

Оглавление

Раздел 1. Общие сведения	3
1.1. Назначение программы.....	3
1.2. Требования к аппаратному обеспечению.....	3
1.3. Используемые термины и принятые обозначения	4
Раздел 2. Установка и настройка программы	6
2.1. Установка и запуск программы.....	6
2.2. Настройка программы.....	7
Раздел 3. Интерфейс программы.....	9
3.1. Главное окно	9
3.2. Главное меню	10
3.3. Панель инструментов	11
3.4. Каналы отображения.....	12
Раздел 4. Разделы главного меню программы	16
4.1. Архив	16
4.2. Методика	17
4.3. Эксперимент	25
4.4. Анализ.....	29
4.5. Отчётность	30
4.6. Настройка	33
4.7. Каналы	34
Раздел 5. Порядок работы.....	35
5.1. Подготовка к анализу	35

5.1.1. Настройка программы	35
5.1.2. Подготовка прибора и электродов	36
5.2. Проведение измерения	36
5.2.1. Отмывка ячеек.....	36
5.2.2. Регистрация серии вольтамперограмм	37
5.2.1. Контроль вольтамперограммы	39
5.2.2. Разметка вольтамперограмм	39
Раздел 6. Анализ вольтамперограмм.....	45
6.1. Обработка серии вольтамперограмм	45
6.2. Процедура анализа	46
6.3. Определение концентраций по методу стандарта.....	47
6.4. Определение концентрации по методу добавки.....	47
6.5. Расчет концентраций.....	48
6.6. Архив результатов.....	50

Раздел 1. Общие сведения

1.1. Назначение программы

Программа **VALab Professional 2010** (в дальнейшем, программа) функционирует под управлением операционной системы MS Windows 98/NT/XP/Vista и предназначена для совместной работы с вольтамперометрическими анализаторами «ТА» производства фирмы ООО «Техноаналит».

Программа позволяет управлять всеми режимами работы анализатора, обрабатывать полученные вольтамперограммы, проводить расчеты концентраций, документировать и архивировать результаты измерений.

1.2. Требования к аппаратному обеспечению

Для работы программы требуется:




- дисковое пространство не менее 100 Мбайт
- оперативная память.....не менее 256 Мбайт
- процессор Pentium-4 или Athlon, не менее 2 GHz
- разрешение монитора..... не менее 1024×768 точек
- стандартный COM-порт, поддерживающий интерфейс RS-232 или устройство его имитирующее
- привод CD-ROM или DVD-ROM.

1.3. Используемые термины и принятые обозначения

В настоящем описании приняты следующие обозначения и термины:

- Названия меню, подменю и команд, разделенные знаком «→», указывают на последовательность выбора. Например, запись **Архив → Открыть** означает, что нужно выбрать раздел главного меню **Архив**, а в нем пункт **Открыть**.
- Названия отдельных клавиш либо комбинаций клавиш, приводятся в рамке, например **Esc** или **Ctrl + O**. Комбинации, начинающаяся с **Ctrl +**, **Shift +** и **Alt +** предполагают, что вначале должна быть нажата соответствующая служебная клавиша, а затем клавиша, следующая за знаком «+».
- Термины, относящиеся к использованию мыши:
 - **Курсор** — указатель мыши на экране. Вид курсора может меняться в зависимости от ситуации.
 - **Щелкнуть** (нажать) — один раз нажать и отпустить кнопку мыши. Если не оговорено особо, то считается, что это левая кнопка.
 - **Дважды щелкнуть** — быстро выполнить два щелчка. Интервал между щелчками должен быть как можно короче.
 - **Выбрать** — переместить мышь так, чтобы курсор оказался на конкретном элементе, и далее щелкнуть кнопкой мыши.
 - **Перетаскивание** — операция заключается в перемещении мыши с нажатой левой кнопкой. При этом

выбранный объект на экране перемещается синхронно с движением мыши.

Все введенные параметры во всех диалоговых окнах программы считаются принятыми, если в конце диалога была нажата кнопка . Если диалог завершился нажатием кнопки , кнопки  на строке заголовка, или клавишей **Esc**, то введенные параметры программой не принимаются. Надписи на кнопках могут меняться в зависимости от содержимого окна.

Раздел 2. Установка и настройка программы

2.1. Установка и запуск программы

Для установки программы на жесткий диск компьютера (далее, ПК) вставьте диск **Valab** в CD-ROM компьютера. В автоматически всплывшем окне (Рис. 2.1) нажмите на кнопку **Установить программу Valab Professional 2010**, далее следуйте рекомендациям программы установки.

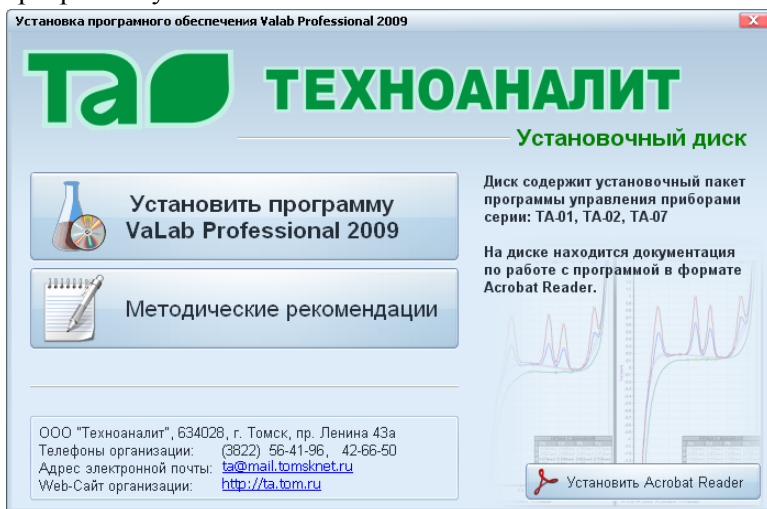


Рис. 2.1. Диалоговое окно установки программы

При помощи окна автозапуска можно также открыть руководство пользователя в формате **Acrobat Reader** и установить программу **Acrobat Reader** а компьютер.

Примечание: если автозапуск отключен, то для установки программы следует выполнить следующие действия: войти в папку **Мой компьютер** → войти в папку CD/DVD привода в который был вставлен диск **Valab** → запустить файл с именем **Run**.

Для запуска **Valab** выберите **Пуск** → **Программы** → **ТЕХНОАНАЛИТ** → **Valab Professional 2010** в главном меню ОС Windows.

Запуск программы можно производить и с помощью ярлыка на рабочем столе Windows (создается автоматически при установке программы).

2.2. Настройка программы

Перед тем, как начать работу, необходимо в программе выбрать тип прибора и порт, через который она будет общаться с прибором.

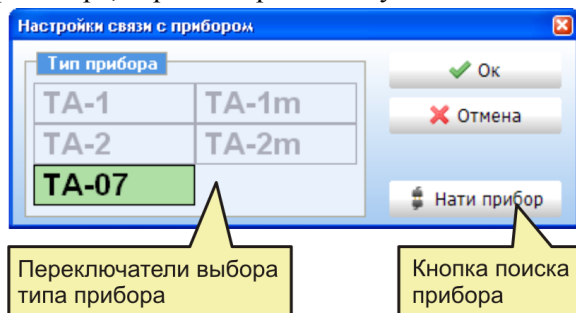


Рис. 2.2. Окно настройки связи с прибором

Для этого, при первом запуске программы:

- откройте окно настроек связи с прибором **Настройки** → **Связь с прибором** (Рис. 2.2);
- слева, в разделе **Тип прибора** выберите подключённый к ПК прибор, щёлкая мышью по области с нужным названием;
- нажмите кнопку **Найти прибор**. Через 3-4 сек, программа отобразит результат поиска: **Прибор найден** либо **Прибор не найден**.
- После успешного поиска нажмите на кнопку **Ок**.

Если прибор не был найден, значит:

- прибор не включён (не горит красная лампочка на панели с кнопками управления крышкой) — включите прибор, либо проверьте исправность шнура питания;
- нет контакта в шнуре COM порта — проверьте разъёмы шнура COM порта на стороне компьютера и прибора.

Если в окне присутствует сообщение об отсутствии свободных COM портов (Рис. 2.3), то работа с прибором будет невозможна.

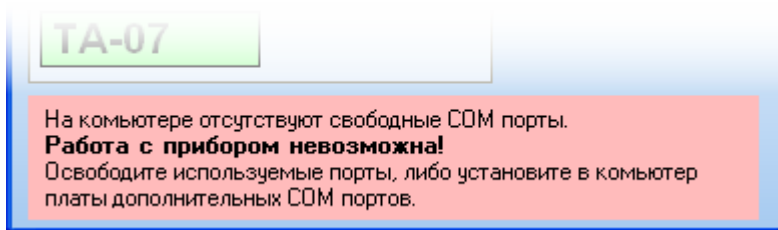


Рис. 2.3. Предупреждение об отсутствии свободных COM портов

В этом случае, следует либо освободить занимаемые порты (если к ним подключены другие устройства), либо укомплектовать ПК платой расширения COM портов.

Примечание: если подряд запустить несколько программ **Valab**, то к прибору подключится та, которая была запущена первой. Все остальные программы не смогут работать с прибором и будут выдавать сообщение либо об отсутствии прибора, либо об отсутствии COM портов.

Раздел 3. Интерфейс программы

3.1. Главное окно

После загрузки программы, окно графического интерфейса выглядит, как показано на Рис. 3.1.

