprende le seguenti funzioni:

- Controllo delle funzioni di base del dispositivo
- Avvio automatico di correzioni al sistema ottico
- Avvio di una misurazione di prova ad una lunghezza d'onda selezionata

Elementi della finestra Spectrometer / Parameters



Parametri	Descrizione
Instrument data	Nel gruppo Instrument data sono visualizzati vari numeri di servizio e versioni necessari alla manutenzione del dispositivo.
Wavelength	Nel campo Wavelength viene visualizzata la lunghezza d'onda selezionata. Una lunghezza d'onda può essere regolata cliccando su  nella finestra Select element/line .

Parametri	Descrizione
	Lo spettrometro viene spostato sulla lunghezza d'onda selezionata con [Set] .
[Ne correction]	Esegue una calibrazione della lunghezza d'onda del rivelatore.
[Dark current meas.]	Corregge il segnale scuro.
[Prism re-alignment]	Ottimizza la mappatura dell'ordine di dispersione del rivelatore mediante la regolazione del prisma (regolazione per massimo energetico).
View	Seleziona la direzione di osservazione del plasma nel campo di elenco (axial – dall'alto, radial – dal lato).
CCD cooling	Se la casella è attivata, il raffreddamento del rivelatore CCD può essere avviato con [Set] . Se la casella è disattivata, il raffreddamento viene arrestato. Il raffreddamento CCD viene avviato automaticamente con l'accensione del plasma. Un controllo manuale è necessario soltanto in casi eccezionali, ad es. dopo un messaggio di errore verificatosi durante un avvio automatico. Nel campo Operating temperature viene visualizzata la temperatura corrente del rivelatore CCD.
[High purge gas flow]	Lava lo spettrometro con un flusso di argon maggiore.
Measurement	Per avviare una misurazione alla lunghezza d'onda selezionata, il periodo di misurazione totale deve essere inserito in Measurement . Con [Record spectrum] si avvia la misurazione. Le impostazioni principali per il plasma vengono utilizzate per la misurazione. Il campione deve essere inserito manualmente. Non viene utilizzato il campionatore.

Misurazione del picco spettrale ad una linea di analisi selezionata

Avviare una misurazione di prova ad una linea di analisi selezionata nella finestra **Spectrometer / Parameters**.

- ▶ Accendere il plasma.
- ▶ Nell'area **Wavelength**, utilizzare  per aprire la finestra **Select element/line** e impostare la linea desiderata.
In alternativa, inserire il valore direttamente nel campo **Wavelength**.
- ▶ Portare lo spettrometro con **[Set]** alla lunghezza d'onda desiderata.
Se le impostazioni sono state completate con successo, il marcatore vicino alle impostazioni diventerà verde.
- ▶ Avviare la misurazione dell'oscurità con **[Dark current meas.]**.
- ▶ Per la misurazione successiva, selezionare la direzione di osservazione **axial** o **radial**.
- ▶ Impostare **Read time**.
- ▶ Approntare il campione e immergere il tubo di entrata nel campione.
- ▶ Attendere un periodo di tempo affinché si ottenga una nebulizzazione stabile del campione. Avviare la misurazione con **[Record spectrum]**.
 - ✓ La misurazione viene effettuata e i suoi risultati sono visualizzati nella finestra **Edit spectra**.

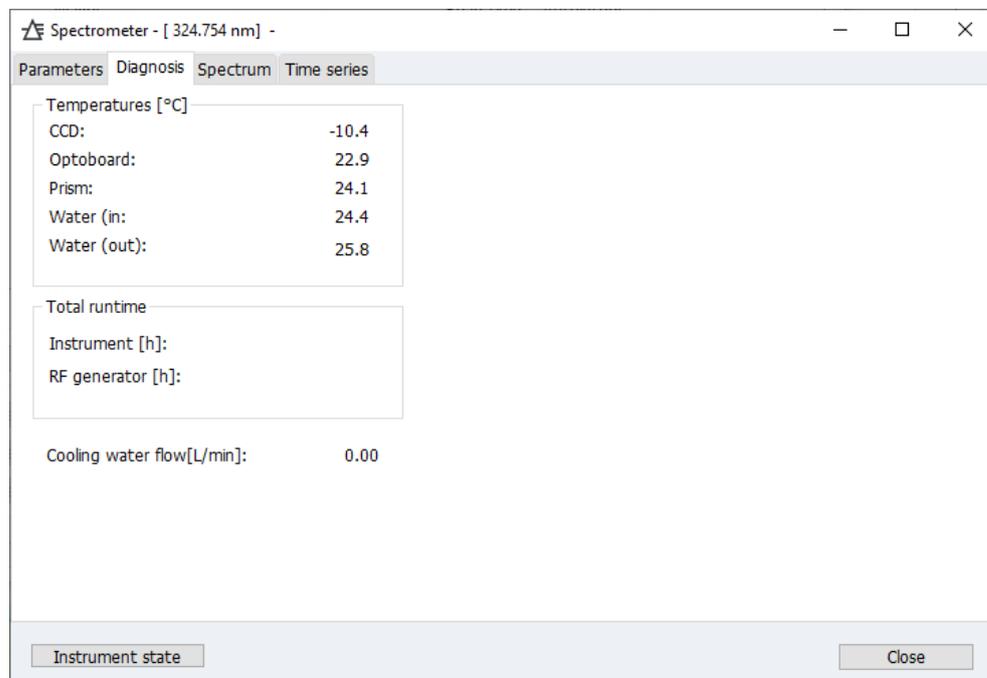
Vedere a riguardo anche

-  Aggiunta di linee di analisi nella tabella delle linee [▶ 26]

Visualizzazione e modifica degli spettri di intensità [▶ 77]

9.1.2 Diagnosi dei parametri del dispositivo

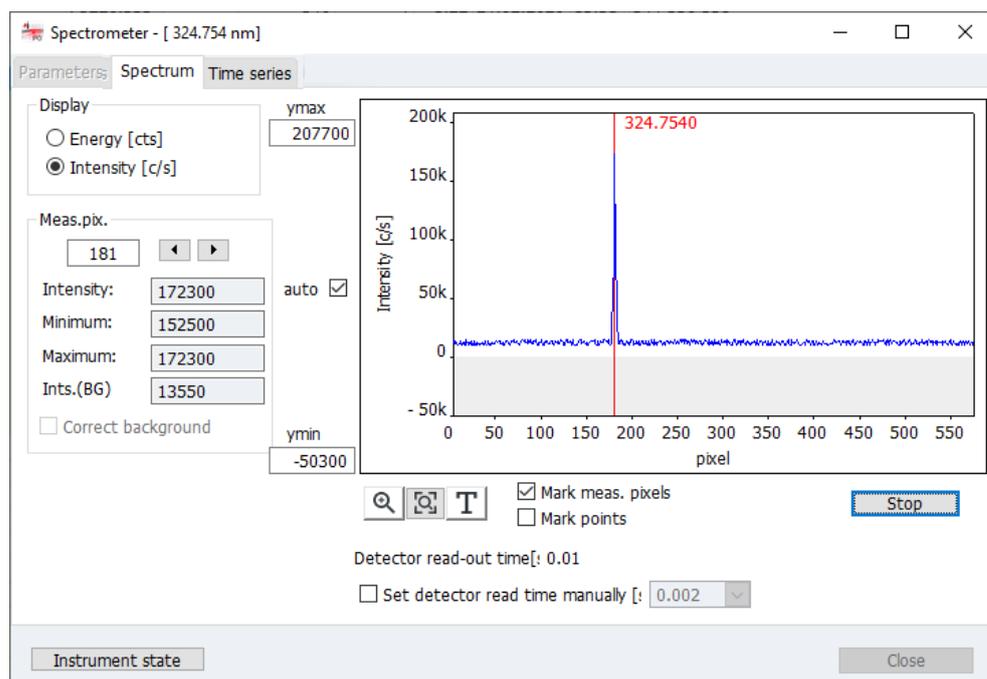
Nella finestra **Spectrometer / Diagnosis** sono visualizzati parametri relativi alla manutenzione.



9.1.3 Esecuzione di misurazioni continue del picco

Nella finestra **Spectrometer / Spectrum** è possibile avviare una misurazione continua ad una lunghezza d'onda predefinita. Le misurazioni continue sono utilizzate per l'ottimizzazione del dispositivo durante la manutenzione.

Visualizzazione grafica e analisi digitale nella finestra Spectrometer / Spectrum



Opzione	Descrizione
Display	Opzioni per la visualizzazione dello spettro: Energy Visualizzazione dello spettro energetico; unità di misura: cts (impulsi) Per ottenere risultati di misurazione con meno rumore possibile, i tempi di integrazione per il rivelatore sono scelti in modo tale che il massimo energetico sia a circa 30000 cts. Intensity Presentazione dell'energia per unità di tempo; unità di misurazione: cts/s (impulsi al secondo) In base all'intensità, picchi diversi possono essere comparati a prescindere dal tempo di integrazione.
Meas.pix.	Selezione del pixel il cui valore viene visualizzato continuamente nel campo Energy o Intensity . Nei campi Maximum e Minimum vengono visualizzati i corrispondenti risultati delle misurazioni continue.
Mark meas. pixels	Evidenzia il MEASURING PIXEL (pixel di misurazione) impostato nel grafico con una linea rossa verticale.
Mark points	Evidenzia i valori di misurazione per ogni pixel nel grafico con un punto.
Set detector read time manually	Seleziona il tempo di lettura per il rivelatore CCD dal campo di elenco. Tempi di lettura più lunghi comportano valori energetici maggiori. L'impostazione predefinita per il tempo di lettura del rivelatore CCD è 0,01 s.
Graph scaling	Inserisce i valori dei punti di avvio e termine delle ordinate direttamente nei campi di inserimento degli assi. In alternativa, è possibile selezionare l'intervallo da visualizzare dopo aver attivato la modalità zoom  tenendo premuto il tasto sinistro del mouse. Il dimensionamento viene invertito attivando l'opzione auto o cliccando su  .

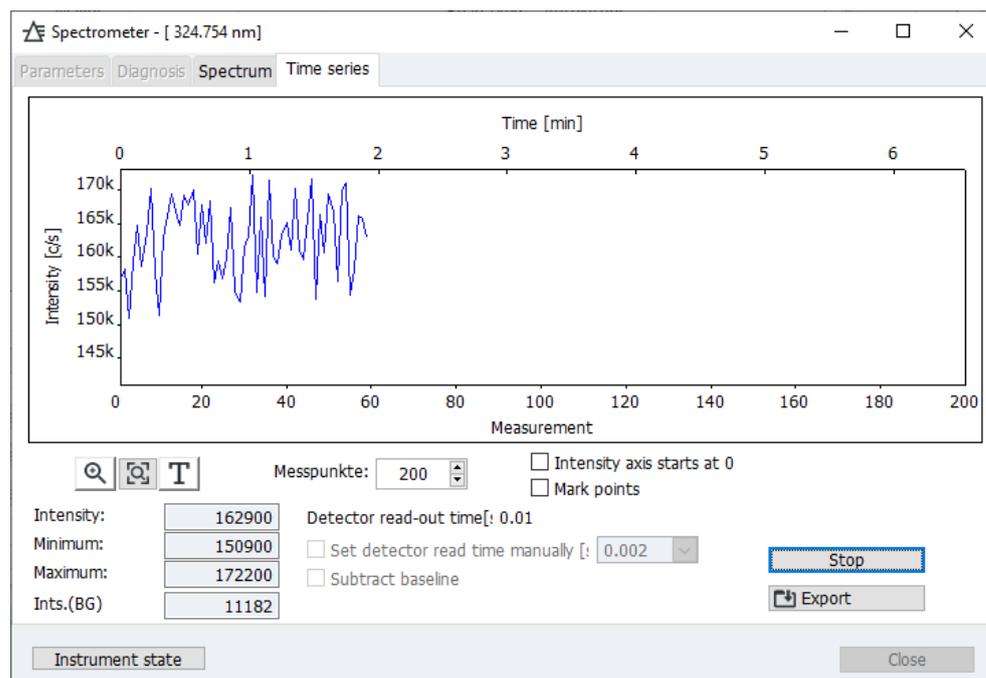
Avvio della misurazione del picco

- ▶ Nella finestra **Spectrometer / Parameters** impostare la lunghezza d'onda e la direzione di osservazione.
- ▶ Passare alla scheda **Spectrum**.
- ▶ Avviare la misurazione continua con **[Start]**.

I valori di misurazione sono rilevati con i parametri impostati e ripetuti continuamente fino all'attivazione di **[Stop]**

9.1.4 Registrazione della progressione del segnale

Nella finestra **Spectrometer / Time series** è possibile registrare la progressione del segnale dell'intensità per la lunghezza d'onda attualmente impostata nello spettrometro per un numero selezionato di punti di misurazione.



Oltre alla visualizzazione grafica, vengono forniti i valori digitali dell'intensità del momento, i valori massimi e minimi dell'intensità raggiunti e l'intensità del fondo.

È possibile impostare i seguenti parametri per la registrazione della progressione del segnale:

Opzione	Descrizione
Scaling	È possibile selezionare l'intervallo da visualizzare dopo aver attivato la modalità zoom  tenendo premuto il tasto sinistro del mouse. Il dimensionamento viene invertito cliccando su  .
Intensity axis starts at 0	Non impostare il dimensionamento automatico dell'asse delle y, ma farlo cominciare da "0".
Messpunkte	Seleziona il numero dei punti di misurazione dall'elenco.
Mark mode	I punti di misurazione sono evidenziati con un punto nel grafico.
Set detector read time manually	Seleziona il tempo di lettura del rilevatore CCD dal campo di elenco.
Subtract baseline	Vengono visualizzati i valori di intensità con correzione di fondo.

