ОБЩЕСТВО С ОГРАНИЧЕННОЙ ОТВЕТСТВЕННОСТЬЮ
« Л М М »

Программное обеспечение СпектраЛЮМ

РУКОВОДСТВО ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ

00901-00-001 РП

Санкт - Петербург
2024

Внимательно ознакомьтесь с данным руководством перед началом работы с программным обеспечением. ООО «ЛММ» не несет ответственности за ущерб, нанесенный вследствие несоблюдения приведенных инструкций.

Перед началом работы с программным обеспечением прочтите и примите лицензионное соглашение.

Настоящее Руководство или его части запрещается копировать или распространять в каком-либо виде без предварительного письменного разрешения ООО «ЛММ».

195220, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ул. Обручевых, дом 1, литер Б

Телефон: +7 (812) 426-87-77

Электронная почта: info@lmm-soft.ru, Веб-сайт: https://lmm-soft.ru/

Версия 16

Дата версии: 26.07.2024

Содержание

1 Введение 1
1.1 Работа с руководством пользователя 1
1.2 Назначение программы 1
1.3 Соответствие нормативным требованиям ГОСТ Р 8.654–2015 и FDA 21 CFR part 11 1
1.4 Условные обозначения и сокращения 3

2 Основные этапы работы с программой СпектраЛЮМ 4
2.1 Запуск программы СпектраЛЮМ 4
2.2 Главное окно программы 6
2.3 Настройка программы 7
2.4 Настройка панелей инструментов 8
2.4.1 Панель инструментов «Стандартная» 8
2.4.2 Панель инструментов «Прибор» 9
2.4.3 Панель инструментов «Просмотр» 10
2.5 Справка 11
2.6 Завершение работы программы 12

3 Подключение и настройка спектрометра 13
3.1 Подключение спектрометра 13
3.2 Выбор режимов питания прибора 16
3.3 Информация о приборе 18
3.4 Работа с приводами 19
3.4.1 Работа с приводом приборов «ИнфраЛЮМ ФТ-08» и «ИнфраЛЮМ ФТ-08М» 19
3.4.2 Работа с приводами приборов «ИнфраЛЮМ ФТ-10» и «ИнфраЛЮМ ФТ-12» . 21
3.4.3 Работа с приводами прибора «ИнфраЛЮМ ФТ-20» 22
3.4.4 Работа с приводами прибора «ИнфраЛЮМ ФТ-40» и «ИнфраЛЮМ ФТ-12» с просыпным устройством 23
3.5 Настройки спектрометра 25

4 Регистрация спектров 29
4.1 Регистрация фонового спектра 30
4.1.1 Единичное измерение фонового спектра 30
4.1.2 Циклическое измерение фоновых спектров 34
4.2 Регистрация спектра 37
4.2.1 Единичное измерение спектра 38

4.2.2 Циклическое измерение спектров ... 40
4.3 Регистрация интерферограммы ... 42
4.3.1 Единичное измерение интерферограммы ... 42
4.3.2 Циклическое измерение интерферограмм ... 45

5 Просмотр спектра ... 47

5.1 Принципы отображения спектров ... 47
5.2 Активный спектр ... 47
5.3 Определение координат точки спектра с помощью курсора ... 48
5.4 Увеличение части спектра ... 49
5.5 Смещение спектра влево (вправо) ... 50
5.6 Сжатие (растяжение) спектра по оси X ... 50
5.7 Настройка окна отображения ... 51
5.8 Отображение спектра во весь экран ... 52
5.9 Автомасштабирование ... 52
5.10 Отмена предыдущей операции ... 52
5.11 Возврат предыдущей операции ... 52
5.12 Сетка ... 53
5.13 Легенда ... 53
5.14 Цвет активного спектра ... 53
5.15 Только активный спектр ... 54
5.16 Преобразования по оси X ... 54
5.16.1 Инверсия оси абсцисс ... 55
5.16.2 Отображение спектров по оси абсцисс в единицах длины волны ... 56
5.17 Преобразования по оси Y ... 56
5.17.1 Пропускание ... 57
5.17.2 Поглощение ... 57
5.17.3 Отражение (R) ... 58
5.17.4 Lg(1/R) ... 58
5.17.5 Кубелка-Мунк ... 59

6 Математические операции ... 60

6.1 Статистические вычисления ... 61
6.2 Табличное отображение спектра ... 64
6.3 Поиск экстремумов ... 65
6.4 Вычисление интенсивности ... 68
6.5 Вычисление площади и высоты пика ... 70
6.6 Операции спектр-константа ... 72
6.7 Операции спектр-спектр ... 74
6.8 Усреднение спектров ... 76
6.9 Создание "смеси" ... 76

6.10 Нормировка спектров 79
6.11 Выравнивание базовой линии 80
6.11.1 Автоматическая коррекция базовой линии 81
6.11.2 Ручная коррекция базовой линии 82
6.12 Взятие производных от спектра 87
6.13 Сглаживание 89
6.14 Коррекция НПВО 92
6.15 Преобразование Крамерса-Кронига 94
6.16 Вырезание участков спектра 95
6.16.1 Коррекция CO_2 и H_2O 95
6.16.2 Ручная коррекция 98
6.17 Изменение параметров спектра 101

7 Анализ спектров 104

7.1 Поиск спектра в библиотеке 104
7.2 Сравнение спектров по Евклидовому расстоянию 105
7.3 Определение массовой концентрации нефтепродуктов в воде по DIN 38409 H18109
7.4 Определение массовой концентрации нефтепродуктов в воде по методике М 01-39-2010 112
7.5 Определение массовой концентрации нефтепродуктов в воде по методу IP 426113
7.6 Определение массовой доли нефтепродуктов в твердых образцах по DIN 38409 H18 116
7.7 Определение массовой доли НП в твердых образцах по инструкции ООО «ЛММ» 119
7.8 Идентификация нефтепродуктов по приказу 241 Минприроды 120
7.9 Определение трансизомеров жирных кислот по ГОСТ 31754-2012 124
7.10 Определение концентрации СБС в битуме 127
7.11 Количественный анализ 130
7.11.1 Анализ по созданным градуировочным зависимостям 130
7.11.2 Вычисление градуировочных зависимостей 133
7.11.3 Просмотр сохраненных результатов количественного анализа 138
7.11.4 Экспорт результатов количественного анализа 139