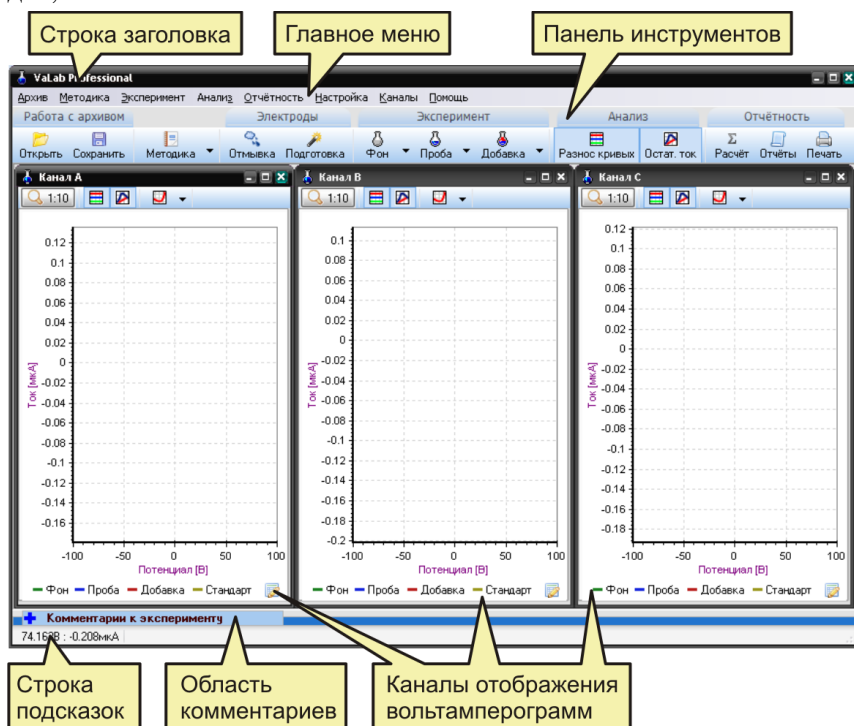


Рис. 3.1. Рабочее окно программы

Строка заголовка — содержит название программы и имя загруженного в программу архива.

Стандартные кнопки управления окном программы, находящиеся в правой части строки заголовка, позволяют изменять режим ото-

бражения окна: свернуть окно, развернуть окно на полный экран или сформировать окно произвольных размеров. За строку заголовка можно перемещать окно программы в случае, когда выбран не полноэкранный режим отображения.

Строка подсказок — текстовая строка, информирующая оператора о возможных действиях при совместном использовании клавиатуры и кнопок мыши. Содержание строки зависит от местоположения курсора мыши и от выполняемого программой процесса.

Область комментариев — область, позволяющая вводить многострочные комментарии к текущему эксперименту (Рис. 3.2). Скрывать/открывать область следует щелчком мыши по её заголовку.

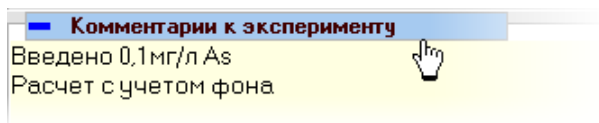


Рис. 3.2. Пример раскрытой области ввода комментария к эксперименту

Остальные элементы главного окна будут рассмотрены ниже, более подробно.

3.2. Главное меню

Главное меню — это набор команд (пунктов меню, элементов меню), разбитых на тематические разделы и подразделы. Если щелкнуть по разделу/подразделу меню, то развернется список команд или откроется ещё один подраздел (Рис. 3.3).

Пункты меню, кроме текстовых надписей могут содержать пиктограммы (картинки, условно изображающие смысл пункта). Если пункт меню имеет горячую клавишу, то она отобразится справа от названия пункта. Черный цвет шрифта в списке элементов меню означает, что пункт меню доступен, серые буквы и серые пиктограммы — элемент в данный момент недоступен.

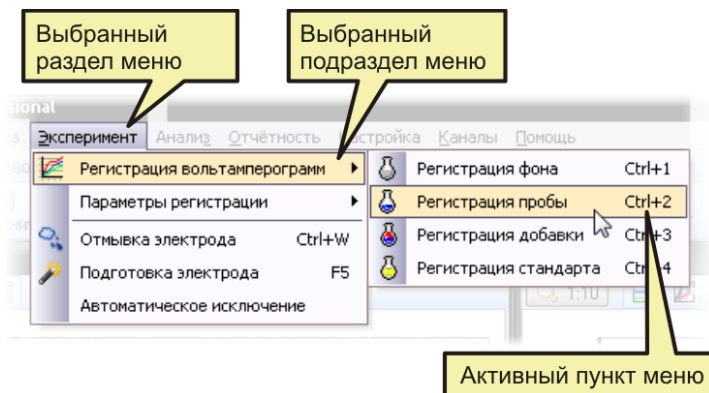


Рис. 3.3. Элементы главного меню

Некоторые пункты меню обозначают переключатели каких либо опций, которые могут быть только в двух состояниях вкл. или выкл. Включенный пункт меню подсвечивается зелёной рамкой (Рис. 3.4).

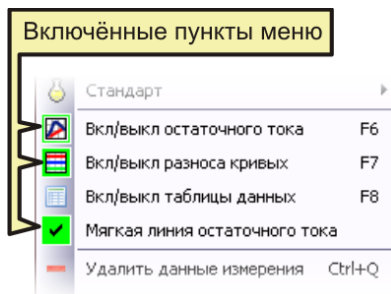


Рис. 3.4. Вкл/выкл пункты главного меню

3.3. Панель инструментов

Панель инструментов — это набор кнопок с названиями и пиктограммами, дублирующих некоторые пункты главного меню (Рис. 3.5). Предназначены они для более быстрого выбора нужных команд в процессе работы с программой.

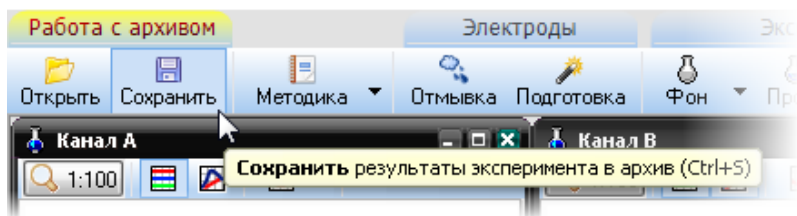


Рис. 3.5. Панель инструментов

Над кнопками имеется текстовая область, которая показывает, функции какой категории они выполняют. При наведении курсора на кнопку, текстовая область подсвечивается.

Каждая кнопка имеет всплывающую подсказку, которая появляется после удержания указателя мыши над кнопкой более 1 секунды.

Часть кнопок имеет дополнительное меню (кнопки, имеющие справа расширение в виде маленького треугольника).

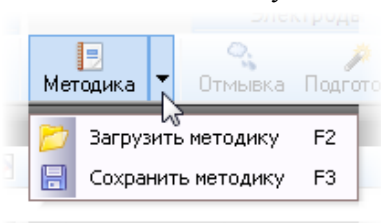


Рис. 3.6. Меню у кнопки инструментальной панели

При нажатии на левую (большую) область кнопки выполняется соответствующая команда, а при нажатии на область содержащую треугольник, открывается дополнительное меню (Рис. 3.6).

Функции этого меню функционально связаны с кнопкой инструментальной панели.

3.4. Каналы отображения

Каналы отображения — это три идентичных области отображения информации, соответствующие трем измерительным каналам анализатора. Каналы отображения служат для вывода и обработки графической или текстовой информации, полученной в процессе анализа.

Каждый канал является самостоятельным окном, с которым можно выполнять все стандартные действия, характерные для окон ОС Windows (свернуть, изменить место положение и размер).

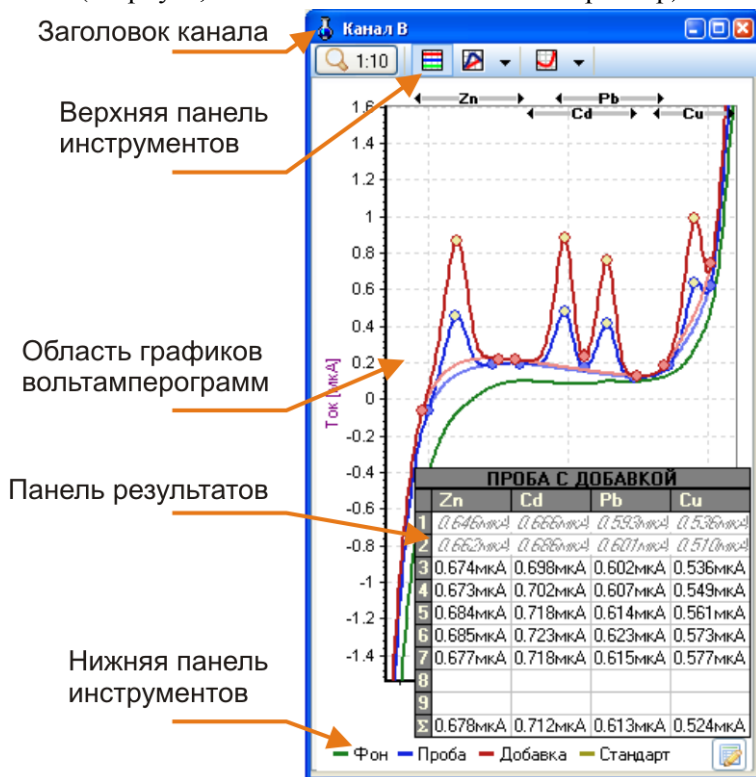







Рис. 3.7. Канал отображения

Элементы окна канала показаны на Рис. 3.7. Строка заголовка содержит имя канала и стандартные кнопки управления окном канала. Область графиков вольтамперограмм показывает все снятые кривые для фона, пробы, пробы с добавкой (или просто, добавка) либо стандарта, помечая каждую кривую цветом.

На верхней инструментальной панели расположены:

- Кнопка  для выбора масштаба оси тока. Она позволяет установить масштаб вывода вольтамперограмм в шкале токов от **1:1** до **1:100**. Режим **Авто** выбирает масштаб так, что бы все графики были видимы.
- Кнопка  необходима для разности вольтамперограмм. Она позволяет смещать кривые в серии по оси тока. Действует только для активного канала.
- Кнопки  /  отображают режим аппроксимации кривой остаточного тока: линейная либо «мягкая».
- Кнопка  позволяет отображать/скрывать кривые остаточного тока индивидуально для каждой вольтамперограммы (Рис. 3.8).

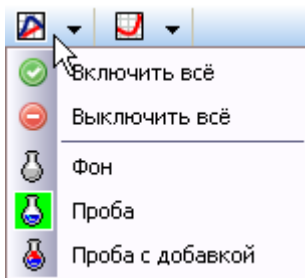



Рис. 3.8. Меню вкл/выкл. остаточного тока

Показывать / скрывать остаточный ток, также можно щёлчком мыши по вольтамперограмме с зажатой клавишей **Alt**.

На нижней инструментальной панели расположены:

- Кнопка  включения / выключения режима отображения панели результатов (Рис. 3.7).