9.2 Plasma

La finestra **Plasma** comprende le seguenti funzioni:

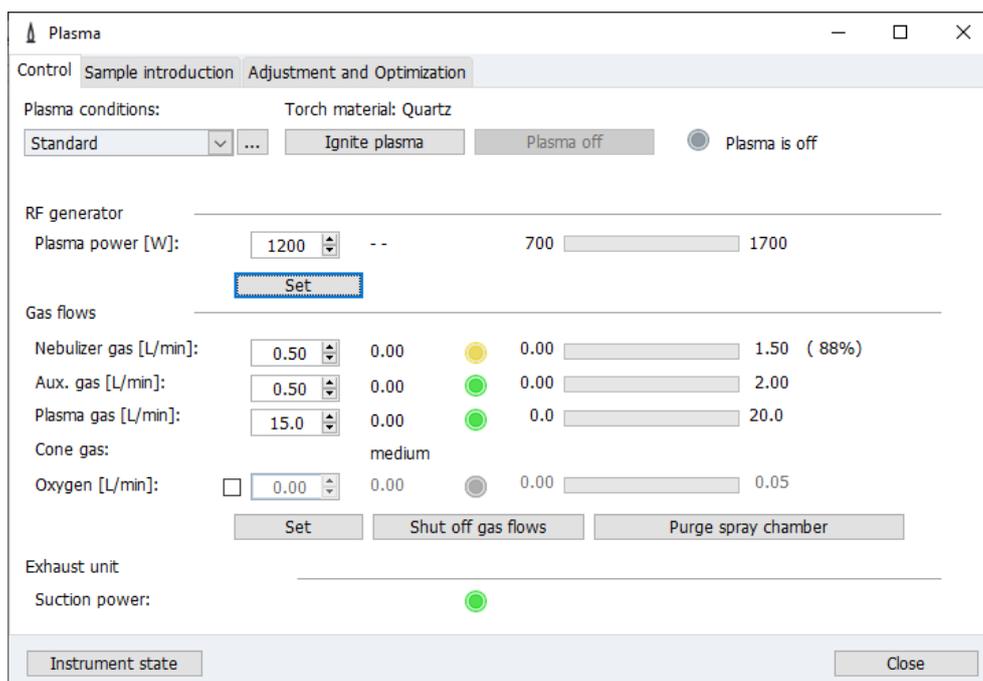
- Accensione/spegnimento del plasma
 - Controllo del generatore ad alta frequenza
 - Impostazione dei flussi del gas
 - Controllo della pompa dell'analizzatore
 - Regolazione del sistema ottico di trasferimento
 - Ottimizzazione automatica del flusso di gas nebulizzatore e della potenza del plasma
- Aprire la finestra **Plasma** cliccando su  nella barra delle icone o selezionare la voce del menu **Method Development | Plasma**.

Mediante **[Instrument state]** viene visualizzato un grafico dove vengono emessi i messaggi dei sensori di sicurezza del dispositivo ICP-OES. In caso di problemi con il plasma, qui è possibile vedere i messaggi di errore dei sensori.

9.2.1 Accensione del plasma e impostazione delle condizioni del plasma

Nella finestra **Plasma / Control** è possibile accendere/spegnere il plasma e regolare i flussi del gas nel dispositivo.

Funzioni della finestra Plasma / Control



Opzione	Descrizione
Plasma conditions	Selezionare le condizioni del plasma (potenza del plasma e flussi di gas).
[Ignite plasma] / [Extinguish plasma]	Accende il plasma e lo spegne quando il dispositivo ICP-OES è pronto.
RF generator	Imposta la potenza effettiva del plasma. La potenza del plasma definisce la temperatura del plasma. La corrente del generatore è controllata tramite il firmware per raggiungere la potenza effettiva del plasma.
Gas flows	Accende e regola i flussi di gas. Plasma gas Il gas plasma scorre lungo il tubo esterno e serve per generare il plasma. Nebulizer gas Il gas nebulizzatore nebulizza il campione e trasporta l'aerosol al plasma. È collegato al nebulizzatore. Il valore percentuale della riga del gas nebulizzatore fornisce informazioni su quanto il nebulizzatore sia permeabile/pulito (vedere qui in basso) Aux. gas Il gas ausiliario spinge via il plasma dall'iniettore e scorre tra il tubo interno e l'iniettore.

Opzione	Descrizione
	<p>Cone gas Il gas del cono rimuove la coda "fredda" di plasma per eliminare le interferenze dovute alla ricombinazione nel plasma in direzione di osservazione assiale. Allo stesso tempo, il gas del cono facilita il raffreddamento del cono.</p> <p>Oxygen L'ossigeno può essere aggiunto al gas nebulizzatore in qualità di gas supplementare in applicazioni selezionate. Il flusso di ossigeno deve essere attivato tramite la casella davanti all'impostazione del gas, prima di poter essere modificato.</p>
[Shut off gas flows]	Chiude ogni valvola del gas.
[Purge spray chamber]	Il gas nebulizzatore viene attivato per 1 minuto per spurgare l'aria della camera di nebulizzazione. In questo modo si facilita l'accensione del plasma in seguito a un'interruzione del funzionamento. Nel frattempo viene visualizzato un conto alla rovescia.
Suction power	Un circuito di sicurezza controlla che la potenza dell'estrattore collegato sia sufficiente per il funzionamento del dispositivo ICP-OES; se è così, la spia di indicazione si illumina in verde.

Con il tasto **[Set]** è possibile configurare i parametri modificati (potenza del plasma e flussi di gas) per il dispositivo ICP-OES.

Valutazione della funzione di nebulizzazione

Il nebulizzatore deve essere pulito se è stato ostruito da particelle del campione o da alte concentrazioni di sale del campione. Un indicatore del fatto che il nebulizzatore è ostruito è dato dall'aumento della pressione del gas di nebulizzazione.

Raffrontare la percentuale corrente (pressione) del parametro **Nebulizer gas** (gas di nebulizzazione) con il valore ottenuto dopo l'installazione del nuovo nebulizzatore o del nebulizzatore ripulito.

Pulire il nebulizzatore come descritto nelle istruzioni operative del dispositivo ICP-OES se la percentuale è cresciuta in modo significativo (di più della metà del valore originale), e pulirlo in ogni caso quando si raggiunge il 75%.

Selezione delle condizioni del plasma

L'elenco **Plasma conditions** contiene i parametri del plasma per diverse matrici dei campioni che sono stati salvati e, se è stato caricato un metodo, i parametri del metodo relativi alla linea.

Cliccando su **...**, si apre un menu contestuale con le funzioni di gestione dei parametri selezionati nell'elenco:

Funzione	Descrizione
Save current plasma parameters	Salva le condizioni del plasma configurate (potenza del plasma e flussi di gas) e le aggiunge all'elenco.
Delete entry	Elimina la voce selezionata. Le voci predefinite Standard , Kerosine e Hydride technique non possono essere eliminate.
Set plasma conditions	Configura i parametri del plasma della voce selezionata per il dispositivo ICP-OES.
Copy to method line	Disponibile se una linea del metodo è stata selezionata nell'elenco. Trasferisce le condizioni del plasma ai parametri del metodo della linea selezionata.
Copy to all method lines	Disponibile se una linea del metodo è stata selezionata nell'elenco. Trasferisce le condizioni del plasma ai parametri del metodo di tutte le linee.

Funzione	Descrizione
Set as method defaults	Salva le condizioni correnti del plasma come valori preimpostati per le nuove linee del metodo inserite (non si applica alle linee preferite).

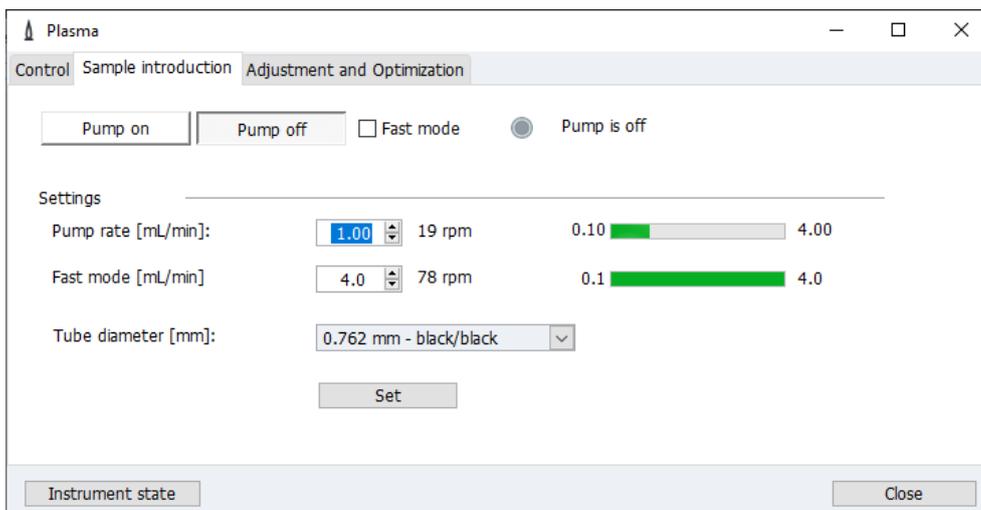
Vedere a riguardo anche

 Accensione e spegnimento del plasma [▶ 62](#)

9.2.2 Controllo dell'introduzione del campione della pompa

Nella finestra **Plasma / Sample introduction** controllare la funzione della pompa peristaltica del dispositivo ICP-OES.

Funzioni della finestra Plasma / Sample introduction

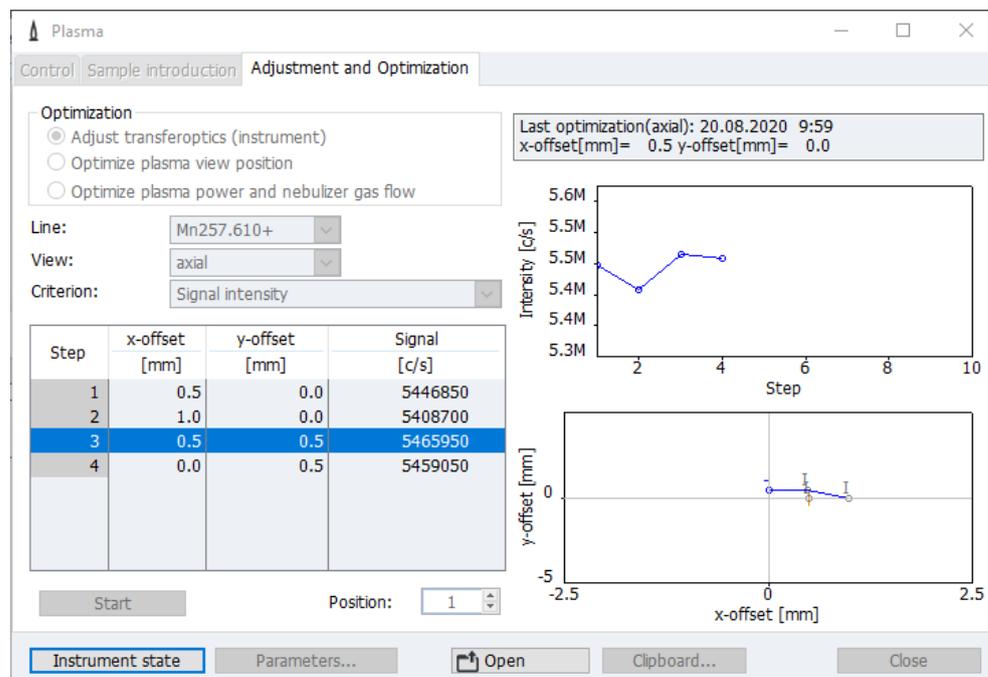


Funzioni / parametri	Descrizione
[Pump on]/ [Pump off]	Accende e spegne la pompa. Nello stato originale dopo l'attivazione del dispositivo ICP-OES, la pompa è accesa.
Fast mode	Porta manualmente la pompa in modalità rapida. Questa funzione può essere utilizzata per lavare manualmente il sistema di trasporto del campione. In seguito al lavaggio è necessario disattivare la casella per permettere nuovamente alla pompa di trasportare il campione.
Velocità della pompa	La velocità attuale della pompa viene visualizzata con l'unità RPM (giri al minuto).
Pump rate	Imposta la portata della pompa per il trasporto del campione durante la misurazione.
Fast mode	Imposta la portata della pompa per la modalità rapida. In modalità rapida, viene ottimizzato il tempo di trasporto per un cambio di campione o il tempo di trasporto della soluzione di lavaggio al nebulizzatore.
Tube diameter	Selezionare il tubo utilizzato dall'elenco. Il volume del campione trasportato (portata della pompa) viene calcolato dalle informazioni della velocità della pompa e dal diametro del tubo. I tubi sono stati codificati con tappi colorati. Selezionare la combinazione di tappi del tubo utilizzato dall'elenco.
[Set]	Applica le impostazioni.

9.2.3 Regolazione e ottimizzazione del plasma

Nella finestra **Plasma / Adjustment and Optimization** effettuare le seguenti impostazioni:

- Allineamento del sistema ottico di trasferimento con gli assi ottici dello spettrometro
- Calcolo dei valori di offset del sistema ottico di trasferimento per una linea di analisi dal metodo
- Ottimizzazione della potenza del plasma e del flusso di gas del nebulizzatore



Sono disponibili due metodi differenti per la regolazione e l'ottimizzazione e possono essere selezionati cliccando su **[Parameters]**.

Procedura	Descrizione
Grid search	L'intervallo è scansionato sulla base di un reticolo. Dal numero di punti di misurazione viene determinato quello dalla più alta intensità. La regolazione è esatta, ma richiede tempo a causa della determinazione di un grande numero di punti di misurazione.
Simplex optimization	<p>Il massimo energetico è determinato iterativamente. Da un punto di misurazione di partenza, viene determinato il punto di misurazione in prossimità con il più alto valore. Partendo da un punto di misurazione, viene nuovamente determinato il punto di misurazione dalla maggior energia. Il processo continua fino a che non venga trovato il massimo energetico.</p> <p>Questo metodo è più veloce del "Grid search", ma meno sicuro. Nelle diverse zone calde del plasma potrebbero verificarsi diversi massimi energetici, e perciò potrebbe essere trovato un massimo energetico errato se il punto di partenza non era favorevole.</p> <p>Per il metodo Simplex deve essere definito un Stopping criterion (criterio di arresto) come valore percentuale. Se 3 valori consecutivi non differiscono di più di questo valore percentuale, la regolazione viene terminata.</p> <p>Se è selezionato Start with optimized values, i parametri ottimizzati dell'ultima regolazione/ottimizzazione vengono utilizzati come valori iniziali per l'ottimizzazione corrente.</p>

Come criterio per la regolazione del sistema ottico di trasferimento (dispositivo) si utilizza l'intensità del segnale.

Il criterio di ottimizzazione viene automaticamente configurato in base alla lunghezza d'onda della linea di analisi, ma può essere modificato manualmente:

Criterio	Intervallo della lunghezza d'onda delle linee di analisi
Signal intensity	< 200 nm
Signal/background	da 200 a 350 nm
Signal/square root of background	> 350 nm

Regolazione del sistema ottico di trasferimento sugli assi ottici (centri del plasma)

La regolazione del sistema ottico di trasferimento sugli assi ottici avviene utilizzando una soluzione Mn. Preparare una soluzione Mn per la regolazione con la seguente concentrazione:

Direzione di osservazione	Soluzione Mn
axial	1 mg/L
radial	10 mg/L

- ▶ Attivare l'opzione **Adjust transferoptics (instrument)**.