8 Базовые операции со спектрами 141

8.1 Сохранение спектров и интерферограмм 141
8.2 Открытие спектров и интерферограмм 143
8.3 Закрытие спектров и интерферограмм 143
8.3.1 Закрытие активного спектра 143
8.3.2 Закрытие всех спектров 144

9 Проверка спектрометра 145

9.1 Выполнение проверки 146

9.2 Настройка проверок ... 147
9.3 Просмотр результатов проверок ... 150

10 Протокол ... 153

10.1 Протокол из главного окна программы ... 153
10.2 Протокол из диалоговых окон ... 155
10.3 Печать протокола из главного окна программы ... 157
10.4 Настройка шаблона протокола ... 157
10.5 Редактор шаблонов ... 160
10.6 Создание шаблона «Общего протокола» ... 165
10.7 Создание шаблона протокола «Проверка» ... 167
10.8 Создание шаблона протокола «Статистика» ... 170
10.9 Создание шаблона протокола «Атрибуты спектра» ... 172
10.10 Создание шаблона протокола «Поиск экстремумов» ... 175
10.11 Создание шаблона протокола «Интенсивность» ... 177
10.12 Создание шаблона протокола «Площадь пика» ... 179
10.13 Создание шаблона протокола «Сравнение спектров по Евклидовому расстоянию» ... 181
10.14 Создание шаблона протокола «Нефтепродукты в воде» ... 184
10.15 Создание шаблона протокола «Нефтепродукты в твёрдых образцах» ... 187
10.16 Создание шаблона протокола «Идентификация нефтепродуктов» ... 190
10.17 Создание шаблона протокола «Определение трансизомеров жирных кислот» 193
10.18 Создание шаблона протокола «Определение концентрации СБС в битуме» ... 195
10.19 Создание шаблона протокола «Градуировка» ... 198
10.20 Создание шаблона протокола «Количественный анализ» ... 200

11 Настройки безопасности ... 203

11.1 Уровни доступа к разделам программы СпектраЛЮМ ... 204
11.2 Управление учетными записями пользователей ... 205
11.2.1 Настройка общих параметров модуля безопасности ... 210
11.2.2 Просмотр журналов аудита ... 212
11.2.3 Управление архивированием журналов аудита ... 213
11.2.4 Цифровое подписывание файлов ... 214
11.2.5 Просмотр истории подписывания файлов ... 216

12 Установка программного обеспечения ... 217

13 Идентификация программного обеспечения ... 221

14 Обновление версий программного обеспечения ... 223

Перечень рисунков

Рис. 2-1 Иконка программы «СпектраЛЮМ» 4
Рис. 2-2 Диалог Авторизация 5
Рис. 2-3 Заставка программы «СпектраЛЮМ» 5
Рис. 2-4 Главное окно программы «СпектраЛЮМ» 6
Рис. 2-5 Предупреждающее сообщение о несохранённых спектрах 12
Рис. 3-1 Диалоговое окно «Подключение прибора» 14
Рис. 3-2 Диалоговое окно «Подключение прибора». Выбор порта 14
Рис. 3-3 Диалоговое окно «Информация о приборе» 15
Рис. 3-4 Готовность прибора к работе 16
Рис. 3-5 Диалоговое окно «Режим питания работы» 17
Рис. 3-6 Диалоговое окно «Управление приводами» при работе с приборами «ИнфраЛЮМ ФТ-08» и «ИнфраЛЮМ ФТ-08М» 20
Рис. 3-7 Диалоговое окно «Управление приводами» при работе с приборами «ИнфраЛЮМ ФТ-10» и «ИнфраЛЮМ ФТ-12» 22
Рис. 3-8 Диалоговое окно «Управление приводами» при работе с прибором «ИнфраЛЮМ ФТ-20» 23
Рис. 3-9 Диалоговое окно «Управление приводами» при работе с приборами «ИнфраЛЮМ ФТ-40» и «ИнфраЛЮМ ФТ-12» с просыпным устройством 24
Рис. 3-10 Диалоговое окно «Настройки спектрометра» 26
Рис. 4-1 Диалоговое окно «Параметры регистрации фонового спектра» 31
Рис. 4-2 Диалоговое окно «Регистрация» 32
Рис. 4-3 Сообщение о приостановке измерения 33
Рис. 4-4 Главное окно программы. Зарегистрированный фоновый спектр 34
Рис. 4-5 Диалоговое окно «Параметры регистрации фонового спектра». Циклические измерения 35
Рис. 4-6 Диалоговое окно «Регистрация» при циклических измерениях с подтверждением начала каждого измерения 36
Рис. 4-7 Диалоговое окно «Выберите папку для спектров» 36
Рис. 4-8 Предупреждающее сообщение о том, что файлы с указанным базовым именем уже существуют. 37
Рис. 4-9 Диалоговое окно «Параметры регистрации спектра» 38
Рис. 4-10 Стандартное окно открытия файла 39
Рис. 4-11 Главное окно программы. Зарегистрированный спектр 40
Рис. 4-12 Диалоговое окно «Параметры регистрации интерферограммы» 43
Рис. 4-13 Главное окно программы. Зарегистрированная интерферограмма. 44
Рис. 4-14 Диалоговое окно «Параметры регистрации интерферограммы» 45
Рис. 5-1 Определение координат точки спектра с помощью курсора 48
Рис. 5-2 Увеличение части спектра 49