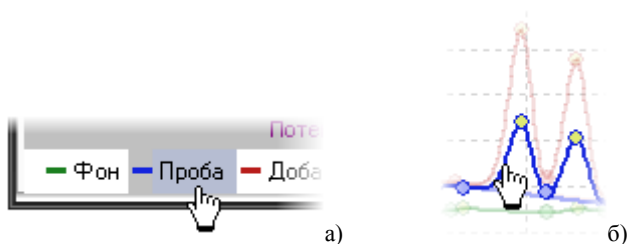


Рис. 3.9. Способы выделения кривой в канале

- Кнопки выделения кривой, для ручной разметки границ её пика (Рис. 3.9а). Подробно о разметке кривой читайте в разделе 5.2.2 «Разметка вольтамперограмм». Выделить кривую можно также щёлкнув по ней кнопкой мыши (Рис. 3.9б).

После выделения кривой, задний фон графика окрашивается в серый цвет. В тот же цвет окрашивается и кнопка выделения кривой (Рис. 3.10). Невыделенные вольтамперограммы становятся полупрозрачными.

Для выхода из режима ручной разметки щёлкните по активной кнопке выделения, либо по активной кривой, либо по кнопке **Обычный режим** в верхней панели инструментов.

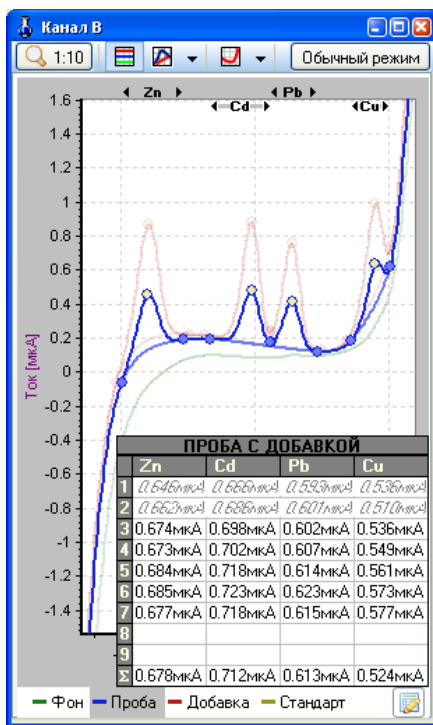



Рис. 3.10. Выделенная кривая в канале

Раздел 4. Разделы главного меню программы


4.1. Архив

Пункты раздела главного меню **Архив** предназначен для сохранения полученных результатов анализа и просмотра сохраненных результатов анализа.


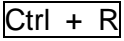
Раздел состоит из следующих пунктов:

 **Открыть** Ctrl + O — загружает имеющийся результат измерения. Результат хранится в файле с расширением **.dat**. Команда запускает стандартный диалог открытия файлов ОС Windows, в котором нужно указать местонахождение архивного файла. По умолчанию, при первом запуске, программа предлагает выбрать архивные файлы из папки **Архив**. При последующих открытиях автоматически выбирается последний указанный путь.

После загрузки с архивными данными можно работать точно также, как и с измеренными. Текущая методика, параметры серий, маркеры каналов и т.д. будут замещены архивными данными. Название архивного файла будет выведено в заголовок программы.



 **Сохранить** Ctrl + S — сохраняет текущий результат измерения. Команда запускает стандартный диалог сохранения файлов ОС Windows, в котором нужно указать расположение архивного файла и его имя. По умолчанию, при первом запуске, новый архивный файл сохранится в папку **Архив**. При последующих сохранениях автоматически выбирается последний указанный путь.



Если в текущем результате измерения отсутствуют комментарии (см. подраздел 3.1. «Главное окно»), то вначале программа выдаст предупреждение об их отсутствии.



 **Восстановить исходные**  **Ctrl + R** — выгружает текущие данные измерения и открывает окно программы, предшествующее открытию архива. Команда не активна, если не загружен архив.

4.2. Методика

Этот раздел меню определяет процедуру проведения анализа. Раздел состоит из следующих пунктов:

 **Загрузить методику**  **F2** — загружает методику с уже установленными параметрами, посредством стандартного диалога открытия файлов ОС Windows. По умолчанию программа предлагает выбрать файлы из папки **Методики**. Файла методики имеет расширение **.mtd**.

 **Сохранить методику**  **F3** — сохраняет текущую методику посредством стандартного диалога сохранения файлов ОС Windows. По умолчанию программа предлагает сохранить файлы методов в папку **Методики**.

 **Текущая методика**  **F4** — набор параметров, в соответствии с которыми анализатор выполняет процедуру измерения. Эти параметры определяют измерительный диапазон прибора, количество повторов в сериях, процедуру предварительной обработки вольт-амперограмм, названия и приблизительные электрохимические потенциалы определяемых элементов, подготовительные стадии, параметры разверток поляризующего напряжения и так далее.

Параметры методики, ввиду их большого количества, разбиты на три большие категории и расположены на трёх закладках диалого-

вого окна (Рис. 4.1). Доступ к требуемой группе можно получить, выбрав соответствующую закладку в верхней части окна.

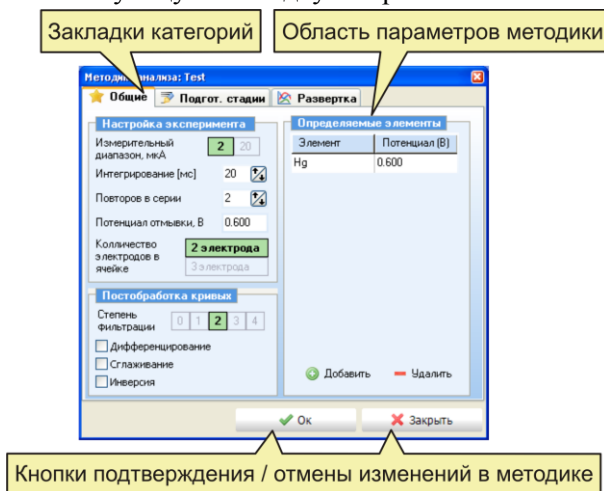
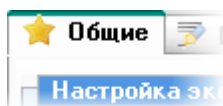


Рис. 4.1. Окно методики эксперимента

Закладка Общие



В закладке **Общие** находятся параметры установок режимов работы прибора и предварительной обработки вольтамперограмм. Закладка разделена на три раздела (Рис. 4.2).

.....Настройка эксперимента

Содержит параметры влияющие на вид получаемых от прибора вольтамперограмм.

Измерительный диапазон – позволяет выбрать шкалу чувствительности измерительных преобразователей анализатора, и, соответственно, диапазон измеряемых токов.

Интегрирование — позволяет установить длительность интегрирования измеряемого тока в диапазоне от 1 до 100 мс. При этом

измерительный диапазон тока корректируется в соответствии с установленным временем интегрирования.

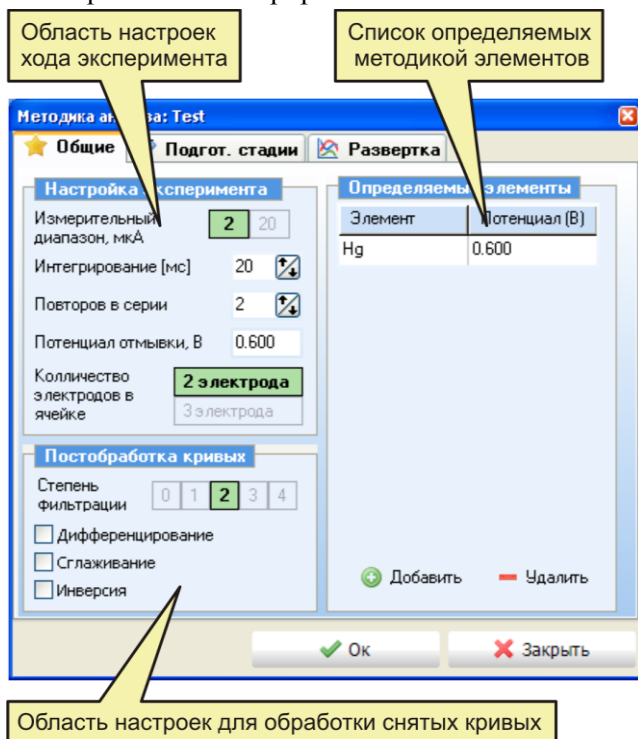


Рис. 4.2. Окно методики эксперимента, закладка **Общие**

Повторов серии — указывает, сколько раз следует повторить одну и ту же регистрацию, для получения серии вольтамперограмм. Максимальное число вольтамперограмм в серии — 9.

Потенциал отмывки — задается потенциал, подаваемый на рабочий электрод при отмывке ячейки.

Вспомогательный электрод — включает/ выключает режим работы с 3-х электродной ячейкой.

.....Постобработка кривых

Содержит параметры, с помощью которых выбираются способы обработки полученных от прибора кривых.

Степень фильтрации — позволяет выбрать степень фильтрации измеряемого сигнала в процессе измерения. Чем выше порядковый номер, тем выше степень фильтрации. При значении **0** фильтрация сигнала не происходит.





Дифференцирование — включает/выключает режим получения производной от вольтамперограммы.

Сглаживание — включает/выключает режим сглаживания после регистрации вольтамперограммы. Эту процедуру рекомендуется использовать в случае применения дифференцирования.

Инверсия — включает/выключает режим зеркального отображения вольтамперограмм относительно оси потенциала.

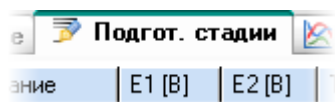
.....Список элементов

Содержит названия и приблизительные электрохимические потенциалы определяемых элементов. Программа позволяет одновременно идентифицировать до шести пиков элементов.

Добавить — кнопка, предназначенная для добавления новой строки в список определяемых элементов. При нажатии на кнопку, новая строка добавляется в следующую позицию после строки, на которой установлен курсор. В новой строке нужно ввести название определяемого элемента и приблизительный потенциал его пика. Перемещение курсора по таблице элементов можно осуществлять с помощью мышки, или с помощью клавиш перемещения курсора , ,  и .

Удалить — кнопка, предназначенная для удаления строки с параметрами определяемого элемента. При нажатии на кнопку удаляется строка, на которой установлен курсор.

Закладка Подготовительные стадии



В этой группе определяются параметры подготовительных стадий, которые выполняются перед измерением, то есть перед разверткой поляризирующего напряжения. Каждой подготовительной стадии соответствует строка таблицы (Рис. 4.3). Программа позволяет использовать до восьми подготовительных стадий.