La linea di analisi Mn è automaticamente impostata nell'elenco **Line**.

- ▶ Selezionare il metodo di regolazione in **[Parameters]** (si veda sopra).
- ▶ Selezionare la direzione di osservazione:

Opzione	Descrizione
axial	Osservazione da sopra
radial	Osservazione dal lato
attenuated axial	Osservazione dell'energia attenuata da sopra
attenuated radial	Osservazione dell'energia attenuata dal lato
closed	Osservazione con otturatore chiuso (per manutenzione)

- ▶ Immerge il tubo di entrata nel campione. Se si utilizza un campionatore, aggiustare la posizione sulla griglia per campioni.
- ▶ Cliccare su **[Start]**.

La regolazione del sistema ottico di trasferimento si avvia automaticamente. Al termine della regolazione, vengono visualizzati i nuovi dati.

- ▶ Accettare i nuovi valori di regolazione cliccando su **[OK]**.

Ottimizzazione della posizione di osservazione per una linea di analisi del metodo attivato

Il plasma possiede aree dalla differente temperatura. Durante l'ottimizzazione il punto di osservazione nel plasma è rilevato laddove l'analita ha la maggiore intensità del segnale. I valori sono salvati nel metodo come **Offset**.

- ▶ Nell'elenco **Line**, selezionare la linea di analisi dal metodo.
- ▶ Attivare l'opzione **Optimize plasma view position**.
Le informazioni riguardo la direzione di osservazione sono automaticamente trasferite dal metodo e il criterio è impostato per l'ottimizzazione (si veda sopra).
- ▶ Selezionare il metodo di regolazione in **[Parameters]** (si veda sopra).
- ▶ Immerge il tubo di entrata nel campione. Se si utilizza un campionatore, aggiustare la posizione sulla griglia per campioni.

Ottimizzazione delle condizioni del plasma per un campione	<ul style="list-style-type: none"> ▶ Cliccare su [Start]. La regolazione della posizione di osservazione si avvia automaticamente. Al termine, vengono visualizzati i valori di offset ottimizzati. ▶ Trasferire i nuovi valori di offset al metodo cliccando su [OK].
	<p>Dopo avere definito la posizione di osservazione degli analiti in un campione, è possibile ottimizzare le condizioni del plasma (potenza del plasma e flussi di gas).</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Attivare l'opzione Optimize plasma power and nebulizer gas flow . ▶ Nell'elenco Line, selezionare la linea di analisi dal metodo. <p>Le informazioni riguardo le condizioni del plasma esistenti sono automaticamente trasferite dal metodo e il criterio è impostato per l'ottimizzazione (si veda sopra).</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Selezionare il metodo di regolazione in [Set] (si veda sopra). ▶ Immergere il tubo di entrata nel campione. Se si utilizza un campionatore, aggiustare la posizione sulla griglia per campioni. ▶ Cliccare su [Start]. L'ottimizzazione della potenza del plasma e del flusso di gas di nebulizzazione si avvia automaticamente. Al termine, vengono visualizzati i valori ottimizzati. ▶ Trasferire i nuovi valori al metodo cliccando su [OK].

9.3 Campionatore

Il campionatore è un accessorio opzionale. Il campionatore è rilevato durante l'inizializzazione nella finestra delle impostazioni principali dopo aver avviato il programma ASpect PQ.

La finestra **Autosampler** comprende le seguenti funzioni:

- Visualizzazione del tipo di campionatore collegato
- Configurazione del campionatore
- Regolazione del campionatore
- Lavaggio delle parti percorse dal campione
- Inizializzare nuovamente il campionatore
- Esecuzione di un autotest

I parametri direttamente rilevanti per l'analisi (caricamento sulle griglie dei campioni e fasi del lavaggio) devono essere specificati nel metodo, nella sequenza e nei dati di identificazione del campione.

- ▶ Aprire la finestra **Autosampler** cliccando su  nella barra delle icone o selezionare la voce del menu **Method Development | Autosampler**.

Inizializzazione del campionatore

Il campionatore è solitamente inizializzato quando è attivato l'interruttore di accensione. Potrebbe essere necessario inizializzare nuovamente il campionatore se ha perso la sua orientazione (ad es. a causa di un urto). Verrà stabilita la comunicazione tra il campionatore, il dispositivo ICP-OES e il PC.

- ▶ Quando necessario, è possibile inizializzare nuovamente il campionatore senza riavviare il programma ASpect PQ cliccando su **[Re-home ASXpress+ after disassembling for cleaning]**.

Rilevamento del campionatore

Se il campionatore è stato acceso dopo l'avvio dell'ASpect PQ, è necessario registrare l'uso del campionatore nel programma.

- ▶ A questo scopo cliccare su **[Detect]** e quindi su **[Re-home ASXpress+ after disassembling for cleaning]**.

Nota: Se si utilizza Cetac ASX-560 con sistema di diluizione, il tasto [Detect] verrà nascosto.

Lavaggio delle parti percorse dal campione

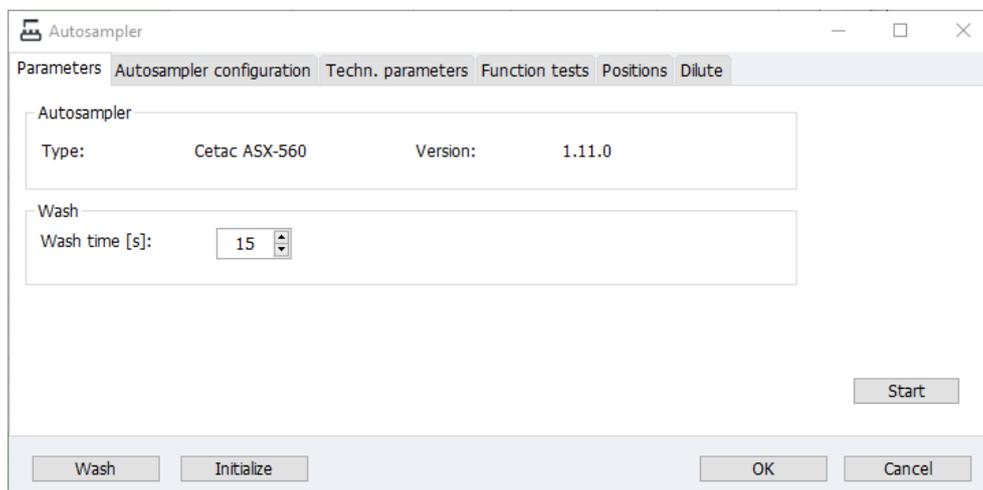
- ▶ Nella finestra **Autosampler / Parameters** impostare **Wash time**.
Il tempo di lavaggio preimpostato per il lavaggio è trasferito dal metodo corrente.
- ▶ Cliccare su **[Wash]**.
In alternativa, selezionare la voce di menu **Routine | Wash**.
 - ✓ Le parti percorse dal campione (tubi, nebulizzatore, camera di nebulizzazione, torcia) sono lavate con la pompa in modalità rapida per il tempo di lavaggio specificato.

9.3.1 Visualizzazione del campionatore collegato

Nella finestra **Autosampler / Parameters** è possibile visualizzare o configurare i seguenti parametri:

- Tipo di campionatore
- Parametri di lavaggio

Finestra Autosampler / Parameters



Tipo di campionatore

Nella finestra **Autosampler / Parameters** vengono visualizzati il tipo di campionatore rilevato durante l'inizializzazione e la versione del firmware del campionatore.

Parametri di lavaggio

Il tempo di lavaggio del sistema del campionatore, dal recipiente del campione fino alla torcia, viene preso dal metodo attuale. Le modifiche effettuate nella finestra **Autosampler / Parameters** non influenzano le voci del metodo. Durante il lavaggio del sistema utilizzando il campionatore, la soluzione di lavaggio è presa dal recipiente di lavaggio del campionatore.

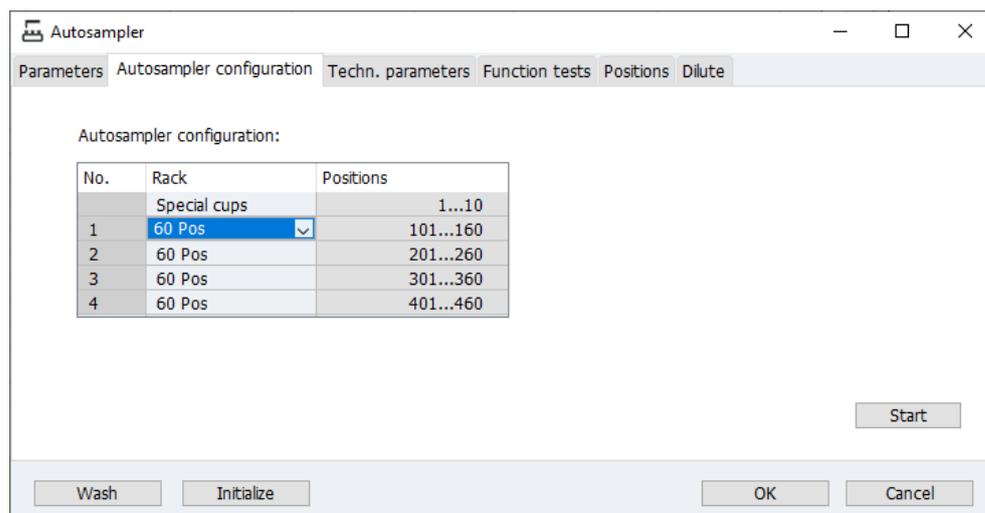
Vedere a riguardo anche

- 📄 Configurazioni per il trasporto del campione - finestra Method / Sample delivery [▶ 32]

9.3.2 Configurazione della griglia del campionatore

Nella finestra **Autosampler / Autosampler configuration** configurare le griglie dei campioni utilizzate nel campionatore:

Finestra Autosampler / Configuration



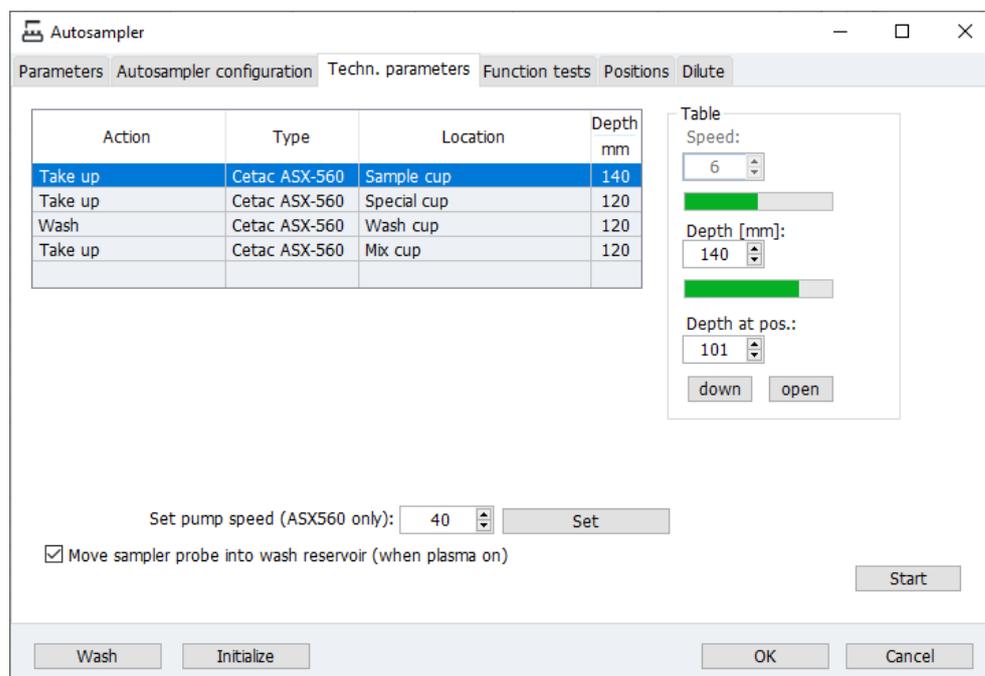
A seconda del campionatore utilizzato, è possibile impiegare diverse griglie per campioni e griglie per campioni speciali.

Selezionare le griglie dei campioni dalla tabella. Per le griglie dei campioni variabili, sono previsti numeri a tre cifre come numeri delle posizioni. La prima cifra indica la posizione della griglia dei campioni sul campionatore, gli altri due la posizione sulla griglia dei campioni. Pertanto, il numero 113 indicherà la posizione 13 sulla griglia dei campioni numero 1, per esempio. La griglia dei campioni variabile 1 si trova sul campionatore prima del recipiente di lavaggio, seguita dalle griglie dei campioni 2 e 3.

9.3.3 Parametri tecnici del campionatore

Nella finestra **Autosampler / Techn. parameters**, specificare la profondità di immersione della cannula nei vari recipienti.

Finestra Autosampler / Techn. parameters



Per i singoli recipienti, sono tenute in considerazione le seguenti azioni:

Recipiente	Azione
Sample cups	Aspira i campioni tramite il tubo della pompa.

Recipiente	Azione
Special cups	Aspira i campioni speciali tramite il tubo della pompa.
Wash cup	Spurga la cannula e il percorso di entrata.

Elementi della tabella delle azioni

Opzione	Descrizione
Action	Possibili azioni: Take up Prende il campione dal recipiente per trasportarlo alla torcia. Wash Prende la soluzione di lavaggio.
Type	Tipo di campionatore collegato
Location	Il recipiente a cui di riferisce una determinata azione
Depth	La profondità a cui si immerge la cannula in unità di 1 mm

Sottoarea della tabella

Utilizzando i controlli nell'area **Table**, è possibile modificare i parametri della riga della tabella selezionata.

Opzione	Descrizione
Depth	Imposta la profondità di immersione della cannula. La profondità di immersione è misurata dalla posizione più elevata del braccio del campionatore.
Depth at pos.	Posizione del recipiente del campione o del campione speciale alla quale viene misurata la profondità di immersione.
Set	Se attivato, il braccio del campionatore si sposta sopra il recipiente la cui posizione deve essere regolata. Con i recipienti dei campioni o dei campioni speciali, questa è la posizione impostata in Depth at pos. Se non è attivata, la profondità di immersione e la velocità vengono modificate senza che il braccio del campionatore si sposti sopra il recipiente.