Рис. 5-3 Диалоговое окно «Настройка окна отображения» 51
Рис. 5-4 Диалоговое окно «Цвет» 54
Рис. 6-1 Диалоговое окно «Статистика» 62
Рис. 6-2 Диалоговое окно «Атрибуты спектра» 64
Рис. 6-3 Диалоговое окно «Поиск экстремумов» 66
Рис. 6-4 Диалоговое окно «Поиск экстремумов». Отображение результатов на графике 67
Рис. 6-5 Диалоговое окно «Интенсивность» 68
Рис. 6-6 Диалоговое окно «Интенсивность». Отображение результатов на графике 69
Рис. 6-7 Диалоговое окно «Площадь пика» 71
Рис. 6-8 Диалоговое окно «Площадь пика». Отображение результатов на графике 72
Рис. 6-9 Диалоговое окно «Операции спектр-константа» 73
Рис. 6-10 Диалоговое окно «Идентификатор нового спектра» 74
Рис. 6-11 Диалоговое окно «Операции спектр-спектр» 75
Рис. 6-12 Диалоговое окно «Построение смеси» 77
Рис. 6-13 Построение смеси. Результат 78
Рис. 6-14 Диалоговое окно «Нормировка» 79
Рис. 6-15 Автоматическая коррекция базовой линии 82
Рис. 6-16 Диалоговое окно «Ручная коррекция базовой линии». Исходные данные. Весь диапазон спектра 83
Рис. 6-17 Диалоговое окно «Ручная коррекция базовой линии». Исходные данные. Ограниченный точками диапазон 84
Рис. 6-18 Ручная коррекция базовой линии. Весь диапазон спектра. 85
Рис. 6-19 Ручная коррекция базовой линии. Ограниченный точками диапазон. 85
Рис. 6-20 Ручная коррекция базовой линии. Весь диапазон спектра. Результат 86
Рис. 6-21 Ручная коррекция базовой линии. Ограниченный точками диапазон. Результат 87
Рис. 6-22 Диалоговое окно «Производные» 88
Рис. 6-23 Производные. Результат вычисления производной 89
Рис. 6-24 Диалоговое окно «Сглаживание» 90
Рис. 6-25 Сглаживание. Исходные данные. Алгоритм скользящего среднего 91
Рис. 6-26 Сглаживание. Результат сглаживания спектра по алгоритму Савицкого-Голея 92
Рис. 6-27 Диалоговое окно «Коррекция спектров НПВО» 93
Рис. 6-28 Коррекция спектров НПВО. Результат коррекции спектра НПВО 94
Рис. 6-29 Диалоговое окно «Вырезание полос CO_2 и H_2O» 96
Рис. 6-30 Вырезание участков спектра. Коррекция CO_2 и H_2O. Исходный спектр 97
Рис. 6-31 Вырезание участков спектра. Коррекция CO_2 и H_2O. Результирующий спектр 98
Рис. 6-32 Диалоговое окно «Вырезание участков спектра». Ручная коррекция. 99
Рис. 6-33 Вырезание участков спектра. Ручная коррекция. Исходный спектр 100
Рис. 6-34 Вырезание участков спектра. Результат ручной коррекции 100
Рис. 6-35 Диалоговое окно «Изменение параметров спектра» 101
Рис. 7-1 Диалоговое окно «Сравнение спектров по Евклидовому расстоянию» 106
Рис. 7-2 Диалоговое окно «Исключаемый интервал» 107

Рис. 7-3 Сравнение спектров по Евклидовому расстоянию. Указаны исключенные интервалы на графике 108
Рис. 7-4 Зарегистрированный спектр нефтепродуктов в воде 110
Рис. 7-5 Диалоговое окно «Нефтепродукты в воде по DIN 38409 H18» 111
Рис. 7-6 Диалоговое окно «Нефтепродукты в воде по IP 426» 115
Рис. 7-7 Зарегистрированный спектр нефтепродуктов в экстракте пробы 117
Рис. 7-8 Диалоговое окно «Нефтепродукты в твердых образцах по DIN 38409 H18» 118
Рис. 7-9 Идентификация. Зарегистрированные спектры нефтепродуктов 122
Рис. 7-10 Диалоговое окно «Идентификация нефтепродуктов» 123
Рис. 7-11 Определение транс-изомеров жирных кислот. Зарегистрированный спектр 125
Рис. 7-12 Диалоговое окно «Определение транс-изомеров жирных кислот» 126
Рис. 7-13 Диалоговое окно «Определение концентрации СБС в битуме» 128
Рис. 7-14 Диалоговое окно «Количественный анализ» 131
Рис. 7-15 Диалоговое окно «Количественный анализ» - недостоверные результаты анализа 132
Рис. 7-16 Диалоговое окно «Количественный анализ (градуировка)» 135
Рис. 7-17 Диалоговое окно «График градуировочной зависимости» 137
Рис. 7-18 Диалоговое окно «Журнал количественного анализа» 139
Рис. 7-19 Диалоговое окно выбора папки 140
Рис. 8-1 Диалоговое окно «Сохранение файла» 142
Рис. 9-1 Диалоговое окно «Проверка» 146
Рис. 9-2 Диалоговое окно «Настройка тестов» 148
Рис. 9-3 Диалоговое окно «Настройка проверок» 149
Рис. 9-4 Диалоговое окно «Проверка». Ввод названия новой проверки 149
Рис. 9-5 Диалоговое окно «Добавить тесты» 150
Рис. 9-6 Диалоговое окно «Проверка». Результаты текущей проверки. 151
Рис. 10-1 Диалоговое окно «ReportViewer» для просмотра протокола 154
Рис. 10-2 Диалоговое окно «Print Preview» 155
Рис. 10-3 Диалоговое окно «Report Viewer». Протокол из диалогового окна «Атрибуты спектра» 156
Рис. 10-4 Диалоговое окно «Настройка шаблона протокола» 158
Рис. 10-5 Диалоговое окно «Открытие файла шаблона протокола» 159
Рис. 10-6 Создание шаблона протокола «Поиск экстремумов» 161
Рис. 10-7 Создание шаблона протокола. Добавление слоя. Активный слой 161
Рис. 10-8 Создание шаблона протокола. Разделение слоя на части 162
Рис. 10-9 Создание шаблона протокола. Добавление виджетов 163
Рис. 10-10 Создание шаблона протокола. Полное отображение информации 164
Рис. 10-11 Создание шаблона протокола. Настройки виджета 165
Рис. 13-1 Диалоговое окно «Идентификация ПО» 221

1 Введение

1.1 Работа с руководством пользователя

Данное руководство пользователя (в дальнейшем – Руководство) включает в себя информацию по установке и работе с программным продуктом «СпектраЛЮМ». Предполагается, что пользователь обладает основами компьютерной грамотности и базовыми знаниями по проведению лабораторных анализов.

В случае возникновения проблем или вопросов обращайтесь, пожалуйста, в представительство ООО «ЛММ».

1.2 Назначение программы

Программа «СпектраЛЮМ» предназначена для управления работой спектральных приборов типа «ИнфраЛЮМ» (далее, спектрометров) с целью регистрации интерферограмм и различного типа спектров анализируемых веществ, а также для обработки полученной спектральной информации.

1.3 Соответствие нормативным требованиям ГОСТ Р 8.654–2015 и FDA 21 CFR part 11

Программное обеспечение СпектраЛЮМ соответствует всем требованиям к программному обеспечению средств измерений по ГОСТ Р 8.654–2015, а также соответствует требованиям Свода Федеральных норма-

тивных актов управления по контролю за продуктами и лекарствами (США) в части 21 раздела 11 (FDA 21 CFR Part 11).