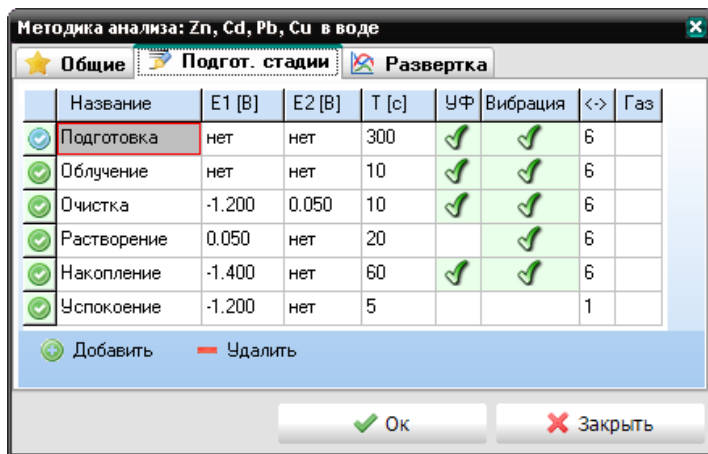




Рис. 4.3. Окно методики эксперимента, закладка **Подготовительные стадии**

Каждая подготовительная стадия характеризуется следующими параметрами:

Режим выполнения (первый столбец) — определяет, в каком из трех возможных режимов определена стадия в методике. Признак режима выполнения для каждой стадии находится в крайней левой колонке таблицы. Если стадия **не выполняется**, то признак имеет вид , если стадия **выполняется** **всегда**, то  (зеленый), если ста-

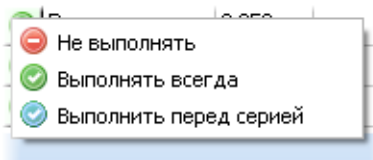




Рис. 4.4. Режимы выполнения

дия должна **выполняться перед серией**, то есть один раз перед первым измерением в серии, то признак имеет вид  (голубой). Выбор режима (выполнять / не выполнять) осуществляется щелчком левой кнопки мыши по признаку соответствующей стадии. Если щелкнуть по признаку правой кнопкой, то из раскрывшегося меню можно выбрать требуемый режим выполнения (Рис. 4.4).

Название — имя стадии, которое должно отражать физический смысл подготовительной стадии.

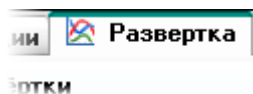
E1[V] и **E2[V]** — потенциалы, поочередно подаваемые на рабочий электрод с частотой 1 Гц. Если для определенной стадии требуется только один потенциал, то следует соответствующую ячейку в колонке **E2[V]** оставить пустой. Программа автоматически поставит туда комментарий **нет**. Возможный диапазон потенциалов составляет от -3.0 до 3.0 Вольт, это определяется техническими возможностями анализатора.

T[s] — длительность выполнения стадии. Для каждой стадии может быть задана в диапазоне от 1 до 999 секунд, это определяется техническими возможностями анализатора. Если задать длительность равной нулю, то стадия выполняться не будет.

УФ, Вибрация, Газ — определяет вкл/выкл. УФ лампы, электродного вибратора и клапана подачи газа соответственно с помощью наличия или отсутствия маркера  в соответствующей колонке таблицы.



Кнопки **Добавить** и **Удалить** снизу таблицы, предназначены для добавления новой стадии в список, либо для удаления стадии на которой находится курсор.

Закладка Развертка



Эта группа параметров служит для задания характеристик развертки поляризирующего напряжения (Рис. 4.5).

Развертка потенциала поляризирующего напряжения может иметь до четырёх отдельных участков, выполняемых последовательно (составная развёртка). Количество участков определяется состоянием кнопок переключения отрезков развертки. Если кнопка находится в нажатом состоянии, то в диалоговом окне будут отображаться параметры развертки выбранного участка, которые можно редактировать (область **Форма и параметры развёртки**).

Для вкл/выкл. выполнения части составной развертки нужно вначале нажать на кнопку, определяющую нужный участок развертки, а затем, следующими нажатиями мыши, изменять её признак выполнения (вкл. —  либо выкл. — .

Использование составной развертки при определении нескольких элементов одновременно позволяет проводить анализ каждого отдельного элемента в оптимальных условиях измерения.

Каждый отрезок характеризуется формой развертки поляризирующего напряжения с соответствующим набором параметров и паузой после развертки.

Форма и параметры развертки — фиксированный список возможных форм разверток потенциала поляризирующего напряжения. Программа реализует четыре формы развертки: постоянно-токовая, ступенчатая, дифференциально-импульсная и квадратно-волновая. Каждая форма характеризуется набором индивидуальных параметров, которые могут меняться в определенных диапазонах.

Описание различных форм разверток поляризирующего напряжения и ограничения, накладываемые на значения параметров, приведены

в руководстве по эксплуатации анализатора. При задании недопустимых значений параметров программа выдаст соответствующее сообщение.

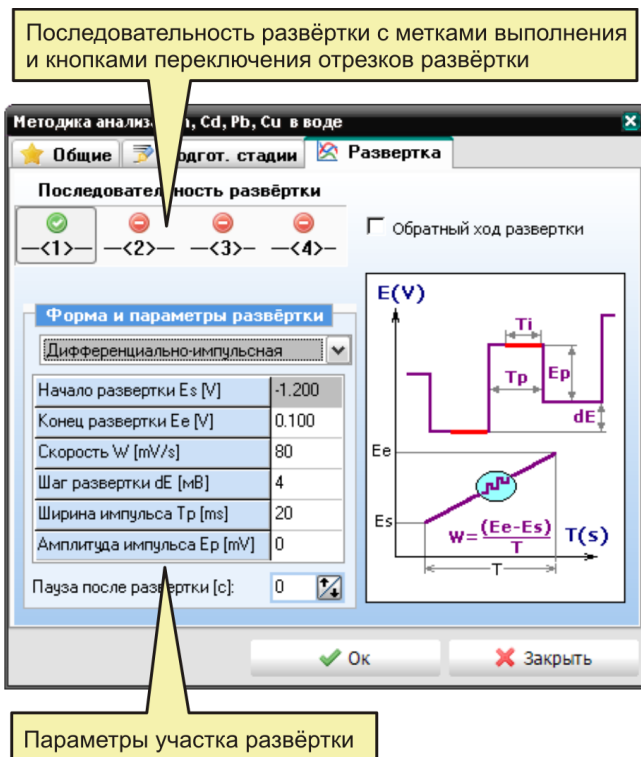



Рис. 4.5. Окно методики эксперимента, закладка **Развёртка**

Пауза после развертки [c] — позволяет задерживать потенциал конца развертки на заданное время и снять зависимость сигнала от времени, а не от потенциала.

Обратный ход развертки — включает/выключает режим, при котором снимаются циклические вольтамперограммы, причем при обратном ходе будет выполняться такая же составная развертка, только отрезки будут следовать в обратном порядке.

4.3. Эксперимент

Этот раздел меню определяет набор действий для оптимальной регистрации вольтамперограмм. Раздел состоит из следующих пунктов:

 **Отмывка ячеек** **Ctrl+W** — производится отмывка всех ячеек с целью уменьшения влияния возможных загрязнений стаканчика и электродов на результат анализа. Отмывка ячеек начинается сразу после команды отмывки. Окно отмывки показано на Рис. 4.6.

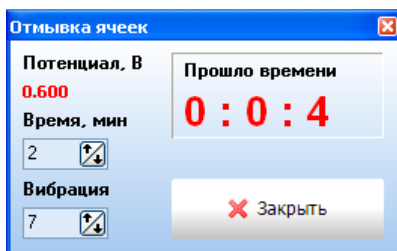



Рис. 4.6. Окно отмывки ячеек анализатора

Потенциал который подаётся на электроды задаётся в методике эксперимента (Вкладка **Общие**, пункт **Потенциал отмывки**).

В окне **Отмывка** ячеек можно задать время отмывки и уровень вибрации, при котором будет происходить отмывка.

Отменить отмывку и закрыть окно можно кнопкой **Закреть** либо клавишей **Esc**.

 **Подготовка электрода** **F5** — производит процедуру нанесения пленки ртути или золота на рабочий электрод в режиме заданного тока. При выборе этой команды открывается диалоговое окно для выбора параметров нанесения пленки ртути (Рис. 4.7).

Для установки параметров подготовки необходимо выбрать канал, в котором будет происходить накопление, задать величину тока и продолжительность процесса, а также указать, нужно или нет

включать перемешивание при накоплении. Для включения перемешивания нужно поставить галочку в пункте **Вибрация**. Значения указанных параметров нужно устанавливать согласно прописи методики КХА.

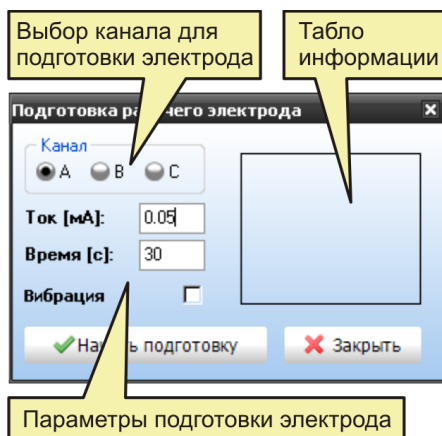





Рис. 4.7. Окно подготовки рабочего электрода


Для начала процедуры необходимо установить ячейку с раствором в выбранный канал и нажать кнопку **Начать подготовку**. Информация о течении процесса будет выводиться на табло информации. По окончании процедуры нужно нажать кнопку **Прекратить подготовку**.


Автоматическое исключение — включает/выключает алгоритм автоматического исключения вольтамперограмм в процессе измерения.

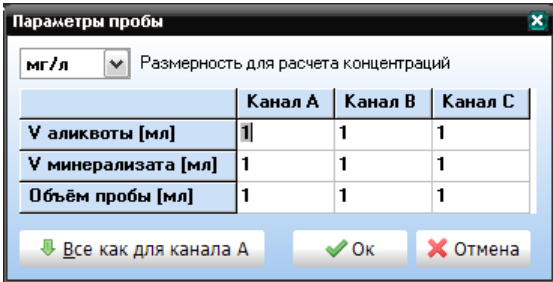
 **Регистрация вольтамперограмм** — подраздел, включающий пункты регистрации вольтамперограмм по заложенной методике:

 **Регистрация фона** Ctrl+1 — регистрирует фоновую кривую.

 **Регистрация пробы** **Ctrl+2** — регистрирует кривую пробы с предварительным заполнением параметров (см. ниже).

 **Регистрация добавки** **Ctrl+3** — регистрирует кривую пробы с добавкой, с предварительным заполнением параметров (см. ниже).