Ulteriori opzioni

Se l'opzione **Move sampler probe into wash reservoir (when plasma on)** è attivata, la cannula viene inserita automaticamente nel recipiente di lavaggio dopo aver chiuso la finestra.

Soltanto ASX-560: imposta la velocità della pompa di lavaggio (livelli: 0-99). Il tasto **Set** salva permanentemente questo valore nel campionatore.

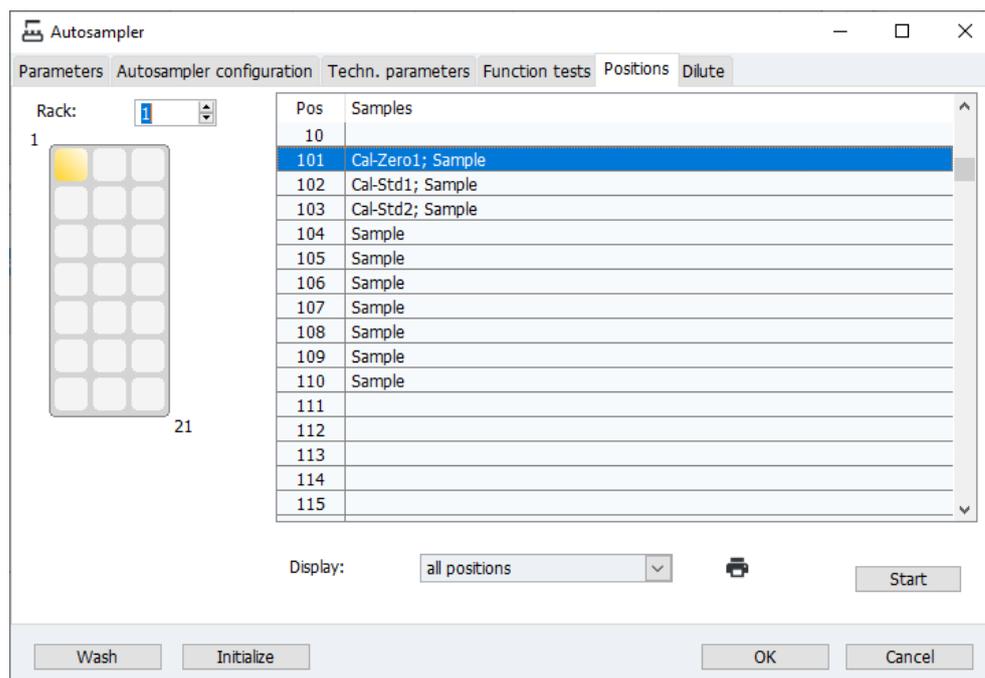
9.3.4 Visualizzazione delle posizioni dei campioni sul campionatore

Le posizioni del vassoio dei campioni nella sequenza corrente vengono visualizzate nella finestra **Autosampler / Positions**.

Per la visualizzazione è possibile scegliere tra le opzioni **all positions, only sample positions** e **only special positions**.

Vicino alla tabella si trova una rappresentazione schematica delle griglie dei campioni con la posizione dei campioni selezionata al momento. La posizione dei campioni può essere selezionata sia nella rappresentazione che nella tabella.

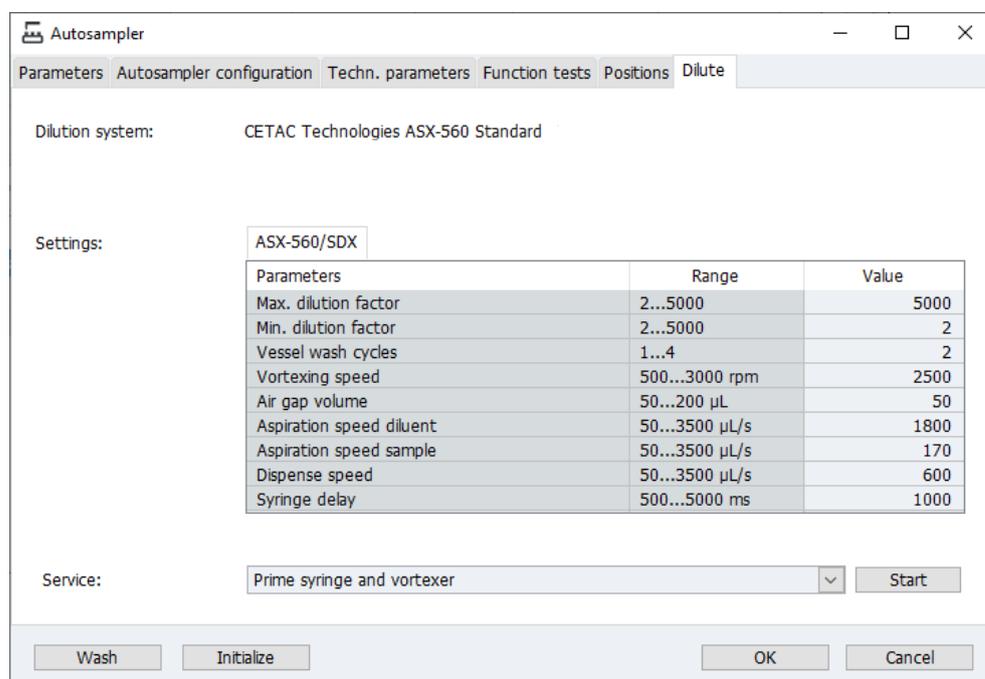
Finestra Autosampler / Positions



9.3.5 Funzione di diluizione

I parametri per la diluizione del campione in caso di utilizzo del campionatore Cetac ASX 560 con Cetac SDX_{HPLD} sono visualizzati nella finestra **Autosampler / Dilute**.

Finestra Autosampler / Dilution



Impostazioni

I parametri nell'area **Settings** contengono delle impostazioni predefinite che consentono di ottenere buoni risultati per la diluizione del campione. Questi parametri possono essere modificati entro gli intervalli di impostazione per l'ottimizzazione di un metodo.

Manutenzione

Nell'elenco **Service** è possibile selezionare funzioni di manutenzione su SDX_{HPLD} ed eseguirle con **[Start]**:

Opzione	Funzione
Prime syringe and vortexer	Il liquido per la diluizione è pompato dal sistema con una pompa a siringa e portato al miscelatore vortex. In questo modo, le bolle d'aria sono eliminate dal sistema e il miscelatore vortex viene condizionato.
Move syringe to removal position	Se la pompa a siringa deve essere smontata per un'operazione di manutenzione, lo stantuffo della siringa con questa funzione deve essere portato prima alla posizione corretta.
Re-home ASXpress+ after disassembling for cleaning	Solo se è installato ASXpress+: inizializzare ASXpress+ dopo l'installazione o la manutenzione.

9.4 Refrigeratore a ricircolo

Nel circuito di refrigerazione, una valvola del dispositivo ICP-OES viene attivata per aprire e chiudere il circuito. La sostituzione dell'acqua di raffreddamento viene quindi gestita da una procedura guidata.



NOTA

Seguire le note sulla manutenzione del refrigeratore a ricircolo e della preparazione dell'acqua di raffreddamento presenti nelle istruzioni operative dei dispositivi ICP-OES.

- ▶ Selezionare la voce di menu **Extras | Maintenance**.
- ▶ Nella finestra **Maintenance** avviare il cambio del refrigerante cliccando su **[Change]**.
- ▶ Seguire le istruzioni della procedura guidata.

10 Gestione dei dati

Questa sezione contiene informazioni riguardo a

- Opzioni di stampa
- Gestione dei metodi e delle sequenze
- Gestione dei dati dei risultati
- Definizione delle unità delle concentrazioni e contenuto
- Gestione dei dati per le soluzioni madre utilizzate frequentemente e i campioni QC

10.1 Funzioni di stampa in ASpect PQ

Per quanto riguarda i dati, ASpect PQ ha un grande numero di formati di uscita disponibile. Oltre all'invio alla stampante, i dati possono essere esportati nei formati Excel, PDF, HTML; XML o di testo, oppure possono essere salvati come immagini Bitmap o grafici scalabili.

Per i risultati di analisi e il contenuto delle finestre (ad es. le finestre **Method** oder **Sequence**) vengono utilizzati dei modelli di report. Una serie di modelli di report è già preinstallata. Se necessario, questi fogli possono essere singolarmente adattati mediante il designer per report "Report-/Print module List & Label".

10.1.1 Stampa dei dati dei risultati

ASpect PQ offre una gamma di opzioni per la stampa dei risultati di misurazione:

- Stampare il report completo. Un report completo di un'analisi contiene i parametri del metodo, la calibrazione e i risultati di analisi con i valori dei singoli campioni (misurazioni statistiche). È possibile stampare un report dei risultati correnti nella finestra principale e nei dati salvati.
- Stampare i risultati correnti. In questo tabulato vengono stampati soltanto i dati della finestra principale. È possibile effettuare una selezione tra un tabulato completo e uno compatto.
- Stampare i dati selezionati della scheda **Overview**. Per questo tabulato è possibile selezionare le linee di analisi e i risultati in una finestra di dialogo.

Stampa del report completo

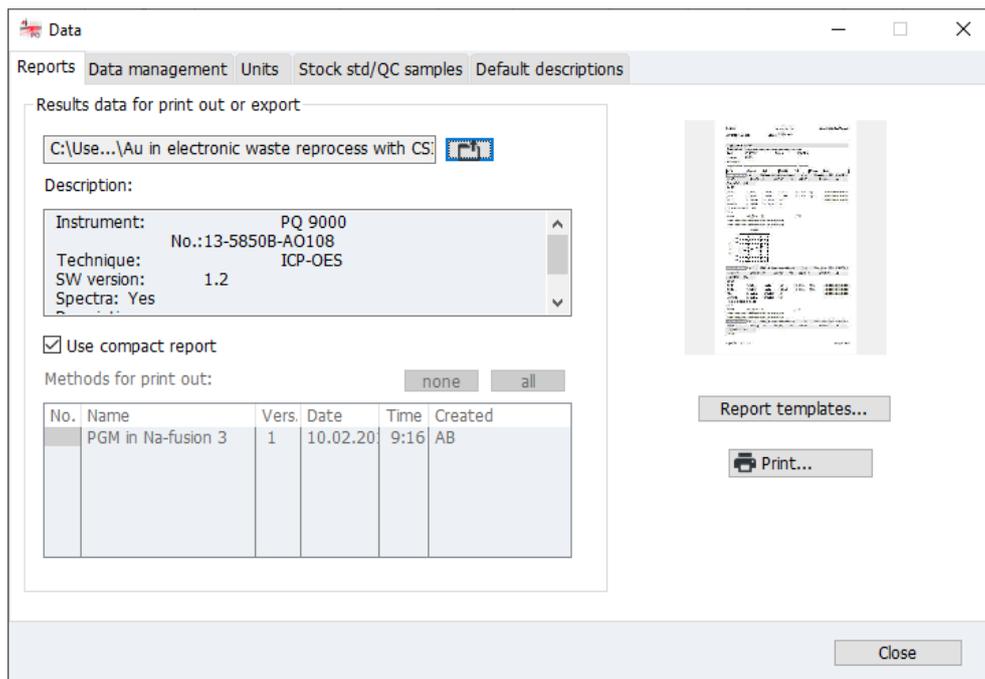
Un report completo di un'analisi contiene i parametri del metodo, la calibrazione e i risultati di analisi con i valori dei singoli campioni (misurazioni statistiche). I report completi dei risultati possono essere stampati nella finestra principale o nei file salvati.

- ▶ Aprire la finestra **Data / Reports** con l'icona .

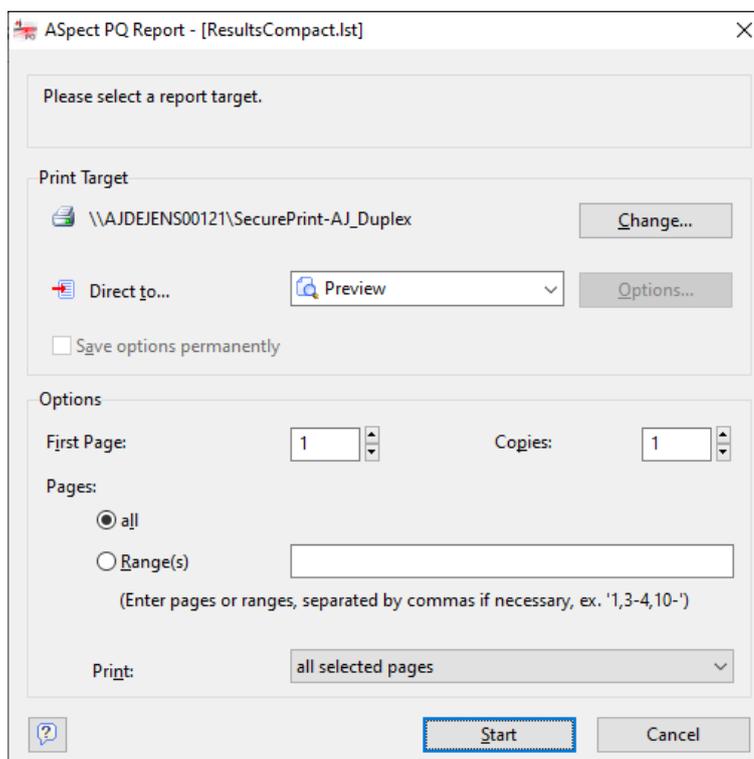
In alternativa, aprire la finestra con i comandi di menu **Extras | Data o File | Print | Report**.

Vengono visualizzati il nome del file corrente, le informazioni del file (elenco **Description**) e tutte le versioni del metodo utilizzate per creare i risultati correnti.

Finestra Data / Reports con la selezione dei dati dei risultati per la stampa



- ▶ Se si desidera stampare un file salvato, utilizzare  per aprire la finestra standard **Open** e selezionare il file richiesto.
- ▶ Nella tabella, selezionare tutte le versioni del metodo da stampare. Tenendo premuto il tasto Shift o Ctrl, cliccare sulla versione del metodo che si desidera selezionare. Con il tasto **[all]** vengono selezionate tutte le versioni, con il tasto **[(none)]** vengono eliminate tutte le selezioni effettuate.
- ▶ Con **[Print]** aprire la finestra **ASpect PQ Report** con la selezione dei formati di uscita.



- ▶ Se necessario, cambiare il formato nell'elenco **Ausgabe auf** ed impostare i parametri speciali per il formato di uscita con **[Options]**.