Программное обеспечение СпектраЛЮМ пригодно для использования в рамках аналитических систем, соответствующих рекомендованным принципам производства и контроля качества (GMP), например, в соответствии с Приложением 11 ГОСТ Р 52249–2009.

Работа с программным обеспечением СпектраЛЮМ осуществляется только авторизованными пользователями. Уровень доступа к функциям программы, язык интерфейса программы для каждого пользователя устанавливаются либо руководителем группы, создаваемым при инсталляции программы, либо сервис-инженером ООО «ЛММ».

Срок действия паролей пользователей, время бездействия программы до последующей ее блокировки, число символов в пароле пользователя, число попыток ввода неправильного пароля и другие параметры могут быть настроены индивидуально в соответствии с политикой безопасности конкретного предприятия (в рамках требований ГОСТ Р 8.654–2015, ГОСТ Р 52249–2009, FDA 21 CFR Part 11).

Программное обеспечение СпектраЛЮМ автоматически сохраняет информацию в Журнале «Аудит событий» обо всех основных действиях пользователя, осуществляемых в программе с фиксацией имени пользователя, даты и времени выполнения события, типа события и т.д.

Программное обеспечение СпектраЛЮМ может обеспечивать безопасное управление данными и поддержку электронной подписи всех сохраненных в архив результатов измерений.

Программное обеспечение СпектраЛЮМ позволяет работать со всеми раннее сохраненными данными с проверкой их на фальсификацию.

Программное обеспечение СпектраЛЮМ сохраняет результаты измерений с привязкой к реальному времени, описанием проб, именем пользователя, выполнявшего измерения и т.д.

Полученные результаты могут быть оформлены в протокол по шаблону, настроенному в соответствии с требованиями конкретного предприятия. В шаблон могут быть включены текст, рисунки, логотипы и другие элементы, которые будут отображаться в протоколе.

Программное обеспечение СпектраЛЮМ позволяет идентифицировать метрологически значимую часть программы с проверкой ее контрольной суммы по алгоритму MD5 в соответствии с требованиями ГОСТ Р 8.654–2015.

1.4 Условные обозначения и сокращения

В данном руководстве пользователя используются следующие обозначения:

Жирный шрифт	Названия кнопок меню, например, **Файл, Вычисления.** Названия кнопок панели инструментов, командных кнопок, переключатели, контрольные отметки, выпадающие списки, например, **Автомасштаб, Поиск, Усреднение всех спектров, Аподизация.**
Курсив	Названия документов, на которые приводятся ссылки в данном Руководстве, например, *Руководство по эксплуатации ИнфраЛЮМ ФТ-02*

В Руководстве используются предупреждающие обозначения:

ПРЕДОСТЕРЕЖЕНИЕ:



Используется в случае опасности повреждения программного продукта или данных, если пользователь проигнорирует предостережение.



Указывает на дополнительную информацию при работе с программой и/или прибором.

2 Основные этапы работы с программой СпектраЛЮМ

2.1 Запуск программы СпектраЛЮМ

Чтобы начать работу с программой для регистрации спектров, необходимо сделать следующее:

1) подготовьте спектрометр к работе в соответствии с руководством по эксплуатации данного прибора.

2) Включите спектрометр в соответствии с руководством по эксплуатации данного прибора.

3) Включите питание компьютера, используя выключатель сетевого питания. Произойдет загрузка операционной системы, и на экране монитора появится рабочий стол Windows.

4) Для запуска программы СпектраЛЮМ дважды щелкните левой кнопкой мыши иконку (Рис. 2-1) программы или из меню **ПУСК** выберите подменю **Программы – Lumex – SpectraLUM – Запустить СпектраЛЮМ**.



Рис. 2-1 Иконка программы «СпектраЛЮМ»

5) Откроется диалоговое окно ***Авторизация*** (Рис. 2-2). Выберите имя пользователя из выпадающего списка **Имя,** введите свой пароль в поле **Пароль** и нажмите кнопку **Вход.** Кнопка **Выход** предназначена для завершения работы с программой.

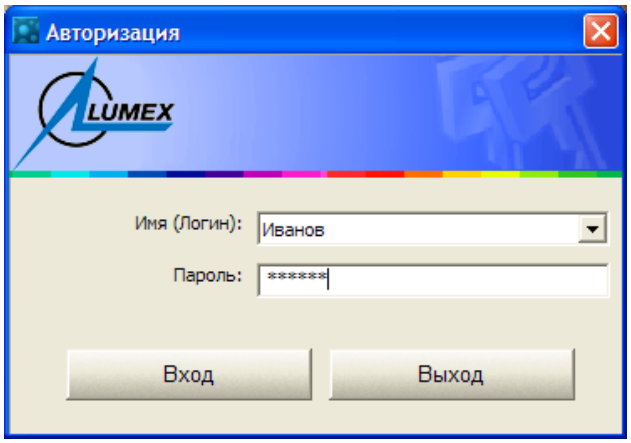


Рис. 2-2 Диалог Авторизация

После нажатия кнопки **Вход** в окне авторизации откроется заставка программы (Рис. 2-3).



Рис. 2-3 Заставка программы «СпектраЛЮМ»

6) Дождитесь появления на экране (5 секунд) окна программы «СпектраЛЮМ» (Рис. 2-4) или кликните мышкой, заставка исчезнет раньше;

Программа СпектраЛЮМ при запуске автоматически устанавливает связь с анализатором.