 **Регистрация стандарта** **Ctrl+4** — регистрирует кривую стандарта с предварительным заполнением параметров (см. ниже).



Параметры пробы


mg/l Размерность для расчета концентраций

	Канал А	Канал В	Канал С
V аликвоты [мл]	1	1	1
V минерализата [мл]	1	1	1
Объем пробы [мл]	1	1	1


↓ Все как для канала А ✓ Ок ✗ Отмена

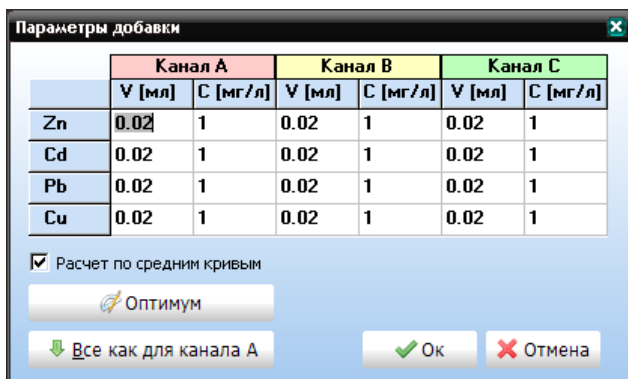
Рис. 4.8. Окно **Параметры пробы**

Параметры регистрации — содержит команды, связанные с установками параметров пробы, добавки и стандарта.

 **Параметры пробы** — открывает диалоговое окно (Рис. 4.8), в котором устанавливаются:


- **Размерность для расчета концентраций.** Этот параметр выбирается, исходя из характера анализируемой пробы (вода, твердые продукты и так далее);
- Объем аликвоты для каждого канала;
- Объем минерализата для каждого канала;
- Масса навески для каждого канала.
- Кнопка **Всё как для канала А** позволяет скопировать в каналы **В** и **С** параметры, установленные для канала **А**.


 **Параметры добавки** — открывает диалоговое окно (Рис. 4.9), в котором устанавливаются объем и концентрация добавки для каждого определяемого элемента и каждого канала.



	Канал А		Канал В		Канал С	
	V [мл]	C [мг/л]	V [мл]	C [мг/л]	V [мл]	C [мг/л]
Zn	0.02	1	0.02	1	0.02	1
Cd	0.02	1	0.02	1	0.02	1
Pb	0.02	1	0.02	1	0.02	1
Cu	0.02	1	0.02	1	0.02	1

☒ Расчет по средним кривым

 Оптимум

 Все как для канала А




 Ок  Отмена

Рис. 4.9. Окно **Параметры Добавки**

При нажатии на кнопку **Оптимум** программа рекомендует параметры добавок, исходя из значений высот пиков пробы и времени накопления определяемого элемента.

 **Параметры стандарта** — открывает диалоговое окно (Рис. 4.10), в котором устанавливаются параметры используемого стандарта для каждого определяемого элемента и каждого канала.



	Канал А	Канал В	Канал С
V стандарта [мл]	0.02	0.02	0.02
Zn C [мг/л] -	1	1	1
Cd C [мг/л] -	2	2	2
Pb C [мг/л] -	3	3	3
Cu C [мг/л] -	4	4	4

 Все как для канала А


 Ок  Отмена


Рис. 4.10. Окно **Параметры Стандарта**

4.4. Анализ


Этот раздел меню определяет набор действий над уже снятыми вольтамперограммами. Он состоит из следующих пунктов:


 **Вкл/выкл остаточного тока** **F6** — позволяет отображать/скрывать кривые остаточного тока для всех каналов.

 **Вкл/выкл разноса кривых** **F7** — вкл/выкл. режима смещения кривых в сериях по оси тока для всех каналов.





 **Вкл/выкл остаточного тока** **F8** — вкл/выкл. режима отображения панели результатов для всех каналов.


Мягкая линия остаточного тока — изменяет режим аппроксимации кривой остаточного тока (линейная либо «мягкая») для всех каналов.

 **Удалить данные измерения** **Ctrl+Q** — удаляет данные измерения из всех каналов (файл архива остаётся нетронутым).

 **Копирование маркеров** **Ctrl+A** — Копирует разметку пиков из текущего канала, в остальные два.

Фон как проба **F12** — выставляет потенциал маркера пика фоновой кривой такой же, как у кривой пробы.

Подразделы  **Фон**,  **Проба**,  **Добавка** и  **Стандарт**, раздела **Анализ** имеют следующие пункты:

- **Усреднение** — усредняет серию кривых, либо показывает серию исходных кривых.
- **Скрыть** — скрывает/показывает среднюю кривую либо серию кривых.
-  **Скопировать среднюю в буфер** — копирует среднюю кривую в буфер обмена. Скопированные данных со-

стоят из двух столбцов: значения потенциалов и значения токов.

4.5. Отчётность

Этот раздел меню определяет набор действий над снятыми и уже размеченными вольтамперограммами. Он состоит из следующих пунктов:

Σ Расчёт концентрации **F9** — открывает окно для расчета концентраций определяемых элементов по результатам проведенных измерений (Рис. 4.11). Результаты расчётов отображаются в таблице.

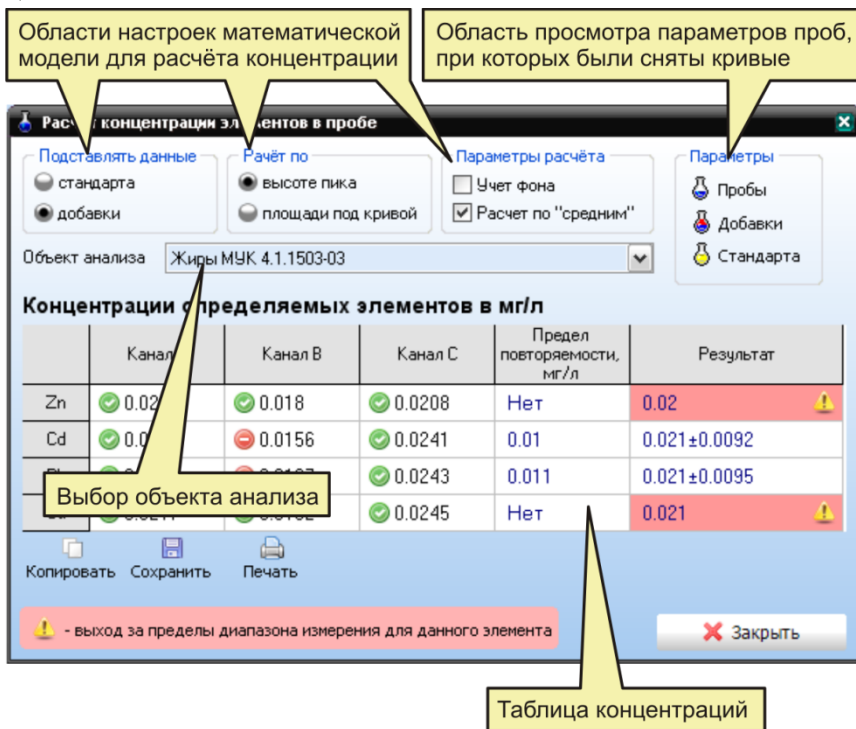


Рис. 4.11. Калькулятор концентраций

Если активен пункт **Расчёт по высоте пика**, расчеты выполняются исходя из измеренной высоты пиков. При активном пункте **Расчёт по площади под кривой** расчёт производится исходя из площади измеренных пиков.

В случае, если измерения проводились и по методу добавок, и по методу стандарта, предоставляется возможность посмотреть концентрации определяемых элементов, измеренные по методу сравнения со стандартным образцом, или по методу добавки (активен пункт **Подставлять данные стандарта** либо **Подставлять данные добавки**).

Расчеты будут выполнены с учетом фона, если включен пункт **Учет фона**. Если включен пункт **Расчет по «средним»**, расчеты концентраций выполняются исходя из полученных средних кривых.

При помощи кнопок в области **Параметры** можно вызвать окна параметров, при которых были сняты кривые.

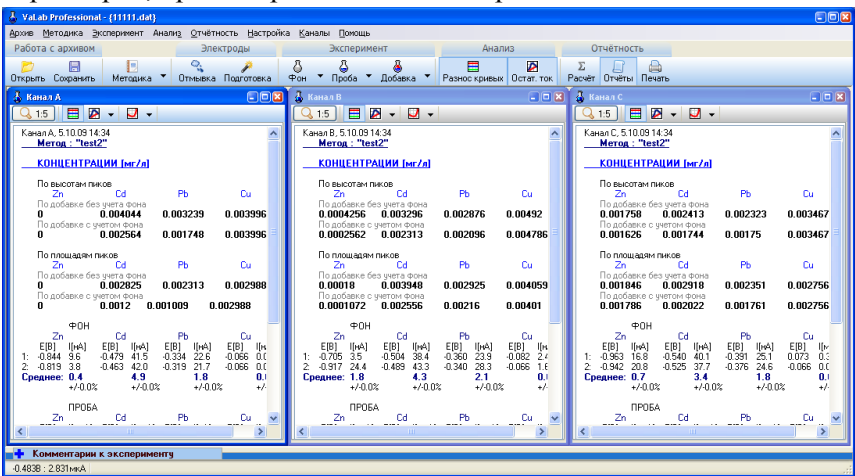





Рис. 4.12. Отчёт по измерениям


Слева от значений концентраций для каналов расположен признак, определяющий участие данного значения в формировании средне-

го значения концентраций и отклонений. Изменить состояние этого признака можно щелчком левой кнопки мыши по ячейке, в которой он расположен (пиктограмма  либо ). Таким образом, можно исключить «выпавшие» значения.

В ниспадающем списке **Объект анализа** можно выбрать нормативный документ, согласно которому проводился анализ. Программа автоматически исключит значение концентрации, не удовлетворяющее условию повторяемости, рассчитает предел повторяемости и погрешность анализа.