- ▶ Attivare la casella se si desidera rendere il formato selezionato quello preimpostato per questo modello di stampa.
- ▶ Avviare la stampa con **[Starten]**.



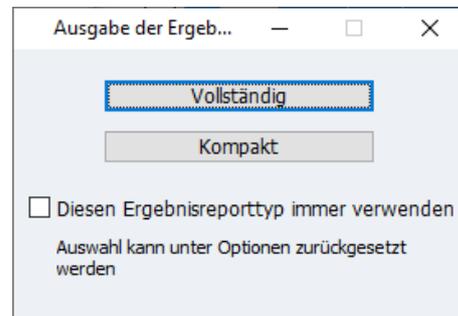
NOTA

Utilizzare l'impostazione per la stampa. Cliccando su **[Starten]**, le pagine da stampare verranno prima visualizzate nell'anteprima di stampa. Ciò consente di verificare che siano presenti tutti i dati richiesti e che non vi siano dati superflui prima che vengano inviati alla stampante.

Stampa dei risultati correnti

Per stampare i risultati della finestra principale:

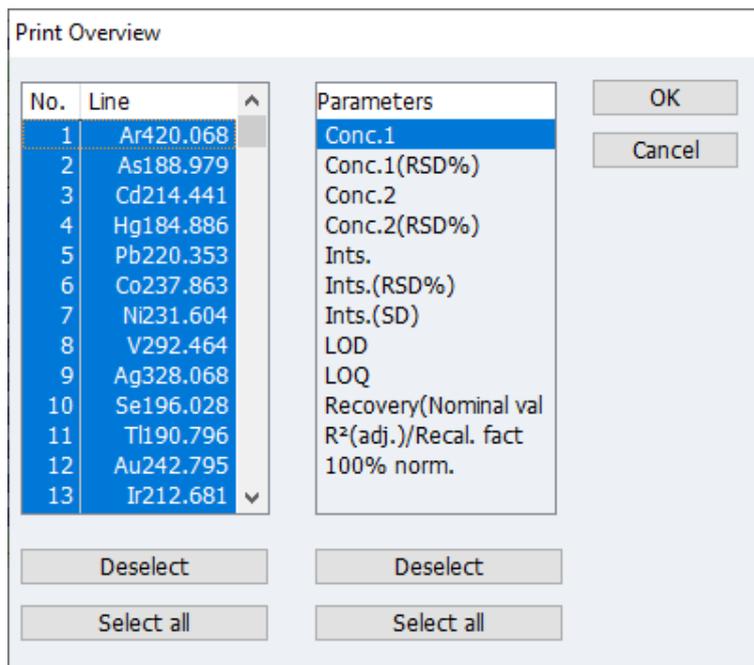
- ▶ Attivare la scheda "Results" nella finestra principale di cui si vuole stampare il contenuto.
- ▶ Avviare la stampa con il comando di menu **File | Print | Active Window**. Comparirà la finestra **Results report format**.



- ▶ Cliccare su **[Complete]** se si desidera stampare i risultati con i diagrammi del segnale. Selezionare **[compact]** per stampare i risultati in modo compatto. Se si attiva la casella **Always use this results report type** nella finestra Results, e si clicca su **[Complete]** o **[compact]**, questa finestra non si aprirà più per la successiva stampa dei risultati, poiché verrà automaticamente utilizzato il tipo di report usato nell'ultima stampa. È possibile resettare questa impostazione nella finestra **Options / View**.
- ▶ Proseguire come descritto sopra per "Stampa del report completo".

Stampa dei dati selezionati

- ▶ Passare alla scheda **Overview** nella finestra principale.
- ▶ Cliccare su  nella sezione inferiore di questa scheda o selezionare la voce di menu **File | Print | Active Window**. Comparirà la finestra **Print Overview**.



- ▶ Selezionare tutte le linee e i parametri che si desidera stampare e confermare la selezione con **[OK]**.
Si apre la finestra **ASpect PQ Report**.
- ▶ Proseguire come descritto sopra per "Stampa del report completo".

Vedere a riguardo anche

📖 Opzioni di visualizzazione [▶ 131]

10.1.2 Stampa di ulteriori parametri e impostazioni

I seguenti parametri e impostazioni di analisi possono essere stampati dalla rispettiva finestra:

- Metodo
- Sequenza
- Dati dei risultati nella scheda **Overview** nella finestra principale
- ID del campione
- QC (grafici del Controllo Qualità)
- Calibrazione
- Posizioni del campionatore
- ▶ Attivare la finestra il cui contenuto si desidera stampare nello spazio di lavoro di ASpect PQ.
- ▶ Avviare la stampa dei parametri cliccare su  nella finestra.
Il alternativa utilizzare il comando di menu **File | Print | Active Window**.
Comparirà la finestra **ASpect PQ Report**.
- ▶ Se necessario, cambiare il formato nell'elenco **Ausgabe auf** ed impostare i parametri speciali per il formato di uscita con **[Options]**.
- ▶ Avviare la stampa con **[Starten]**.

10.1.3 Modelli di report

Utilizzo della modalità di design del metodo

I modelli di report preinstallati possono essere adattati individualmente. I report possono essere modificati con valori reali per una migliore visualizzazione.

- ▶ Attivare la voce di menu **File | Report design mode**.
- ▶ Aprire la finestra il cui modello di report si desidera modificare.
- ▶ Se presente, cliccare qui su . In alternativa, selezionare il comando di menu **File | Print | Active Window**.
- ▶ Confermare la richiesta di modifica del modello del report con **[Yes]**. Il designer dei report si apre.
- ▶ Effettuare le modifiche desiderate e salvare il modello di report modificato.
- ▶ Collegare il modello di report ai contenuti di stampa corrispondenti (si veda "Cambio dell'assegnazione" qui sotto).

Breve introduzione al designer dei report

I singoli componenti del modello del report sono chiamati "Oggetti". Una tabella può quindi consistere di un oggetto ciascuno per il titolo, i valori dell'elenco e un grafico.

Tali oggetti contengono nuovamente le informazioni da stampare e portano le caratteristiche di layout quali font, allineamento, impaginazione, colori, ecc.

Il designer del report rende disponibile vari tipi di oggetti, ad es. oggetti di testo, grafici, codice a barre. Questi possono essere posizionati a piacimento nell'area di lavoro, e la loro dimensione può essere modificata. In base al tipo, un oggetto può presentare diverse informazioni o avere differenti caratteristiche.

Gli oggetti desiderati sono di norma trascinati con il mouse sull'area di lavoro, quindi forniti dei contenuti e delle caratteristiche di layout rilevanti. In alternativa, è possibile trascinare una variabile dall'elenco delle variabili sull'area di lavoro mediante "Drag & Drop". Se ancora manca l'oggetto dalla posizione di destinazione, ne verrà automaticamente creato uno e la variabile sarà assegnata all'oggetto.

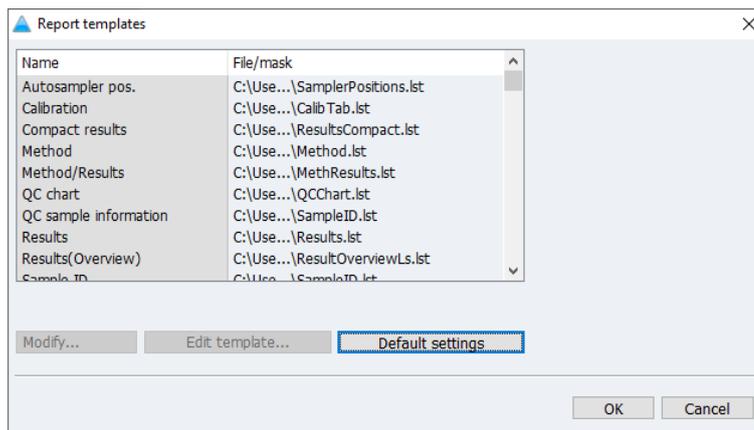
Per poter elaborare un oggetto esistente, questo deve prima essere selezionato. Per fare ciò, cliccare sull'oggetto con il tasto sinistro del mouse. L'oggetto selezionato sarà riconoscibile dalla sua cornice evidenziata. Se si crea un nuovo oggetto, questo sarà automaticamente selezionato e può essere modificato direttamente per quanto riguarda dimensione e posizione. Con un doppio click è possibile aprire una finestra di dialogo mediante la quale possono essere modificate ulteriori impostazioni.

Ulteriori informazioni sul funzionamento e sulle funzioni del designer di report sono riportate nel manuale "designer_deu.pdf" / "designer_eng.pdf" sul CD di installazione del software.

Finestra Report templates

Nella finestra **Report templates**, i report sono modificati e assegnati alle finestre di ASpect PQ. Diversi fogli possono essere assegnati a una finestra utilizzando una maschera per file, dalla quale viene selezionato il report desiderato all'avvio della stampa.

- ▶ Con l'icona  aprire la finestra **Data / Reports**.
- ▶ Cliccare su **[Report templates]**.



Per le seguenti finestre, deve essere disponibile un modello dei report:

Nome	Descrizione
Results	Contenuto della scheda Results nella finestra principale
Compact results	Panoramica compatta dei risultati
Results (Overview)	Contenuto della scheda Overview nella finestra principale
Calibration	Calibrazione dell'analisi Finestra Calibration
Method	Parametri del metodo: finestra Method
Method / Results	Report completo
Autosampler pos.	Assegnazione delle posizioni del campionatore: finestra Autosampler / Positions
Sample ID	Dati del campione: finestra Sample ID / Sample Information
QC chart	Dati dei grafici QC: Finestra QC
QC sample information	Dati dei campioni QC finestra Sample ID / QC sample information
Sequence	Serie di sequenza: Finestra Sequence

Cambio dell'assegnazione

- ▶ Selezionare la finestra i cui modelli di report devono essere modificati nella finestra **Report templates**.
- ▶ Aprire la finestra di dialogo con **[Modify]** per assegnare i file.
- ▶ Se deve essere assegnato un modello di report, attivare l'opzione **Use report template file (*.lst)** e selezionare il file desiderato cliccando su .
- ▶ Se all'avvio della stampa vengono offerti contemporaneamente diversi report, attivare l'opzione **Allow file selection (mask, e.g. c:\Reports\Results*)**. Inserire il nome della maschera mentre si utilizzano caratteri jolly nel campo di inserimento.
- ▶ Confermare le impostazioni con **[OK]**.

Modifica del modello di report

- ▶ Selezionare la finestra i cui modelli di report devono essere modificati nella finestra **Report templates**.
- ▶ Con **[Edit]** aprire la finestra **Report designer**.
- ▶ Ulteriori informazioni sul designer per report sono riportate nel manuale "designer_deu.pdf" / "designer_eng.pdf" sul CD di ASpect PQ.

Ripristino delle impostazioni predefinite

- ▶ Per ripristinare lo stato dopo l'installazione del programma ASpect PQ, usare **[Default settings]**.

10.2 Gestione dei dati per tutti i tipi di dati in ASpect PQ

ASpect PQ gestisce la crescita dei dati in diversi modi.

I metodi, le sequenze e i modelli di correzione sono salvati separatamente in un database. Il database del metodo è salvato come "method.tps". Il database che contiene i dati della sequenza ha il nome "sequ.tps".

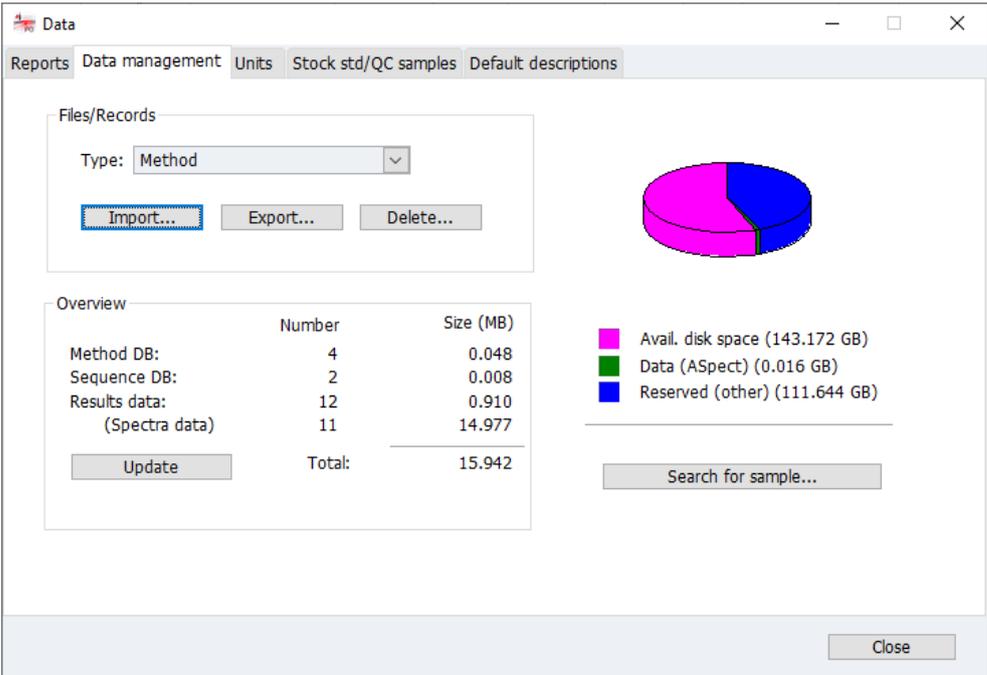
Per i risultati ottenuti dalle misurazioni, vengono creati database separati. Ulteriori risultati possono essere aggiunti al database da successive misurazioni. La cancellazione di campioni singoli da un database è comunque impossibile. I nomi dei database dei risultati hanno l'estensione ".tps".

I dati del campione sono contenuti in un programma di calcolo con tabelle, ad es. un formato leggibile tramite Excel con estensione ".csv".

I metodi, le sequenze e i risultati sono organizzati nella finestra **Data / Data management**. Le stesse funzioni di dialogo per la gestione dei metodi e delle sequenze sono utilizzate anche per l'apertura e il salvataggio di questi file.

La finestra **Data / Data management** si apre cliccando su  o selezionando il comando del menu **Extras | Data**.

Finestra Data / Data management



	Number	Size (MB)
Method DB:	4	0.048
Sequence DB:	2	0.008
Results data:	12	0.910
(Spectra data)	11	14.977
Total:		15.942

In questa finestra sono gestiti i seguenti dati:

- Metodi
- Sequenze
- Risultati
- File delle linee/della lunghezza d'onda
- Modelli di correzione
- Spettri di correzione
- Modelli di report
- Linee preferite
- Fogli di lavoro

Scegliere il tipo di dati desiderati dal campo di elenco **Type**.