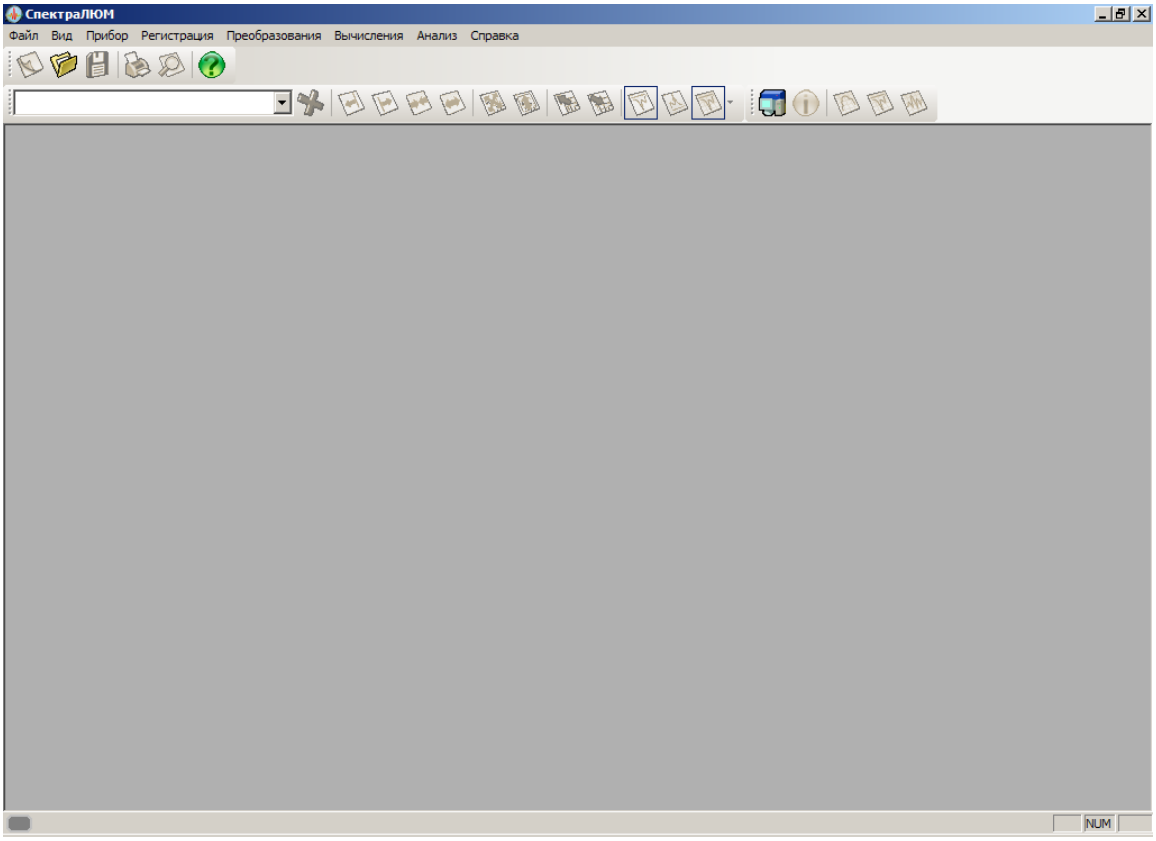


Рис. 2-4 Главное окно программы «СпектраЛЮМ»

2.2 Главное окно программы

В главном окне программы (Рис. 2-4) выделяются следующие элементы:

- **Строка заголовка** - указывает имя программы и имя файла активного спектра;
- **Строка меню** - показывает главное меню команд программы «СпектраЛЮМ». При выборе команды в строке меню открывается спускающееся меню;
- **Панель инструментов** - открывает непосредственный доступ к часто используемым командам, изображаемым здесь в виде иконок. Если на некоторое время задержать указатель мыши на иконке одной из панелей инструментов (без нажатия), то появится маленькое окошко с названием данной иконки;

- **Строка состояния** - показывает состояние программы и/или комментарии и информацию для оператора.

Главное окно программы может настраиваться оператором к удобному для него виду. Возможные настройки:

- Настройка программы (см.п.2.3) - изменение размеров главного окна;
- Настройка панелей инструментов (см.п.2.4) - установка панелей инструментов, на которых изображены основные команды в виде иконок. Все команды, выведенные в виде иконок, дублируются в главном меню программы. По умолчанию все панели инструментов выведены в главное окно программы.

2.3 Настройка программы

Программа «СпектраЛЮМ», как любая программа, работающая в операционной среде Windows, позволяет изменять размеры главного окна:

1) **Развернуть**  / **Свернуть в окно**  /**Свернуть**  / **Закрыть**  - эти команды выполняются с помощью мыши стандартными действиями.
2) **Уменьшить/Увеличить** размеры окна – эти команды выполняются с помощью левой клавиши мыши стандартными действиями: если нужно **уменьшить/увеличить размер окна по горизонтали**, наведите курсор мыши на левую или правую сторону окна и нажмите левую кнопку мыши. Удерживая её в нажатом положении, уменьшайте или увеличивайте границы окна. Если нужно **уменьшить/увеличить размер окна по вертикали**, наведите курсор мыши на верхнюю или нижнюю сторону окна и нажмите левую кнопку мыши. Удерживая её в нажатом положении, уменьшайте или увеличивайте границы окна. Если нужно одновременно **уменьшить/увеличить размер окна как по вертикали, так и по горизонтали**, наведите курсора мыши на любой угол окна и нажмите левую кнопку мыши. Удерживая её в нажатом положении, уменьшайте или увеличивайте границы окна.

2.4 Настройка панелей инструментов

Можно вывести три типа панелей инструментов:

- **стандартная** (см.п.2.4.1) - содержит кнопки операций с файлами;
- **прибор** (см.п.2.4.2) - содержит кнопки подключения прибора и информации о нём, а также кнопки регистрации спектров и интерферограмм;
- **просмотр** (см.п.2.4.3) - открывает список идентификаторов, отображаемых на экране спектров, с возможностью выбора активного спектра, и включает в себя кнопки управления отображением спектров.

Для отображения (или удаления с экрана) панелей инструментов необходимо выполнить следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт меню **Вид/Панели инструментов**.
2) В открывшемся меню отметьте галочкой необходимый тип панели инструментов, который нужно открыть в главном окне программы.
3) При необходимости передвинуть панель инструментов, наведите на вертикальный ряд с точками () курсор мыши и нажмите левую кнопку. Удерживая ее в нажатом положении, перенесите панель инструментов в удобное для Вас место и отпустите кнопку.
4) Для удаления с экрана какой-либо панели инструментов выберите пункт меню **Вид/Панели инструментов** и в открывшемся меню уберите галочку напротив необходимого типа панели.

2.4.1 Панель инструментов «Стандартная»

 **«Очистить окно»**. Закрывает все загруженные спектры. Кнопка дублирует команду главного меню **Файл/Закрыть все спектры**.

 **«Открыть файл»**. Открывает спектр из файла. Кнопка дублирует команду меню **Файл/Открыть**.

 **«Сохранить активный спектр»**. Сохраняет активный спектр. Кнопка дублирует команду меню **Файл/Сохранить как**.

 **«Печать»**. Печатает протокол из главного окна программы. Кнопка дублирует команду меню **Файл/Печать протокола**.

 **«Поиск спектров в библиотеках»**. Запускает поиск активного спектра в библиотеках. Кнопка дублирует команду меню **Анализ/Поиск в библиотеках**.