В случаях, когда концентрации элемента выходят за границы диапазона, или разброс между результатами (показатель повторяемости) выше указанных в нормативном документе, программа выдает предупреждение.

 **Отчеты** **F10** — команда формирует отчет о проведенных измерениях для всех каналов. Отчёты заменяют графики вольтамперограмм (Рис. 4.12). Для возврата к графикам, следует выполнить команду **Отчёты** ещё раз.

 **Печать** **Ctrl+P** — команда открывает окно печати результатов измерения и анализа (Рис. 4.13). В таблице, галочками ставятся те пункты, которые следует послать на печать. Пропорции графиков относительно печатного листа, показаны в нижней части окна. Масштаб вывода графиков можно уменьшить, установив переключатель **Печать в миниатюрах**.

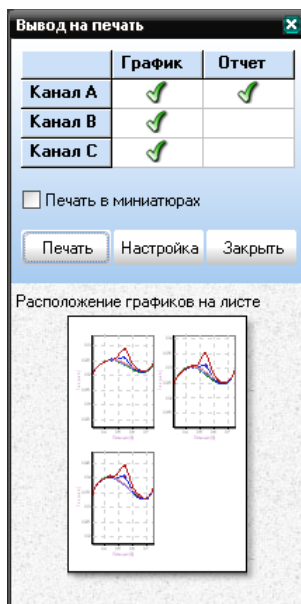



Рис. 4.13. Диалоговое окно **Вывод на печать**

Кнопка **Печать** запускает процесс печати с текущими настройками.

Кнопка **Настройка** открывает стандартное окно ОС Windows настройки параметров печати, где можно выбрать принтер из списка подключенных к ПК и установить его параметры в соответствии с требованием к печати.

4.6. Настройка

Пункт меню **Настройка** содержит команды, связанные с глобальными установками программы.

 **Связь с прибором** — позволяет установить тип используемого с программой прибора и обнаружить последовательный порт компьютера, к которому подключен прибор (см. подраздел 2.2. «Настройка программы»)

Если во время анализа связь с прибором пропала, то программа выдаст сообщение **Нет ответа от прибора** (Рис. 4.14).

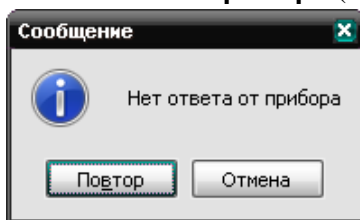



Рис. 4.14. Сообщение об отсутствии связи с прибором

В этом случае следует убедиться в том, что прибор включён, а также в наличии физического соединения между прибором и компьютером.

Нажатие кнопки **Повтор** приведёт к попытке программы повторить последнее действие, на котором произошёл сбой. Кнопка **Отмена** прерывает эксперимент. Если сообщение появилось повтор-

но, то следует выкл/вкл прибор и закрыть/запустить программу **VaLab Professional 2010** повторно.

 **Цвета кривых** — позволяет выбрать предпочтительную гамму цветов для разных типов графиков. Окно выбора цвета показано на (Рис. 4.15).

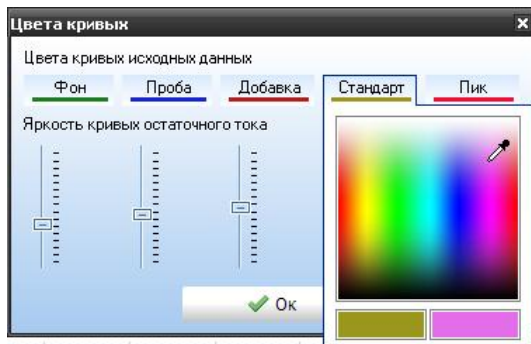



Рис. 4.15. Настройка цветов кривых

Область **Яркость кривых остаточного тока** определяет степень яркости остаточного тока, относительно яркости кривых исходных либо усреднённых данных.

 **Настройка печати** — открывает диалоговое окно, настройки принтеров ОС MS Windows.

4.7. Каналы

Этот раздел меню предназначен для манипуляции каналами отображения. С помощью его команд можно спрятать любой из каналов, сложит каналы вертикально либо горизонтально.

Раздел 5. Порядок работы

5.1. Подготовка к анализу

Процедура подготовки к анализу включает в себя настройку программы и подготовку прибора и электродов.

Описания подготовки к анализу для определения концентраций конкретных элементов в конкретных объектах приведены в прописях методик КХА.

5.1.1. Настройка программы

После включения анализатора и запуска программы (см. Раздел 2. «Установка и настройка программы») необходимо убедиться, что верно установлен тип прибора и программа нашла прибор.

Далее, с помощью команды **Методика** → **Загрузить методику** **F2** загрузить нужную методику, например «Тяжелые металлы в воде». Если необходимая методика отсутствует в прилагаемом с программой комплекте, её необходимо создать. Для этого нужно вызвать с помощью команды **Методика** → **Текущая методика** **F2** окно с параметрами текущего метода и отредактировать их в соответствии с прописью методики КХА. Для использования в последующем вновь созданного метода его нужно сохранить с помощью команды **Методика** → **Сохранить методику** **F3**

Теперь программа готова к выполнению измерения.

5.1.2. Подготовка прибора и электродов

Перед началом работы необходимо убедиться, что подключение прибора к компьютеру выполнено в соответствии с требованиями «Руководства по эксплуатации»

Электроды нужно обработать в соответствии с прописью методики КХА.

Если требуется нанести рабочее вещество (Hg или Au) на рабочий электрод в режиме заданного тока, нужно установить в ячейку с раствором, из которого будет осуществляться электролиз, в любой канал анализатора и выполнить команду главного меню **Подготовка электрода** (см. подраздел 4.3. «Эксперимент», пункт **Подготовка электрода**).

В появившемся окне установить канал, в котором будет проводиться электролиз, величину тока и продолжительность процесса согласно прописи методики КХА. Запустить процесс электролиза, нажав кнопку **Начать подготовку**. Информация о течении процесса будет выводиться на табло информации. По окончании нажать кнопку **Заккрыть**. Рабочий электрод сполоснуть бидистиллированной водой.

5.2. Проведение измерения

Процедура выполнения измерений состоит из последовательности операций, в результате выполнения которых определяются концентрации примесей в пробе.

5.2.1. Отмывка ячеек

Перед каждым новым измерением (с уже подготовленными электродами) рекомендуется проводить отмывку ячеек (см. подраздел 4.3. «Эксперимент», пункт **Отмывка ячеек**).

Рекомендуемые параметры отмывки: время отмывки — 2 мин, уровень вибрации — 6 единиц.

5.2.2. Регистрация серии вольтамперограмм

Программа позволяет проводить съемку до 9-ти вольтамперограмм в любой из 4-х серий: **фон**, **проба**, **проба с добавкой** или **стандарт**. Количество кривых в сериях задается в текущем методе.

Для регистрации серии вольтамперограмм нужно выбрать команду меню **Эксперимент** → **Регистрация вольтамперограмм** → **Фон (Проба, Проба с добавкой или Стандарт)**, либо воспользоваться кнопками инструментальной панели, либо горячими клавишами (см. подраздел 4.3. «Эксперимент», пункт **Регистрация вольтамперограмм**).

Каждой серии, за исключением фона, соответствует группа специфических параметров, которые следует ввести в появившееся окно. После ввода параметров нужно нажать кнопку **Ок** и анализатор начнет измерение в соответствии с текущим методом (см. подраздел 4.3. «Эксперимент», пункт **Параметры регистрации**).

С началом измерения, в правом верхнем углу экрана появится индикатор выполнения измерения (Рис. 5.1).

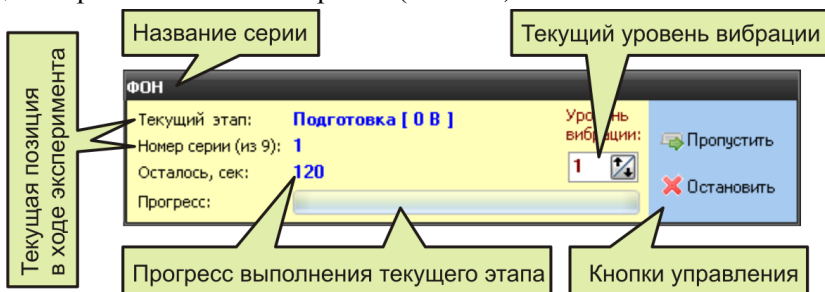





Рис. 5.1. Индикатор выполнения измерения

В нём отображается название серии, текущая позиция этапа методики и прогресс выполнения текущего этапа методики.

Параллельно ходу эксперимента можно изменять уровень вибрации при помощи стрелочек в области ввода **Уровень вибрации**. Кнопка **Пропустить** позволяет завершить выполнение текущей стадии раньше времени и перейти к следующей, а кнопка **Остановить** прекращает измерение. Прервать съемку можно также нажатием клавиши Esc.

После проведения всех подготовительных стадий, определенных в текущем методе, анализатор выполнит развертку. В процессе её выполнения в окна каналов выводятся вольтамперограммы.

Процесс регистрации повторяется столько раз, сколько задано в параметре **Повторов в серии** текущего метода, с той лишь разницей, что в первый раз выполняются все стадии, отмеченные признаками  **Выполнять всегда** и  **Выполнить перед серией**, а при последующих измерениях — только стадии с признаком  **Выполнять всегда** (см. подраздел 4.2 «Методика», пункт **Закладка Подготовительные стадии**).

Если кнопка **Разнос** на панели инструментов находится в нажатом состоянии, то каждая последующая кривая будет смещаться вниз по оси тока.

После выполнения заданного количества циклов измерений индикатор (Рис. 5.1) будет убран с экрана.


Если в данном канале включен режим автоматического исключения вольтамперограмм, то после регистрации очередной кривой программа автоматически исключает неудовлетворительные вольтамперограммы из серии

Примечание: правильность автоматического исключения вольтамперограмм должно контролироваться пользователем.

5.2.1. Контроль вольтамперограммы

Для более удобного визуального контроля можно перемещать вольтамперограммы в окне отображения. Для этого нужно переместить указатель мыши в область окна отображения вольтамперограмм и, удерживая нажатой правую кнопку, передвигать курсор мыши вверх или вниз. Кривые вместе с осью тока будут перемещаться синхронно с курсором. Также, перемещение вольтамперограмм можно осуществлять с помощью вращения колесика мыши.