10.2.1 Gestione dei metodi e delle sequenze

Finestra del database per i metodi e le sequenze

Metodi e sequenze vengono salvati nei database. Le finestre dei database che hanno elementi identici si aprono durante il salvataggio, l'apertura, l'eliminazione, l'importazione e l'esportazione di metodi e sequenze.

Visualizzazioni e campi di inserimento

Opzione/visualizzazione	Descrizione
Name	Inserimento o visualizzazione del nome del metodo o della sequenza selezionati.
Cat.	Proprietà supplementari per la ricerca del metodo o della sequenza nel database. Possono essere inserite un massimo di 3 cifre come nome della categoria. È possibile limitare il numero di voci nell'elenco inserendo un identificatore di categoria nel campo "Cat." Se si desidera visualizzare i metodi o le sequenze di tutte le categorie, eliminare la voce dal campo "Cat."
Method list/ Sequence list	Visualizzazione dei metodi o delle sequenze salvate con nome, versione, data, orario, categoria e operatore.
Sort by	Ordina l'elenco dei metodi o delle sequenze secondo vari criteri, quali nome/versione o data/orario. In base all'opzione selezionata, le voci potrebbero essere ordinate in modo Increasing (ascendente) o Decreasing (discendente).
Description	Visualizzazione o inserimento di osservazioni supplementari, ad es. sull'uso del metodo o della sequenza.
Current version only	Se nel database esistono diverse versioni di un metodo o di una sequenza con lo stesso nome, verrà mostrato soltanto il metodo o la sequenza con il numero della versione più alto.

I metodi o le sequenze con lo stesso nome non vengono sovrascritti nel software ASpect PQ. Viene invece creata un'ulteriore versione, e il numero della versione è aumentato di 1.

I database forniscono inoltre le funzioni per l'impostazione, l'esportazione o l'eliminazione di singoli metodi o sequenze dai rispettivi database. Nel testo di questa sezione, i metodi e le sequenze verranno da qui in poi denominati "record dei dati".

Nota

Per selezionare diversi record dei dati dalla finestra Database, tenere premuto il tasto Ctrl o Shift durante la selezione col mouse.

- | | |
|----------------------------------|---|
| Apertura della gestione dei dati | <ul style="list-style-type: none"> ▶ Aprire la finestra Data / Data management con il comando di menu Extras Data o cliccando su . ▶ Nell'elenco Type, selezionare il tipo di record dei dati da modificare: Method o Sequence. |
| Esportazione dei record dei dati | <p>Utilizzando la funzione di esportazione, è possibile rendere accessibili i record dei dati ad altri dispositivi/computer. È possibile esportare contemporaneamente diversi record dei dati in un file comune. I file di esportazione hanno le seguenti estensioni: record dei metodi - ".met", record delle sequenze - ".seq".</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Con [Export] aprire la finestra del database. ▶ Selezionare i record dei dati e cliccare su [Export]. ▶ Nella finestra Save as, inserire il nome di un file e confermarlo con [Save]. <p>La finestra Database con i file esportati verrà visualizzata.</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Uscire dalla finestra del database con [Close] e tornare alla finestra Data. |
| Importazione dei record dei dati | <p>Utilizzando la funzione di importazione, è possibile caricare i record dei dati da altri dispositivi/computer nel vostro database. Un file importato potrebbe contenere diversi record dei dati, dai quali è possibile selezionare quelli da caricare.</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Con [Import] aprire la finestra Select the method file for import o Select the sequence file for import) con le funzioni preimpostate per l'apertura dei file. ▶ Selezionare il file da importare. ▶ Confermare la selezione con [Open].
Ciò farà comparire la finestra Database che contiene nome, data di creazione e categoria dei record dei dati contenuti nel file. Nella barra del titolo della finestra viene visualizzato il nome del file di importazione. ▶ Selezionare i record dei dati da importare nella finestra Database e cliccare su [Import].
I record dei dati sono importati nel database. Se è già presente un metodo o una sequenza con lo stesso nome, verrà creata una nuova versione del metodo o della sequenza. Nella finestra Database compaiono le versioni correnti dei record dei dati disponibili. ▶ Uscire dalla finestra del database con [Close] e tornare alla finestra Data. |
| Eliminazione dei record dei dati | <p>Utilizzando la funzione "Delete" (eliminazione), è possibile eliminare in modo permanente i record dei dati dal database.</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Con [Delete] aprire la finestra del database. ▶ Selezionare i record dei dati da eliminare. ▶ Cliccare su [Delete]. |

- ✓ La finestra Database viene aggiornata, e visualizza soltanto i record dei dati rimanenti. Per record dei dati con lo stesso nome, il numero della versione viene ridotto di 1.

- Eliminazione dei record dei dati mediante il menu File
- ▶ La finestra del database **Delete method** o **Delete sequence** può anche essere aperta con il comando di menu **File | Delete | Method** o **File | Delete | Sequence**.
 - ▶ Quindi, procedere come descritto sopra.

10.2.2 Gestione dei file dei risultati

I risultati vengono salvati nel database durante la misurazione. Un database contenente i risultati può essere copiato o eliminato.

- ▶ Aprire la finestra **Data / Data management** con la voce di menu **Extras | Data** o cliccando su .
- ▶ Nell'elenco **Type** selezionare l'opzione **Results**.

Esportazione dei file dei risultati

Mediante questo comando è possibile copiare in un'altra cartella uno o più database, nonché i file degli spettri.

- ▶ Nella finestra **Data / Data management** cliccare su **[Export]**. Comparirà la finestra **Export** con la panoramica dei database dei risultati disponibili. I file dei risultati sono elencati con nome, dimensione e data/orario dell'ultima modifica.
- ▶ Selezionare i database dei risultati cliccando con il mouse. Per selezionare più di un database, tenere premuto il tasto Ctrl o Shift.
- ▶ Con il comando **[Export]** aprire la finestra **Select directory**.
- ▶ Selezionare la cartella e confermarla con **[OK]**.
 - ✓ I file dei risultati vengono così copiati alla cartella selezionata.

Cancellazione dei risultati

I risultati possono essere eliminati in modo permanente.

- ▶ Nella finestra **Data / Data management** cliccare su **[Delete]**.
- ▶ Nella finestra **Delete results files**, selezionare il database dei risultati da eliminare cliccando con il mouse. Per selezionare più di un database, tenere premuto il tasto Ctrl o Shift.
- ▶ Cliccare su **[Delete]**, per cancellare il database dei risultati.
- ▶ Confermare la richiesta di eliminazione dei file con **[OK]**.
 - ✓ I dati sono eliminati in modo permanente.

Ricerca dei risultati di singoli campioni

È possibile ricercare ogni singolo campione di cui si conosca il nome.

- ▶ Nella finestra **Data / Data management** cliccare su **[Search for sample]**. In alternativa, selezionare la voce di 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

- ▶ Inserire il nome del campione nel campo **Sample**.
- ▶ Se si stanno cercando campioni del cui nome faccia parte la stringa di testo inserita, attivare la casella **Substring search**.
- ▶ Delimitare l'ora della misurazione attivando la casella **Date between**.
- ▶ Avviare la ricerca con **[Start]**.

Tutti i risultati dei campioni che contengono il nome inserito verranno visualizzati nella tabella.

- ▶ Per aprire uno dei database dei risultati visualizzati, selezionare il database dall'elenco e confermarlo con **[Open]**.
 - ✓ I risultati vengono visualizzati nella finestra principale.

10.2.3 Esportazione dei file delle linee/della lunghezza d'onda

Il file delle linee/della lunghezza d'onda, assieme alle linee di analisi e i picchi principali salvati, sono specifici del dispositivo. Sono salvati nel computer che controlla il dispositivo ICP-OES. Per usare il file delle linee/della lunghezza d'onda su un computer differente, procedere nel modo seguente:

- ▶ Aprire la finestra **Data / Data management** con il comando del menu **Extras | Data** o cliccando sull'icona .
- ▶ Nell'elenco **Type** selezionare l'opzione **Lines/wavelength file** e cliccare su **[Export]**.
- ▶ Selezionare una cartella per salvare il file e cliccare su **[OK]**.
 - ✓ Il file con il nome "lines.dat" viene salvato nella cartella selezionata.

10.2.4 Gestione dei modelli di correzione

I modelli di correzione sono utilizzati per le correzioni spettrali. Possono essere trasferiti da un dispositivo ad un altro. I file dei modelli di correzione hanno l'estensione ".MOD".

- ▶ Aprire la finestra **Data / Data management** con il comando del menu **Extras | Data** o cliccando sull'icona .
- ▶ Nell'elenco **Type** selezionare l'opzione **Correction models**.

Importazione dei modelli di correzione

Con questo comando è possibile importare modelli di correzione in ASpect PQ.

- ▶ Cliccare su **[Import]**.
- ▶ Selezionare il file del modello di correzione da importare e cliccare su **[Open]**. Comparirà la finestra del database **Import Correction model**.
- ▶ Cliccare su **[Import]**.
 - ✓ Il modello di correzione è trasferito al database.

Esportazione dei modelli di correzione

Con questo comando è possibile esportare il modello di correzione su un altro computer.

- ▶ Cliccare su **[Export]**.
- ▶ Selezionare il modello desiderato nella finestra del database **Export Correction model**. È possibile selezionare più di un modello alla volta.
- ▶ Cliccare su **[Export]**.
- ▶ Nella finestra **Save as**, inserire il nome e la cartella di salvataggio e cliccare su **[Save]**.
 - ✓ Il file con il modello di correzione viene salvato.

Eliminazione dei modelli di correzione

Con questo comando è possibile eliminare i modelli di correzione che non sono più necessari.

- ▶ Cliccare su **[Delete]**.
- ▶ Selezionare il modello desiderato nella finestra del database **Correction model**.
- ▶ Cliccare su **[Delete]**.
 - ✓ Il modello di correzione viene eliminato dal database.



NOTA

Si prega di notare che non viene verificato che il modello di correzione sia utilizzato in un metodo.

Vedere a riguardo anche

- 📖 Rimozione dell'interferenza spettrale – finestra Edit spectra / Spectral corrections [▶ 83]

10.2.5 Eliminazione degli spettri di correzione

Gli spettri di correzione non più richiesti possono essere eliminati dal database.

- ▶ Aprire la finestra **Data / Data management** con il comando del menu **Extras | Data** o cliccando sull'icona .
- ▶ Nell'elenco **Type** selezionare l'opzione **Correction spectra** e cliccare su **[Delete]**.
- ▶ Nella finestra del database **Correction spectra** selezionare lo spettro da cancellare e cliccare su **[Delete]**.
 - ✓ Verrà effettuato un controllo per verificare se lo spettro in questione è utilizzato in un modello di correzione. Se non dovesse essere così, lo spettro di correzione viene cancellato.

10.2.6 Importazione dei modelli di report

I modelli di report per la stampa creati esternamente devono essere importati in ASpect PQ tramite la gestione dei dati:

- ▶ Aprire la finestra **Data / Data management** con il comando del menu **Extras | Data** o cliccando sull'icona .
- ▶ Nell'elenco **Type** selezionare l'opzione **Report templates** e cliccare su **[OK]**.
- ▶ Nella finestra **Open** selezionare il file e cliccare su **[Open]**.
I file dei report presentano l'estensione ".lst".
 - ✓ Il modello di report viene importato in ASpect PQ. Ora, assegnare i modelli di report al contenuto di stampa.

Vedere a riguardo anche

 Modelli di report [▶ 118]

10.2.7 Gestione delle linee preferite

Le linee preferite possono essere definite nella finestra **Method**. Contengono le linee di analisi utilizzate per una specifica applicazione e i parametri del metodo che dipendono dalle linee. I file delle linee preferite hanno l'estensione ".fav".

- ▶ Aprire la finestra **Data / Data management** con il comando del menu **Extras | Data** o cliccando sull'icona .
- ▶ Nell'elenco **Type** selezionare l'opzione **Favorites**.

Importazione delle linee preferite

Con questo comando è possibile importare un record di dati preferiti in ASpect PQ.

- ▶ Cliccare su **[Import]**.
- ▶ Nella finestra del database **Favorites details** cliccare su **[Import]**.
- ▶ Selezionare il file delle linee preferite da importare e cliccare su **[Open]**.
 - ✓ Dopo una richiesta, il record di dati verrà aggiunto alle linee preferite.

Esportazione delle linee preferite

- ▶ Cliccare su **[Export]**.
- ▶ Selezionare il record di dati desiderato nella finestra del database **Favorites details**. È possibile selezionare più di un modello alla volta.
- ▶ Cliccare su **[Export]**.
- ▶ Nella finestra **Targetfile (new or existing file)')** immettere il nome e la cartella di destinazione e cliccare su **[Save]**.
Come file di destinazione si può anche utilizzare un file esistente. In questo caso, il record di dati verrà integrato là.
 - ✓ Il file che contiene la registrazione delle linee preferite viene salvato.

Eliminazione delle linee preferite

Con questo comando è possibile eliminare le linee preferite che non sono più necessarie.

- ▶ Cliccare su **[Delete]**.
- ▶ Selezionare il record di dati nella finestra del database **Favorites details**.
- ▶ Cliccare su **[Delete]**.
 - ✓ Il record di dati selezionato viene eliminato dal database.

Vedere a riguardo anche

 Definizione delle proprie linee di analisi preferite [▶ 29]

10.2.8 Importazione ed esportazione di fogli di lavoro

I fogli di lavoro possono essere importati ed esportati. Opzionalmente è possibile aggiungere i metodi e le sequenze memorizzati.

- ▶ Aprire la finestra **Data / Data management** con il comando del menu **Extras | Data** o cliccando sull'icona .
- ▶ Nell'elenco **Type** selezionare l'opzione **Worksheet**.

Esportazione dei fogli di lavoro

- ▶ Cliccare su **[Export]**.
- ▶ Nella finestra **Export Worksheet** selezionare il foglio di lavoro in questione. Per esportare anche i metodi e le sequenze, attivare l'opzione **including sequence and method(s)**.
- ▶ Cliccare su **[Export]** e indicare una cartella e un nome per il file esportato.
- ▶ Confermare gli inserimenti con **[Save]**.
 - ✓ Il foglio di lavoro viene esportato con l'estensione ".WST".

Importazione dei fogli di lavoro

- ▶ Cliccare su **[Import]**.
- ▶ Nella finestra **Import Worksheet** selezionare **[Import]**. Per importare anche i metodi e le sequenze esportati, attivare l'opzione **including sequence and method(s)**.
- ▶ Selezionare il foglio di lavoro nella finestra standard e cliccare su **[Open]**.
 - ✓ Il foglio di lavoro verrà importato.