 **«Справка»**. Вызывает справку программы СпектраЛЮМ. Кнопка дублирует команду меню **Справка/Справка**.

2.4.2 Панель инструментов «Прибор»

Все командные кнопки, кроме кнопки **«Подключение прибора»**, активированы только после подключения спектрометра к компьютеру.

 **«Подключение прибора»**. Устанавливает связь прибора с компьютером. Кнопка дублирует команду меню **Прибор/Подключение прибора**.

 **«Информация о приборе»**. Открывает окно, содержащее информацию о текущем состоянии прибора. Кнопка дублирует команду меню **Прибор/Информация о приборе**.

 **«Регистрация фонового спектра»**. Открывает окно параметров регистрации фонового спектра. Кнопка дублирует команду меню **Регистрация/Фоновый спектр**.

 **«Регистрация спектра»**. Открывает окно параметров регистрации спектра. Кнопка дублирует команду меню **Регистрация/Спектр**.

 **«Регистрация интерферограммы»**. Открывает окно параметров регистрации интерферограммы. Кнопка дублирует команду меню **Регистрация/Интерферограмма**.

2.4.3 Панель инструментов «Просмотр»

Активирована только при открытом спектре.



Список идентификаторов, отображаемых на экране спектров с меткой о расширении файла данного спектра. Предназначено для выбора активного спектра.

 **«Закрыть активный спектр»**. Закрывает активный спектр. Кнопка дублирует команду меню **Файл/Закрыть активный спектр**.

 **«Режим пропускания»**. Отображает спектр(ы) в окне просмотра в единицах пропускания (либо отражения).

 **«Режим поглощения»**. Отображает спектр(ы) в окне просмотра в единицах поглощения (либо lg(1/R)).

 **«Сдвиг влево»**. Сдвигает границы окна влево по оси волновых чисел (для всех спектров). Кнопка дублирует команду меню **Вид/Сдвиг влево**.

 **«Сдвиг вправо»**. Сдвигает границы окна вправо по оси волновых чисел (для всех спектров). Кнопка дублирует команду меню **Вид/Сдвиг вправо**.

 **«Растянуть»**. Производит растяжение спектра по оси волновых чисел (для всех спектров). Кнопка дублирует команду меню **Вид/Растянуть**.

 **«Сжать»**. Производит сжатие спектра по оси волновых чисел (для всех спектров). Кнопка дублирует команду меню **Вид/Сжать**.

 **«Во весь экран»**. Устанавливает режим просмотра всех точек спектра. Кнопка дублирует команду меню **Вид/Во весь экран**.

 **«Автомасштаб по оси Y»**. Производит автомасштабирование выделенной части спектра по оси Y. Кнопка дублирует команду меню **Вид/Автомасштаб по оси Y.**

 **«Отменить (масштаб)»**. Возврат отображения спектра в вид до изменения масштаба. Кнопка дублирует команду меню **Вид/Отменить (масштаб)**.

 **«Вернуть (масштаб)»**. Возврат отображения спектра в вид после изменения. Кнопка дублирует команду меню **Вид/Вернуть (масштаб)**.

 **«Отображение спектров»**. Поле со списком, переключающее режим просмотра. Предназначено для выбора между просмотром интерферограммы, фонового спектра или спектра (пропускания, поглощения и др.). Кнопка дублирует команду меню **Вид/Отображать**.

2.5 Справка

Для получения справки выберите в пункте меню команду **Справка/Справка** или нажмите кнопку  на панели инструментов. Справка также может вызываться из отдельных окон программы по кнопке **Справка**. Справочная информация представлена в виде иерархической структуры. Здесь приводится описание основных возможностей программы.

Если необходима краткая информация непосредственно о программе «СпектраЛЮМ», выберите пункт меню **Справка/О программе**.

2.6 Завершение работы программы

Для завершения работы с программой «СпектраЛЮМ», в главном меню выберите пункт **Файл/Выход** или нажмите крестик в правом верхнем углу главного окна программы. При выходе из программы, если какой-либо спектр не был сохранён, появится предупреждающее сообщение (Рис. 2-5).

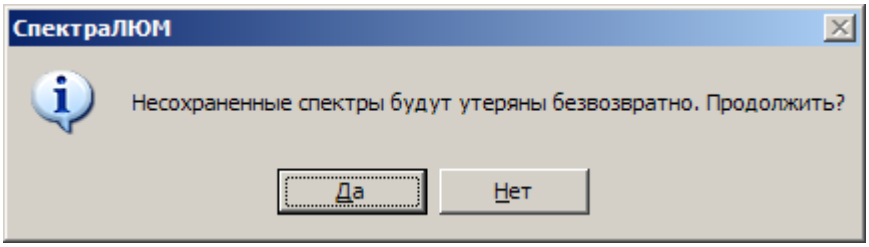


Рис. 2-5 Предупреждающее сообщение о несохранённых спектрах

При нажатии кнопки **Да** осуществляется выход из программы без сохранения спектров. При нажатии кнопки **Нет** осуществляется возврат в главное окно программы.

ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ

Не выключайте и не перезагружайте персональный компьютер, пока работает программа СпектраЛЮМ. Этим можно нарушить работу программы.

3 Подключение и настройка спектрометра

Для возможности работы программы «СпектраЛЮМ» непосредственно со спектрометром, необходимо осуществить подключение прибора к программе см.п.3.1.

При подключенном приборе программа позволяет:

- изменять режимы питания спектрометра (см.п.3.2);
- получать информацию о подключенном приборе (см.п.3.3);
- осуществлять управление подвижными элементами спектрометра (если они есть у подключенного прибора) (см.п.3.4);
- осуществлять настройки параметров спектрометра, необходимых для проведения корректных изменений (см.п.3.5).

3.1 Подключение спектрометра

Для подключения спектрометра необходимо сделать следующее:

1) Соедините спектрометр с компьютером в соответствии с *Руководством по эксплуатации* на данный прибор.
2) В главном окне программы «СпектраЛЮМ» (Рис. 2-4) нажмите кнопку с изображением прибора на панели инструментов  или выберите в главном меню программы пункт **Прибор/Подключение прибора**. Откроется диалоговое окно ***Подключение прибора*** (Рис. 3-1).