В случае необходимости более детального контроля отдельного участка вольтамперограмм, можно его увеличить. Для этого нужно поместить курсор мыши в точку, которая будет левым верхним углом увеличенной области и, нажав и удерживая левую кнопку мыши, перемещать указатель в правый нижний угол предполагаемой вырезки. Прямоугольная рамка, образованная перемещением курсора обозначает выбранную область увеличения. После отпускания кнопки в окне будет представлен увеличенный участок графика. Вернуть первоначальный вид графика можно, выделив подобным образом любую область окна отображения, только передвигая указатель мыши влево–вверх.

Если после регистрации в окне отображения вольтамперограммы не видны и не удастся переместить их в область с помощью мыши, то найти кривые поможет команда **Авто**, которая находится в раскрывающемся списке, при нажатии кнопки  1:10 на инструментальной панели каждого канала отображения.

5.2.2. Разметка вольтамперограмм

Аналитическими сигналами в инверсионной вольтамперометрии являются пики, которые расположены на фоне остаточного тока. Потенциал максимума пика определяет природу вещества, а значения высоты и площади пика прямопропорциональны его концен-

трации. Следовательно, что бы определить концентрацию элемента, необходимо измерить высоту или площадь пика определяемого элемента. На Рис. 5.2 показана вольтамперограмма с пиками элементов: **Zn**, **Cd**, **Pb**, **Cu**.

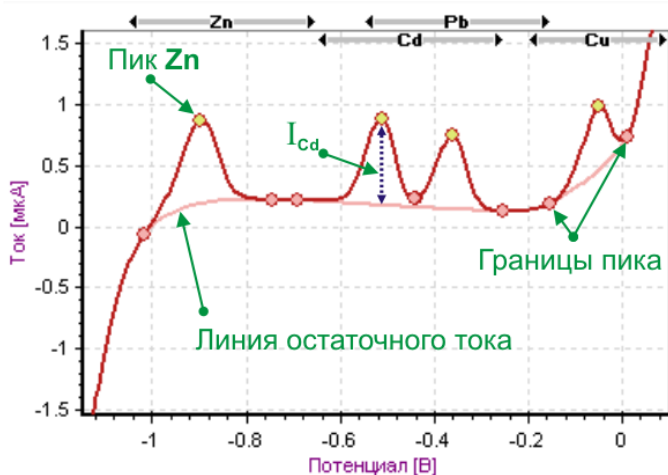


Рис. 5.2. Вольтамперограмма Zn, Cd, Pb, Cu

Высота пика в методе ИВ измеряется от линии остаточного тока до максимального значения тока пика. Например, высота пика кадмия I_{Cd} на вышеприведённом рисунке. Следовательно, для измерения высоты пика необходимо провести линию остаточного тока под пиком.

Разметка линии остаточного тока — наиболее ответственный и сложный этап в процессе проведения анализа. Сложность заключается в том, что правильность формы линии остаточного тока в конечном итоге определяет химик-аналитик, исходя из личного опыта.

В программе, линия остаточного тока проводится между точками, которые обозначают границы пика. Процедура разметки вольтамперограммы сводится к выбору границ пиков определяемых компонентов, при этом автоматически проводится линия остаточного

тока через выбранные точки, определяются потенциалы максимумов пиков и измеряется их высота и площадь. Выбор этих точек важен, поскольку он определяет правильность проведения линии остаточного тока и, следовательно, измерения высоты пика. Насколько связано правильное определение границ пика с измерением высоты пика, хорошо видно на Рис. 5.3. На рисунке (а) остаточный ток под пиками пики Zn и Cu размечен правильно, (б) — неправильно.

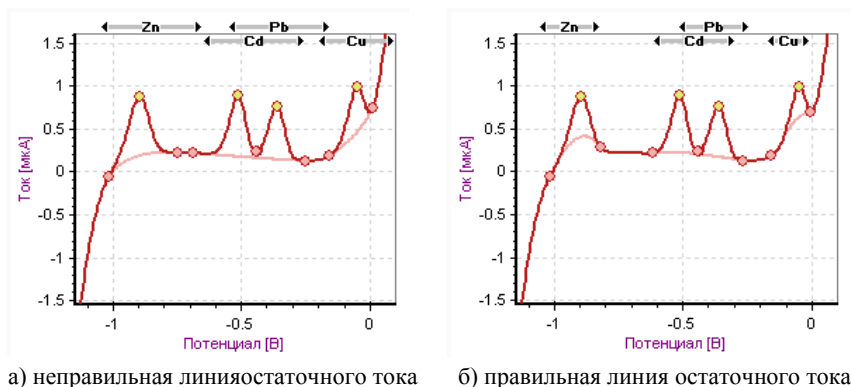


Рис. 5.3. Влияние определения границ пика на форму остаточного тока

Маркер состоит из заголовка — название элемента из двух стрелок, при помощи, которых можно изменять ширину маркера и таким образом устанавливать границы пиков. Ширина маркера называется *зоной пика*. Например, для Zn — $\leftarrow \text{Zn} \rightarrow$.

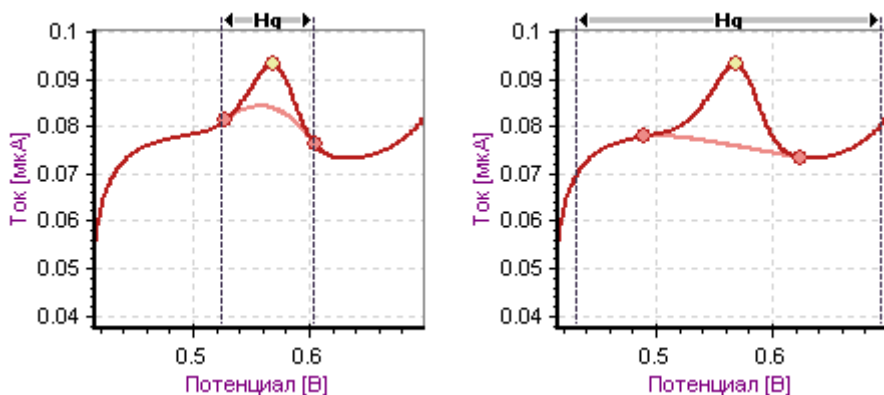
Чтобы изменить ширину маркера, нужно переместить с помощью мыши любую из стрелок маркера в горизонтальном направлении. При этом перемещаемая стрелка будет выделена цветом и вертикальной линией к оси потенциалов. С помощью этой линии удобно контролировать границы пиков на вольтамперограммах. Местоположение маркера определяется потенциалом пика определяемого элемента. При смещении потенциала пика от заданного необходимо корректировать положение маркера. Для этого нужно устано-

вить курсор мыши на название маркера и перетащить его в горизонтальном направлении в положение, соответствующее потенциалу пика. Зона между стрелками маркера является зоной поиска пика. Добавление или удаление маркеров из верхней части окон отображения вольтамперограмм происходит автоматически при изменении таблицы определяемых элементов текущего метода измерения.

С учетом разнообразия форм вольтамперограмм в программе предусмотрены режимы автоматической и принудительной разметки.

Автоматическая разметка

При включенном режиме автоматической разметки границ пиков, программа автоматически расставит границы пиков, руководствуясь установленными вручную границами зон пиков элементов.



а) недостаточная ширина зоны поиска

б) достаточная ширина зоны поиска

Рис. 5.4. Выбор зоны поиска для определения границ пика.

При обнаружении пика программа помечает его вершину точкой (цвет точки, устанавливается в окне **Цвета кривых**). Границы пика также отображаются точками, цвета кривой остаточного тока.

Критерием правильности выбора границ пиков, в данном виде разметки, является тот факт, что при дальнейшем расширении зоны

поиска, границы пиков на кривых не изменяются. Поэтому важно устанавливать максимально возможную зону поиска. На Рис. 5.4 показаны примеры недостаточной и достаточной ширины зоны поиска. Обратите внимание, что на рисунке (б), зона поиска существенно шире, чем найденные автоматически, границы пиков.

Важно: зона поиска, определяемая шириной маркера, не должна захватывать вершины любых соседних пиков.

Принудительная разметка

Принудительная разметка жёстко задаёт границы пиков вольтамперограммы (Рис. 5.5). Границами пиков являются точки пересечения границ маркеров и вольтамперограммы. Такой режим может оказаться эффективным, если сигнал маленький, или пик имеет невыраженную форму, например для пиков Hg и As.

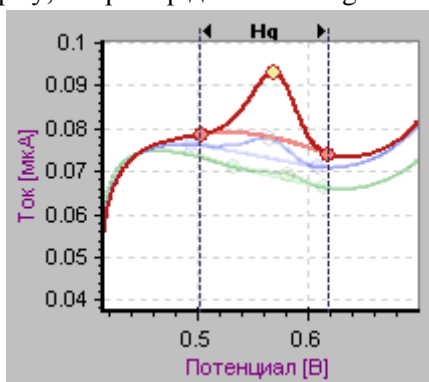


Рис. 5.5. Принудительная разметка пика

В режиме принудительной разметки, для каждой кривой и для каждого пика, границы можно выставлять индивидуально.

Для включения режима принудительной разметки для требуемой кривой нужно щёлкнуть либо по этой кривой, либо по вкладке с её названием (фон, проба, добавка либо стандарт) под графиком канала (см. подраздел 3.4 «Каналы отображения»). При этом контур

графика окрасится в серый цвет, а все остальные графики станут полупрозрачными.

В режиме принудительной разметки, перемещение границ маркеров перемещает границы пиков выделенной кривой, но не оказывают влияния на другие кривые с включенным остаточным током. Для выхода из режима выделения следует еще раз щелкнуть по этой же кривой, либо по серой вкладке снизу графика, либо нажать кнопку **Обычный режим** на инструментальной панели канала.

Правила разметки вольтамперограмм:

- Разметка вольтамперограммы происходит автоматически, сразу после окончания процедуры её регистрации.
- Разметка средней кривой происходит автоматически после вывода её в канал отображения.
- Изменение границ маркеров приводит к изменению разметки вольтамперограмм, у которых показана линия остаточного тока. Как показывать / скрывать линию остаточного тока, рассказано в подглаве 4.7 «Каналы».
- Результаты измерения высот пиков заносятся в соответствующие строки панели результатов канала отображения.
- Программа автоматическая рассчитывает и проводит линию остаточного тока между пиков элементов. Однако оператор имеет возможность выбора одного из двух вариантов проведения линии остаточного тока: линейная либо «мягкая» (см. подраздел 3.4 «Каналы отображения»).