10.3 Salvataggio dei risultati nel formato ASCII/CSV

I risultati delle misurazioni e delle analisi possono essere salvati automaticamente e manualmente nel formato ASCII/CSV. I parametri per i decimali e per i separatori delle colonne per entrambi i formati di esportazione possono essere impostati nella finestra **Options / ASCII/CSV export**.

Esportazione continua dei dati in automatico

Quando l'opzione per esportazione continua dei dati in automatico viene attivata, ogni voce nella tabella dei risultati viene istantaneamente esportata al file ASCII specificato. Il nome di questo file ASCII può essere definito nella finestra **Options / Continuous ASCII export**.

Esportazione manuale dei dati

Se si desidera esportare i dati manualmente, è possibile selezionare le righe della tabella dei risultati da esportare.

- ▶ Selezionare i campioni nella tabella dei risultati. Tenere premuto il tasto Ctrl o Shift e selezionare i campioni cliccando sulla riga dei campioni. Per selezionare tutte le righe, utilizzare il comando del menu **Edit | Select All Ctrl+A**.
- ▶ Con il comando del menu **Edit | Save Selection** aprire la finestra standard **Save as**. In alternativa è anche possibile cliccare con il tasto destro del mouse sulla riga selezionata e scegliere la voce corrispondente nel menu contestuale.
- ▶ Inserire il nome del file e confermare con **[OK]**.
I dati sono salvati in un formato leggibile per il programma di calcolo con tabelle con l'estensione ".csv".

Vedere a riguardo anche

 Opzioni di esportazione ▶ 133

 Opzioni per l'esportazione ASCII continua [▶ 133](#)

10.4 Specificazione delle unità di misurazione

Nella finestra **Data / Units** è possibile gestire le unità disponibili per tutto il programma.

- ▶ Aprire la finestra **Data / Units** con il comando del menu **Extras | Data** o cliccando sull'icona .

Sono disponibili 3 versioni preferite (per soluzioni: mg/L, µg/L, ng/L; per campioni solidi: mg/kg, µg/kg, ng/kg). Tali unità non possono essere modificate dall'utente. Le unità che deviano da queste possono essere definite a piacimento. Se non specificato diversamente, immettere sotto fattore il fattore di conversione.

Opzione	Descrizione
Unit	Nome dell'unità (massimo 10 caratteri)
Comment	Osservazioni (massimo 20 caratteri)
Factor	Il fattore 1 corrisponde a 1 µg/L o µg/kg, il fattore 1000 corrisponde a 1 ng/L o ng/kg
Type	<p>solid Unità riferita a un campione solido</p> <p>liquid Unità riferita a un campione liquido (soluzione)</p> <p>liquid grav. Unità riferita a un campione liquido che viene pesato, ad es. olio</p>

Con i tasti **[Append]** e **[Insert]** è possibile aggiungere nuove unità alla fine dell'elenco o sopra alla riga attualmente selezionata. Il tasto **[Delete]** elimina soltanto le unità definite dall'utente, le unità preferite non possono essere cancellate. Le modifiche sono salvate permanentemente con **[Save]**.

10.5 Gestione dei database per campioni madre e QC

I database con gli standard madre e i campioni QC utilizzati più di frequente vengono gestiti nella finestra **Data / Stock std/QC samples**. Questi standard per elementi singoli e multipli sono quindi disponibili nell'intero programma.

- ▶ Aprire la finestra **Data / Stock std/QC samples** con il comando del menu **Extras | Data** o cliccando sull'icona .
- ▶ Attivando le opzioni **Stock standard** o **QC samples** si seleziona cosa visualizzare nella tabella.

Finestra Data / Stock std/QC samples

The screenshot shows a software window titled 'Data' with a menu bar containing 'Reports', 'Data management', 'Units', 'Stock std/QC samples', and 'Default descriptions'. The 'Stock std/QC samples' tab is active. Below the menu bar, there are radio buttons for 'Stock standard' (selected) and 'QC samples'. A table with the following data is displayed:

	Name	Unit	Elements and concentrations
1	Merck IV	mg/L	Ag 1000;Al 1000;B 1000;Ba 1000;Bi 1000;Ca 1000;Cd 1000;Co
2	Fluka Mix 1	mg/L	Al 10; As 10; Ba 10; Be 10; Bi 10; B 10; Ca 10; Cd 10; Cs 10; C
3	Fluka Mix 2	mg/L	Au 10; Ge 10; Hf 10; Ir 10; Mo 10; Nb 10; Pd 10; Pt 10; Re 10
4	Fluka Mix 3	mg/L	Sc 10; Y 10; La 10; Ce 10; Pr 10; Nd 10; Sm 10; Eu 10; Gd 10;

Below the table, there is an 'Example:' field containing 'Ni 0.5; Cu 10; Fe 25; Co 0.00'. A 'Concentrations...' button is located to the right of the example. At the bottom of the window, there are buttons for 'Append', 'Insert', 'Delete', and 'Save', along with a 'Close' button in the bottom right corner.

Colonna	Significato
Name	Inserire il nome dello standard (massimo 20 caratteri).
Unit	Selezionare il nome dello standard (massimo 10 caratteri).
Elements and concentrations	Le concentrazioni degli elementi sono inserite nel formato "Simbolo dell'elemento Concentrazione" nell'unità selezionata, ad es. Fe 0.5;Cu 10; Co 0.005. In alternativa, utilizzare [Concentrations] per aprire il campo di inserimento con lo stesso nome dove è possibile assegnare la concentrazione ad ogni elemento.

I tasti hanno le seguenti funzioni:

Tasto	Funzione
[Append]	Aggiunge una nuova riga alla fine di un elenco.
[Insert]	Aggiunge una riga sopra una riga selezionata nell'elenco.
[Delete]	Elimina la riga evidenziata.
[Save]	Salva gli elenchi degli standard madre/dei campioni QC.
[Concentrations]	Apri il campo di inserimento per l'elemento e la concentrazione dello standard selezionato.

10.6 Creazione di osservazioni predefinite

Per i processi seguenti è possibile preimpostare delle osservazioni definite dall'utente:

- Salvataggio del metodo
- Salvataggio di una sequenza
- Avvio di una rielaborazione
- Avvio della misurazione

Le osservazioni definite dall'utente possono essere inserite tramite il pulsante  accanto al campo **Description** nelle rispettive finestre.

- Creazione di un'osservazione
- ▶ Aprire la finestra **Data / Default descriptions** con il comando del menu **Extras | Data** o cliccando sull'icona .
 - ▶ Selezionare il processo nell'elenco **Select category**.
 - ▶ Cliccando su **[Edit template]** aprire l'elenco delle osservazioni.
 - ▶ Creare una nuova osservazione cliccando su **[New]**. Immettere un **Name** con il quale l'osservazione può essere selezionata. Immettere nel campo **Text** l'osservazione desiderata.
 - ▶ Un'osservazione può essere modificata tramite **[Modify]** o eliminata dall'elenco a discesa tramite **[Delete]**.

10.7 Utilizzo degli appunti di Windows

Copia dei risultati negli appunti I risultati dei campioni selezionati possono essere copiati direttamente negli appunti di Windows e resi quindi accessibili per altre applicazioni di Windows.

I rispettivi comandi si trovano nel menu Edit:

menu Edit...	Descrizione
Copy visible Columns only Ctrl+C	Copia i risultati visibili dei campioni della tabella corrente.
Copy all Columns	Copia i risultati dei campioni di tutte le tabelle.
Column Titles	Se attivata (è presente la spunta), verranno copiati anche i titoli delle colonne.

- ▶ Selezionare i campioni nella tabella dei risultati.
 - Tenere premuto il tasto Ctrl o Shift e selezionare i campioni cliccando sulla riga dei campioni.
 - Per selezionare tutte le righe, utilizzare il comando del menu **Edit | Copy all Columns**.
- ▶ Attivare eventualmente il comando del menu **Edit | Column Titles** per copiare anche la riga con il titolo.
- ▶ Selezionare il comando del menu corrispondente per copiare i risultati negli appunti.

Copia dei grafici come screenshot

Le finestre con i grafici o i grafici delle curve di calibrazione, i segnali di intensità o di emissione possono essere copiati come screenshot negli appunti di Windows.

- ▶ Cliccare con il tasto destro del mouse sul grafico. Si aprirà un menu contestuale con due comandi per copiare.
- ▶ Selezionare il comando per copiare l'oggetto desiderato: copiare soltanto il grafico o l'intera finestra come viene visualizzata.
 - ✓ L'oggetto selezionato viene copiato negli appunti ed è disponibile per altre applicazioni di Windows.

11 Personalizzazione di ASpect PQ

Nella finestra **Options** è possibile effettuare le seguenti impostazioni, che si applicano a tutte le operazioni di ASpect PQ:

- Opzioni di visualizzazione
- Cartella di destinazione dei file
- Parametri per l'esportazione dei dati
- Impostazioni generalmente applicabili per la sequenza di analisi

Le impostazioni rimangono attive dopo l'uscita e il riavvio di ASpect PQ.

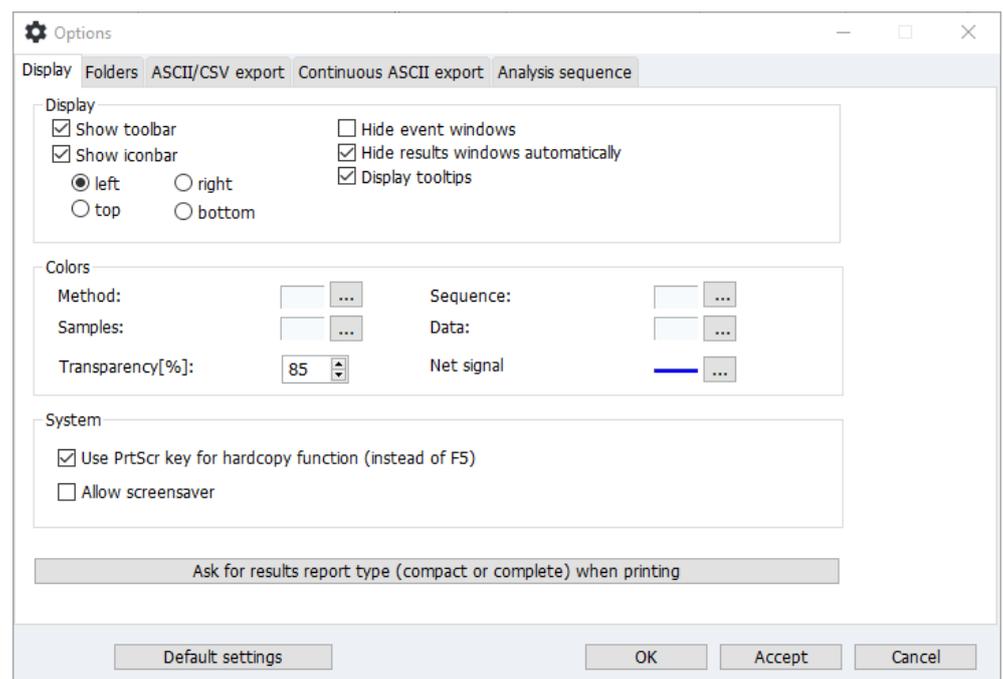
Apertura della finestra Options La finestra **Options** può essere aperta con il comando di menu **Extras | Options**.

11.1 Opzioni di visualizzazione

Nella finestra **Options / Display** è possibile definire le funzioni visibili nello spazio di lavoro.

- ▶ Aprire la finestra **Options / Display** con il comando di menu **Extras | Options**.

Finestra Options / Display



Opzione	Descrizione
Show toolbar	Mostra la barra degli strumenti con i tasti per la routine di misurazione.
Show iconbar	Mostra la barra delle icone con i tasti grandi per accesso rapido e seleziona la posizione della barra delle icone. (La posizione della barra delle icone può inoltre essere modificata trascinandola con il mouse, ma le impostazioni non saranno salvate fino all'avvio successivo del programma).
Hide event windows	Nasconde la finestra degli episodi (ad es. Delay time). I messaggi verranno quindi visualizzati nella barra di stato della finestra principale.

Opzione	Descrizione
Hide results windows automatically	Le finestre dei risultati vengono nascoste se le sottofinestre (ad es. Method) sono aperte. Dopo avere chiuso le sottofinestre, le finestre dei risultati vengono nuovamente mostrate.
Display tooltips	Brevi testi di aiuto (tooltip) vengono visualizzati quando il cursore del mouse passa sopra i tasti delle icone e sui titoli delle colonne nelle finestre Method , Sequence e Sample ID .
Colors	Il tasto ... apre la finestra di dialogo per la selezione dei colori. È qui possibile scegliere per lo sfondo degli elenchi colori predefiniti o definiti ex novo.
Use PrtScr key for hardcopy function (instead of F5)	In quanto opzione predefinita, la stampa dello screenshot viene avviata con [F5]. In questo caso, il tasto [Print] della tastiera è utilizzato per la funzione di appunti di Windows. Se la casella è attivata, il tasto [Print] avvierà la stampa dello screenshot. Questa opzione è attiva soltanto dopo un riavvio di ASpect PQ.
Allow screensaver	Se attivata, lo screensaver di Windows si attiverà durante i periodi di inattività.
[Ask for results report type (compact or complete) when printing]	Quando si stampano i risultati mediante la voce del menu .File Print Active Window è possibile scegliere tra un report compatto o uno completo. Un clic su questo tasto resetterà nuovamente la selezione Always use this results report type e consentirà di effettuare una nuova selezione del tipo di report.

Il tasto **[Default settings]** resetta tutte le opzioni e le posizioni delle finestre salvate, ripristinando le impostazioni predefinite.

11.2 Cartelle di destinazione

Le cartelle di destinazione vengono definite durante l'installazione. Vengono visualizzate nella finestra **Options / Folder**, dove possono anche essere in parte modificate.

- Aprire la finestra **Options / Folder** con il comando di menu **Extras | Options**.