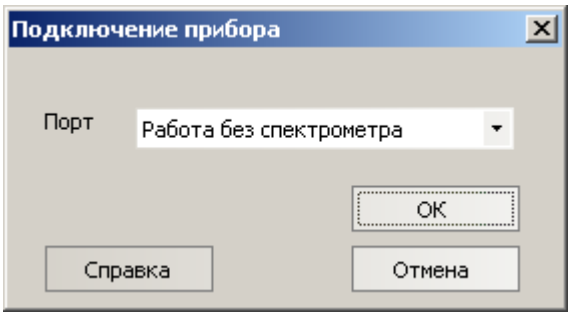


Рис. 3-1 Диалоговое окно «Подключение прибора»

3) В открывшемся диалоговом окне из выпадающего списка **Порт** выберите порт, к которому прибор подключен (Рис. 3-2).

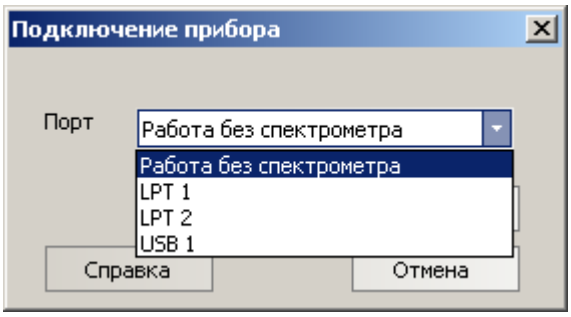


Рис. 3-2 Диалоговое окно «Подключение прибора». Выбор порта

4) Для выхода из окна ***Подключение прибора*** без каких-либо изменений нажмите кнопку **Отмена**.

5) Для вызова справки окна ***Подключение прибора*** нажмите кнопку **Справка**.

6) Нажмите кнопку **OK** для подключения прибора.

При успешном подключении спектрометра типа «ИнфраЛЮМ» на экране открывается окно, содержащее основную информацию о спектрометре (Рис. 3-3).

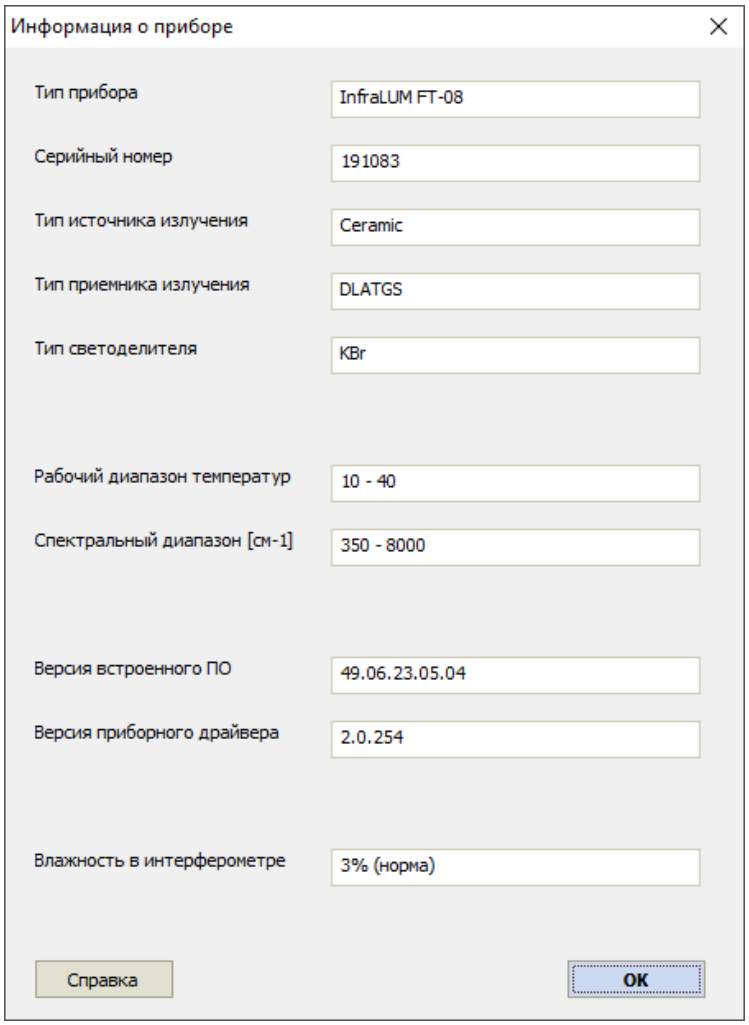


Рис. 3-3 Диалоговое окно «Информация о приборе»

7) Нажмите кнопку **OK**.

При этом в основном окне программы (Рис. 2-4) активизируются команды меню и соответствующие им командные кнопки на панели инструментов, ответственные за связь с прибором и регистрацию спектров.

О готовности прибора к работе можно судить по индикатору, расположенному в левом нижнем углу (Рис. 3-4):

- серый цвет индикатора - нет связи с прибором;
- зеленый цвет – прибор подключен и готов к работе (рабочий режим);
- красный цвет – прибор подключен, но выдал ошибку;
- желтый цвет - прибор подключен, но находится не в рабочем режиме.