Раздел 6. Анализ вольтамперограмм

6.1. Обработка серии вольтамперограмм

После проведения регистрации необходимого количества вольтамперограмм в серии, следует исключить из рассмотрения неудовлетворительные кривые. Это необходимо сделать, если при регистрации вольтамперограмм не применялся режим автоматического исключения, либо существует необходимость скорректировать результат автоматического исключения.

Чаще всего это можно сделать по внешнему виду кривых, например, из-за значительного наклона линии остаточного тока, не характерной формы пиков и т.д. Иногда, например, при малых сигналах в одиночных пиках, удобнее пользоваться панелью результатов и принимать решение, основываясь на численных значениях высот пиков элементов.

Для исключения вольтамперограммы из дальнейшей обработки следует щелкнуть по ней правой кнопкой мыши. Кроме того, этого же результата можно добиться, щелкнув правой кнопкой мыши по соответствующей строке в панели результатов. При исключении кривая меняет свой цвет, а соответствующая ей строка изменяет свой вид (Рис. 6.1). Вернуть кривой исходный вид можно повторным щелчком правой кнопки по ней или строке в панели результатов.

В панели результатов выводятся высоты пиков только для серии, которая была снята последней (фон, проба и т.д.). Чтобы переключить панель на работу с другой серией, следует щелкнуть левой кнопкой мыши по заголовку панели и из появившегося меню выбрать требуемую серию.

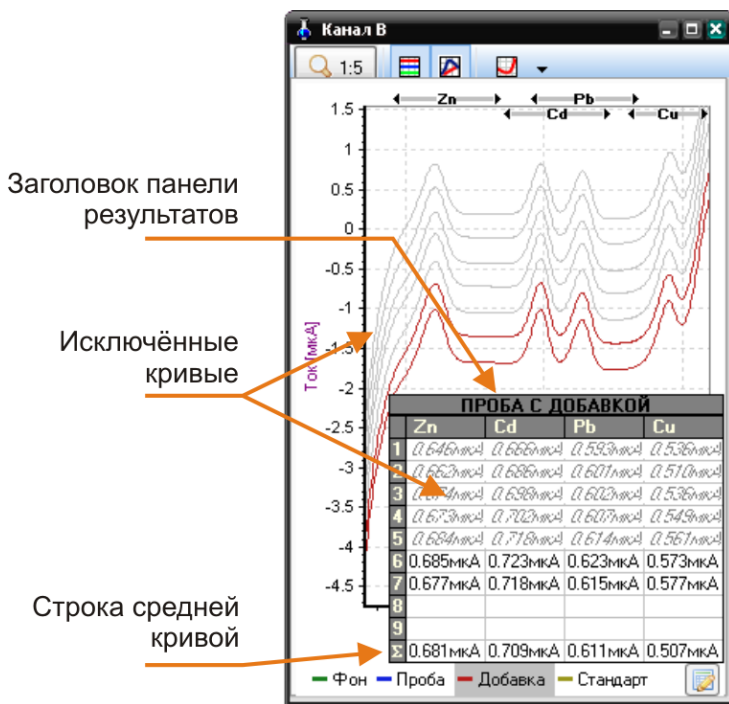


Рис. 6.1. Исключение в серии вольтамперограмм

В последующем расчете концентраций будут участвовать уже не исходные кривые, а средние (см. подраздел 4.4 «Анализ»). При таком подходе достаточно разметить только «среднюю» кривую.

6.2. Процедура анализа

Последовательность операций при проведении анализа зависит от способа определения концентраций по методу сравнения со стандартным образцом или по методу стандартной добавки

Определение концентраций элементов в пробе методом сравнения со стандартным образцом применяется при анализе серии однотипных объектов. Этот метод не столь точен, как метод стандартной добавки, но требует меньших затрат времени и реактивов.

Определение концентраций элементов в пробе методом стандартной добавки — наиболее точный, но трудоемкий метод.

Возможен следующий вариант анализа: определение концентраций по стандарту, а в случае превышения ПДК, в эту же пробу ввести стандартную добавку и пересчитать по добавке.

Прописи методик КХА содержат подробное описание процедуры проведения анализа.

Вне зависимости от выбранного варианта, первым этапом анализа должна быть процедура определения чистоты ячеек.

6.3. Определение концентраций по методу стандарта

Если определение концентраций элементов в пробе будет проводиться по стандарту, то нужно приготовить стандартную смесь с концентрациями элементов, близкими к типичным для данного объекта анализа. Установив в анализатор ячейки с этой смесью, провести регистрацию серии **Стандарт**, как описано выше. В форме **Параметры стандарта** нужно указать объем стандарта и концентрации элементов в стандартной смеси для каждого канала.

Затем, установив в анализатор ячейки с анализируемой пробой, нужно провести регистрацию серии **Проба**. В окне **Параметры пробы** надо указать действительные значения объемов аликвоты, минерализата и массы навесок для каждого канала.



6.4. Определение концентрации по методу добавки





Если определение концентрации элементов в пробе будет проводиться по добавке, после съемки вольтамперограмм пробы нажать кнопку **Проба с добавкой** на инструментальной панели. В форме **Параметры добавки** появится таблица с рекомендуемыми в предыдущем измерении добавками аттестованных смесей (объем и

концентрация раствора). Чтобы получить рекомендуемые добавки для текущей измеренной пробы, необходимо нажать кнопку **Оптимум**. Необходимо внести добавку с такими параметрами в ячейки с пробами и нажать кнопку **ОК**. Если требуется ввести добавки с другими параметрами, нужно ввести исправления в таблицу. После введения добавок в соответствии с занесенными в таблицу, необходимо провести регистрацию и обработку серии **Проба с добавкой**.

6.5. Расчет концентраций

Расчет концентрации определяемых элементов в пробе можно провести двумя способами: сформировать отчет о проведенном измерении и воспользоваться калькулятором концентраций.

Для создания отчетов следует воспользоваться командой  **Отчёты** (см. подраздел 4.5 «Отчётность», пункт **Отчёты**). Для вызова калькулятора концентраций следует воспользоваться командой  **Расчёт концентрации** (см. пункт **Отчёты** того же подраздела).

Результаты вычисления концентраций выводятся в виде таблицы, в которой представлены концентрации определяемых элементов в пробе для всех каналов, средние значения и значения норматива контроля повторяемости r . Слева от значения концентраций для каналов расположен маркер  или , определяющей участие данного значения в расчёте средней концентрации и отклонения. Если значения концентрации элемента в каком-либо канале выпадает (существенно больше, или меньше чем в остальных) можно исключать его из участия в расчетах. Для этого необходимо изменить признак слева от значения концентраций , определяющий участие данного значения в расчетах на . Изменить состояние этого признака можно щелчком левой кнопки мыши по ячейке, в которой он расположен. Нулевые значения концентраций автома-

тически исключаются из рассмотрения, вне зависимости от состояния признака.

В верхней части калькулятора расположены органы управления вычислением (Рис. 4.11), при помощи которых можно провести расчет концентраций, как по высотам, так и по площадям пиков, как по сериям, так и по «средним» кривым. Если были проведены измерения и стандарта и добавки, то можно провести расчеты как по методу сравнения со стандартным образцом, так и по методу стандартной добавки.

Расчеты будут выполнены с учетом фона, если включен пункт **Учет фона**. Если включен пункт **Расчет по «средним»**, расчеты концентраций выполняются исходя из полученных средних вольтамперограмм. Если пункт **Расчет по «средним»** не активен, то расчеты будут выполнены исходя из зарегистрированных исходных вольтамперограмм.

Для проведения оперативного контроля повторяемости результатов параллельных определений при анализе одной пробы следует выбрать соответствующий объект анализа и нормативный документ из одноименного раскрывающегося меню. Программа автоматически выбирает оптимальную пару результатов, рассчитывает значение норматива контроля повторяемости r , абсолютную погрешность как показано на Рис. 6.2.

Cd	✔ 0.0178	✔ 0.0157	✘ 0.0241	0.005	0.017±0.0055
----	----------	----------	----------	-------	--------------




Рис. 6.2. Контроль повторяемости определения Cd

Если найденные концентрации элемента не входят в диапазон определяемых концентраций (меньше минимальной, либо больше максимальной), то программа выдает об этом предупреждение, а значения параметра оперативного контроля повторяемости и абсолютной погрешности не рассчитываются (Рис. 6.3)

Cu	 0.0217	 0.0172	 0.0245	Нет	0.021 
----	--	--	--	-----	---

Рис. 6.3. Контроль повторяемости определения Cd

Если расхождения между параллельными определениями превышают допустимое r , то программа выдает сообщение о том, что не выполняется условие повторяемости, результат рассчитывается по медиане, значение параметра оперативного контроля также не рассчитывается.

Результаты измерения можно распечатать, перенести в другое приложение (например, MS Word, Excel), либо сохранить в отдельном файле текстового формата. Для этого в нижней части калькулятора имеется три кнопки. Кнопка  копирует результаты в буфер обмена, для их дальнейшей вставки в другое приложение (например, MS Word, Excel). Кнопка  сохраняет результаты в отдельный текстовый файл. Кнопка  выводит на печать результаты расчета.

6.6. Архив результатов

Результаты измерений могут быть сохранены на диске компьютера в виде файла (командой главного меню **Архив** → **Сохранить**) с расширением **.dat**. В общем случае все файлы архива помещаются в папку **Архивы**. Подробнее смотри подраздел 4.1 «Архив».

В архиве будут сохранены не только измеренные вольтамперограммы с разметкой, но и метод измерения, параметры серий, размеры и положение окон каналов, а также состояние органов управления каналами.

Загрузить архивный файл в программу можно командой главного меню **Архив** → **Открыть архив**.

Если до загрузки архива в каналах находились результаты текущих измерений, то они будут сохранены во временном файле и их можно будет восстановить командой главного меню **Архив** → **Вос-**

становить исходные. После загрузки, с архивными данными можно работать точно так же, как и с измеренными. Текущий метод, параметры серий, маркеры каналов и т.д. будут замещены архивными данными. Название архивного файла будет выведено в заголовок программы.

Для просмотра комментария к загруженному архивному файлу воспользуйтесь областью комментария (см. подраздел 3.1 «Главное окно»).