Funzioni della finestra Options / Folder

Cartella	Descrizione
Program	Cartella di installazione per file di programma che sono eseguibili.
Work directory	Directory per i dati dell'utente Questa directory contiene delle sottocartelle. Viene definita durante l'installazione o mediante la gestione utente opzionale.
Temporary data	Directory per i file di applicazioni temporanee.
Sample Information	Cartella preimpostata per l'apertura e il salvataggio dei file che contengono informazioni sui campioni. Questa cartella può essere modificata. Cliccare su ... per selezionare la nuova cartella. È inoltre possibile selezionare una cartella diversa durante l'apertura e il salvataggio dei file che contengono informazioni sui campioni.
Export/Import	Cartella preimpostata per l'esportazione o l'importazione dei dati dei metodi e della sequenza e per l'esportazione dei dati sui risultati in file CSV Questa cartella può essere modificata. Cliccare su ... per selezionare la nuova cartella. È possibile selezionare una cartella diversa anche per l'esportazione e l'importazione.

Cartella	Descrizione
Results	Directory per i dati dei risultati Questa directory preimpostata potrebbe contenere sottocartelle per il salvataggio dei risultati. Queste cartelle sono disponibili per il salvataggio dei file dei risultati all'avvio delle misurazioni.
Application data	Directory per i dati nei quali ASpect PQ salva i dati necessari.

Mediante il tasto **[Add]** è possibile creare nuove sottocartelle per la cartella "Results" per il salvataggio dei risultati. Inoltre, qui è possibile eliminare e rinominare cartelle vuote.

11.3 Opzioni di esportazione

Nella finestra **Options / ASCII/CSV export** è possibile definire i parametri per l'esportazione dei risultati ai file ASCII. I parametri si applicano ad entrambe le forme dell'esportazione dei dati, da quella automatica e continua all'esportazione manuale.

- ▶ Aprire la finestra **Options / ASCII/CSV export** con il comando di menu **Extras | Options**.

Impostazioni nella finestra Options / ASCII/CSV export

Opzione	Descrizione
Decimal separator	Stabilisce il separatore per i numeri decimali.
List separator	Stabilisce il carattere con il quale gli elementi di un elenco vengono separati gli uni dagli altri.

Per l'esportazione degli elenchi dei risultati selezionare **Decimal separator** e **List separator**.

Nell'area **Results fields for export** è possibile determinare quali colonne della tabella dei risultati sono esportate nel file ASCII. L'opzione **all** consente di esportare tutte le colonne dell'elenco dei risultati (con tutte le sottoschede). Con l'opzione **only selected fields** si apre un elenco nel quale è possibile selezionare le colonne da esportare.

Il tasto **[Default settings]** resetta tutte le opzioni e le posizioni delle finestre salvate, ripristinando le impostazioni predefinite.

Vedere a riguardo anche

- ▣ Salvataggio dei risultati nel formato ASCII/CSV [▶ 127]

11.4 Opzioni per l'esportazione ASCII continua

Nella finestra **Options / Continuous ASCII export** si può attivare l'esportazione automatica dei dati dei risultati durante la sequenza di analisi. Il file di esportazione viene aggiornato dopo la produzione di una nuova linea nella finestra del processo e dei risultati. I dati verranno aggiunti ai file già esistenti.

Ulteriori opzioni per l'esportazione possono essere definite nella finestra **Options / ASCII/CSV export**.

- ▶ Aprire la finestra **Options / Continuous ASCII export** con il comando di menu **Extras | Options**.

Esportazione dei dati dei risultati

La casella **Continuous ASCII export of results data** attiva la funzione di esportazione. Successivamente, deve essere selezionata un'opzione per il nome del file:

Opzione	Descrizione
Method name.csv	Il nome del file corrisponde al nome del metodo. L'estensione del file è ".csv". Il file viene salvato nella cartella di esportazione/importazione preimpostata (finestra Options / Folder).
Results file name.csv	Il nome del file corrisponde al nome del file dei risultati. L'estensione del file è ".csv". Il file viene salvato nella cartella di esportazione/importazione preimpostata (finestra Options / Folder).
other	È possibile impostare il nome del file e la cartella di destinazione che si desidera. Con il tasto ... si apre la finestra standard Save as per inserire una cartella di destinazione e un nome del file. I dati vengono salvati in questo file in modo progressivo, finché non viene assegnato un nuovo nome o non si sceglie un nome alternativo.
Create separate file for each sample (result row number and sample name is appended to file-name)	Il nome del file è aggiunto con il numero della riga dell'elenco dei risultati e il nome del campione. I caratteri non consentiti vengono sostituiti da trattini bassi (ad es. Testmethod-001 QC 1 mg_L.csv).

Esportazione degli spettri

Per l'esportazione degli spettri, attivare l'opzione **Continuous export of spectra (CSV)** e selezionare una cartella di destinazione.

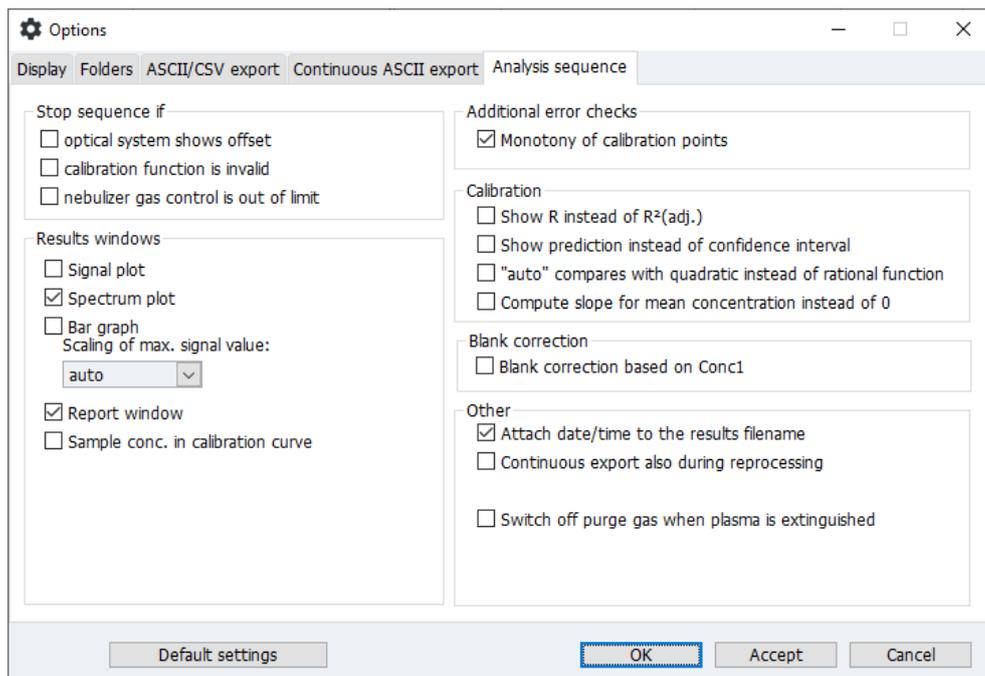
Gli spettri vengono inoltre esportati come file CSV nella cartella di esportazione specificata. Il nome del file viene generato in base allo schema "Riga dell'elenco-Nome del campione-Nome della linea-Misurazione ripetuta", ad es. 0007-campione-AI309-02.csv.

11.5 Opzioni per la sequenza di analisi

Nella finestra **Options / Analysis sequence** è possibile definire le opzioni generali per la sequenza di analisi.

- ▶ Aprire la finestra **Options / Analysis sequence** con il comando di menu **Extras | Options**.

Finestra Options / Analysis sequence



Arresto dopo i seguenti errori

L'analisi viene monitorata per i seguenti errori e può essere cancellata se tali errori si verificano:

Opzione	Descrizione
optical system shows offset	Arresto se la configurazione della lunghezza d'onda ("Ne correction") è errata.
calibration function is invalid	Arresto se la funzione di calibrazione non può essere calcolata.
nebulizer gas control is out of limit	Arresto se il valore di controllo del nebulizzatore viene superato. Il valore di controllo del flusso del nebulizzatore viene determinato durante la calibrazione. Se il valore di controllo cambia durante l'analisi successiva, è probabile che le particelle ostruiscano il nebulizzatore.

Ulteriore controllo degli errori

Opzione	Descrizione
Monotony of calibration points	I punti di calibrazione verranno testati per la monotonia. Il test di monotonia serve a determinare se una concentrazione di standard più elevata porti a valori misurati più alti.

Visualizzazione dei risultati

Opzione	Descrizione
Signal Plot	Durante il processo di analisi viene visualizzata una finestra che mostra un grafico del segnale misurato come funzione di tempo.
Spectrum Plot	Durante il processo di analisi viene visualizzata una finestra che mostra un grafico dell'intervallo spettrale registrato.
Bar graph	Mostra le intensità misurate come un grafico a barre.
Scaling of max. signal value	Definisce il massimo dell'asse del valore della misurazione per la presentazione della curva del segnale. auto: Dimensionamento automatico dell'asse. In alternativa, è possibile impostare questa opzione utilizzando la funzione del menu View Scaling .

Opzione	Descrizione
Report window	Durante il processo di analisi viene visualizzata una finestra che mostra le informazioni dello stato del plasma.
Sample conc. in calibration curve	Mostra la finestra Sample conc. in calibration curve con la calibrazione corrente e, se già misurata, il grafico di ricalibrazione. Dopo la misurazione del campione, il calcolo della concentrazione non corretto dall'emissione viene evidenziato da linee rosse supplementari. Se è utilizzata una calibrazione supplementare, la curva di calibrazione convertita verrà visualizzata.

Calibrazione

Questa scheda consente di effettuare impostazioni di base per la calibrazione. Tutte le caselle sono preimpostate per essere disabilitate.

Opzione	Descrizione
Show R instead of R²(adj.)	Se attivata, verrà mostrato il coefficiente di correlazione. Il coefficiente di determinazione corretto (regolato) è preimpostato per essere fornito.
Show prediction instead of confidence interval	Se attivata, verrà visualizzata la banda di previsione per la calibrazione. L'intervallo di confidenza è preimpostato per essere fornito.
auto compares with quadratic instead of rational function	"auto" designa la selezione automatica della funzione di calibrazione. Se attivata, la funzione quadratica verrà utilizzata per il confronto. L'impostazione predefinita è la funzione sigmoidea.
Compute slope for mean concentration instead of 0	Se attivata, il coefficiente angolare del grafico di calibrazione verrà calcolato per la calibrazione media dell'intervallo di calibrazione. Il coefficiente angolare è preimpostato per essere calcolato per una concentrazione 0.

**NOTA**

Tutte le opzioni citate sopra devono essere attivate per la compatibilità del calcolo della funzione di calibrazione quadratica in conformità alle normative DIN 38402 e ISO 8466-2.

Correzione del valore del bianco

Per la correzione del valore del bianco è possibile scegliere tra 2 metodi di calcolo diversi: basato sulla conc.1 o sulla conc.2

Con il metodo di calcolo basato sulla conc.2 si calcola per prima la concentrazione originale del valore del bianco ($conc2_{BV}$) sulla base degli ID dei campioni del valore del bianco. Per la determinazione della conc.2 del campione si tiene conto della $conc2_{BV}$.

Con il metodo di calcolo basato sulla conc.1, la concentrazione del valore del bianco determinata direttamente dal campione ($conc1_{Blank}$) viene utilizzata per il calcolo della concentrazione del campione. Questo metodo può essere impiegato se i dati dell'ID del campione (ad es. diluizioni) non influiscono considerevolmente sulla concentrazione delle soluzioni del valore del bianco e pertanto non vengono inseriti dati dell'ID del campione per i valori del bianco.

Esempio di calcolo per un campione originale liquido precedentemente diluito:

- Basato su conc.1 $conc2_{Sample} = (conc1_{Sample} - conc1_{Blank}) * DF_{Sample}$
- Basato su conc.2 $conc2_{Sample} = (conc1_{Sample} * DF_{Sample}) - conc2_{Blank}$

$conc1_{Sample}$ Concentrazione del campione senza considerare i dati dell'ID del campione

$conc2_{Sample}$	Concentrazione originale del campione
$conc1_{Blank}$	Concentrazione del valore del bianco senza considerare i dati dell'ID del campione
$conc2_{Blank}$	Valore del bianco originale
DF_{Sample}	Fattore di diluizione del campione

L'impostazione predefinita per la correzione del valore del bianco è il metodo basato sulla $conc.2$. Se si desidera utilizzare il metodo breve basato sulla $conc.1$ senza considerare l'ID campione del valore del bianco, attivare l'opzione **Blank correction based on Conc1**.

Altre opzioni

Opzione	Descrizione
Attach date/time to the results filename	L'orario e la data all'avvio della misurazione vengono automaticamente aggiunti al nome del file dei risultati.
Continuous export also during reprocessing	Dopo la rielaborazione dei risultati, questi vengono automaticamente esportati.
Do not update timestamp when reprocessing	Dopo la rielaborazione dei risultati, sono memorizzati gli orari delle misurazioni originali.
Switch off purge gas when plasma is extinguished	Per risparmiare gas, il gas di lavaggio viene spento quando il plasma è stato spento.

Vedere a riguardo anche

 Inserimento dei parametri di calibrazione – finestra Method / Calibration [▶ 37]

12 Supplemento

12.1 Descrizione dei contrassegni utilizzati nella visualizzazione dei valori

Sigla	Significato	Valori	Per
> Cal	Il valore medio è maggiore dell'intervallo di lavoro della curva di calibrazione	Valori medi	Sequenza e finestra dei risultati
< Cal	Il valore medio è minore dell'intervallo di lavoro della curva di calibrazione	Valori medi	Sequenza e finestra dei risultati
< LOD	Il valore è minore del limite di rivelabilità	Valori medi	Sequenza e finestra dei risultati
< LOQ	Il valore è minore del limite di determinazione e maggiore del limite di rivelabilità	Valori medi	Sequenza e finestra dei risultati
RSD!	Il valore medio è fuori dall'intervallo della deviazione standard relativa specifica.	Valori medi	Sequenza e finestra dei risultati
RR!	Il valore medio è fuori dall'intervallo relativo specifico	Valori medi	Sequenza e finestra dei risultati
Factor!	Il limite del fattore di ricalibrazione per la curva di calibrazione è stato superato	Curva di calibrazione	Sequenza e finestra dei risultati
R ₂ (adj.) o R	La qualità della regressione R ₂ (adj.) o R (a seconda della selezione nella finestra Options / Analysis sequence) della curva di calibrazione è inferiore al valore specifico.	Curva di calibrazione	Sequenza e finestra dei risultati Finestra Calibration
#MAN.	Il valore individuale è stato escluso manualmente dal calcolo dei valori medi.	Valori individuali	Finestra Sample single values
#COR.	Il valore individuale è stato automaticamente escluso dal calcolo dei valori medi dal test dei valori erratici di Grubbs	Valori individuali	Finestra Sample single values