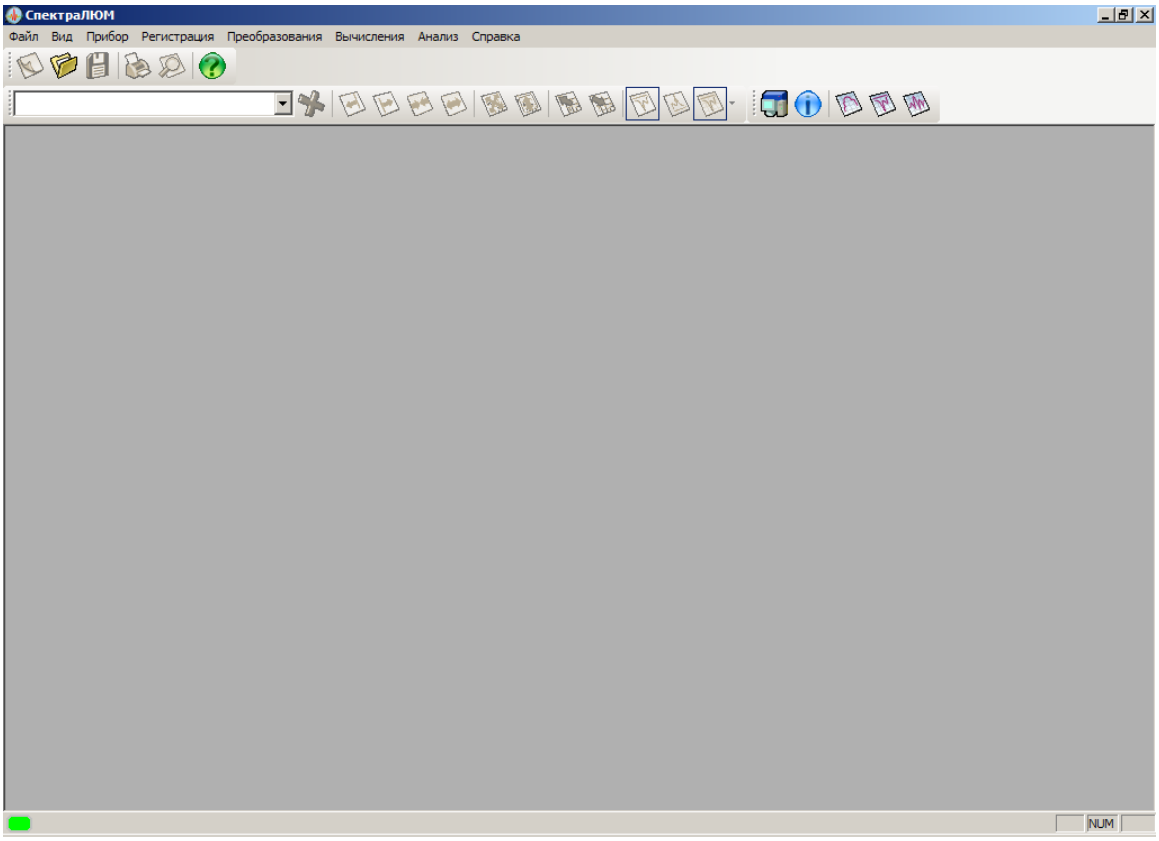


Рис. 3-4 Готовность прибора к работе

3.2 Выбор режимов питания прибора

Выбор режима электропитания прибора осуществляется с помощью программы «СпектраЛЮМ» только после установления связи с прибором (см.п.3.1).

Для выбора режима питания прибора сделайте следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Прибор/Режимы питания**. Откроется диалоговое окно ***Режим питания прибора*** (Рис. 3-5).

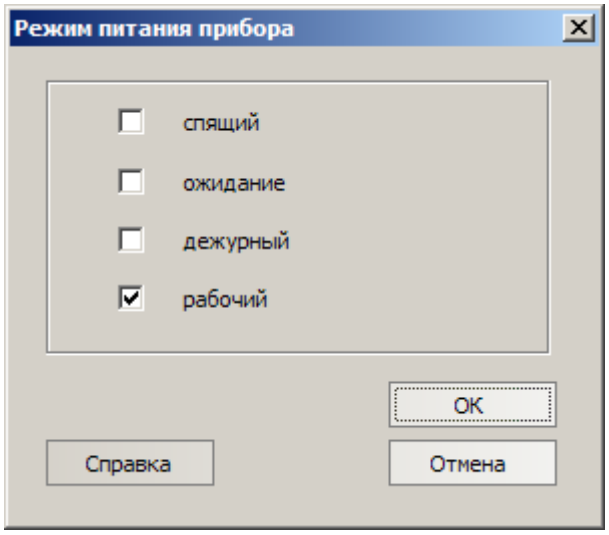


Рис. 3-5 Диалоговое окно «Режим питания работы»

2) В открывшемся окне (Рис. 3-5) выберите позицию переключателя, соответствующую необходимому режиму. При открытии данного диалога автоматически считывается текущее состояние питания прибора.

3) Для сохранения изменённого режима питания нажмите кнопку **OK**.

4) Для выхода из окна ***Режим питания прибора*** без изменения режима нажмите кнопку **Отмена**.

5) Для вызова справки окна ***Режим питания прибора*** нажмите кнопку **Справка**.

Доступны четыре режима питания приборов: ожидание, дежурный, рабочий и спящий.

Режим питания выбирается в зависимости от выполняемой задачи:

- режим «Рабочий» используется при выполнении измерений;
- режим «Ожидание» используется при сервисном обслуживании, а также является для некоторых типов приборов основным режимом между измерениями (подробнее см. *Руководство по эксплуатации* на соответствующий прибор);
- режим «Дежурный» используется для снижения энергопотребления при длительных перерывах между измерениями;
- режим «Спящий» используется для максимально возможного снижения энергопотребления при длительных перерывах в работе прибора.

⇨ **Некоторые типы приборов могут не поддерживать все четыре режима питания. Подробнее см. *Руководство по эксплуатации* на соответствующий прибор.**

3.3 Информация о приборе

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет посмотреть сведения о приборе, подключенном к программе.

Для этого выполните следующее:

1) В главном окне программы «СпектраЛЮМ» нажмите на иконку **Информация о приборе**  на панели инструментов или в главном меню программы выберите пункт **Прибор/Информация о приборе**.

2) Откроется окно (Рис. 3-3), содержащее основную информацию о приборе:

   - Тип прибора;
   - Серийный номер;
   - Тип источника излучения;
   - Тип приемника излучения;
   - Тип светоделителя;
   - Время наработки лампы (кроме моделей «ИнфраЛЮМ ФТ-02», «ИнфраЛЮМ ФТ-08», «ИнфраЛЮМ ФТ-08М»);
   - Рабочий диапазон температур;
   - Спектральный диапазон;
   - Диапазон длины кюветы (только для «ИнфраЛЮМ ФТ-40» и «ИнфраЛЮМ ФТ-12» с просыпным устройством);
   - Версия встроенного программного обеспечения;

- Версия приборного драйвера;
- Влажность в интерферометре.

3) Для вызова справки данного окна нажмите кнопку **Справка**.

4) Для выхода из окна нажмите кнопку **OK** или крестик в верхнем правом углу.

3.4 Работа с приводами

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет управлять подвижными элементами (приводами) приборов типа «ИнфраЛЮМ».

Пункт доступен только при подключенном приборе, имеющем приводы (ФТ-08, ФТ-08М, ФТ-10 с автоматическим самплером, ФТ-12 с автоматическим самплером, ФТ-12 с просыпным устройством, ФТ-40, ФТ-20). Для приборов ФТ-02, ФТ-10 с ручным самплером, ФТ-12 с ручным самплером – пункт не активен.

Данная операция возможна только при рабочем режиме питания спектрометра.

Для входа в окно управления приводами выберите пункт в главном меню **Прибор/Управление приводами**.

В зависимости от типа подключенного прибора, открывается свое диалоговое окно.

3.4.1 Работа с приводом приборов «ИнфраЛЮМ ФТ-08» и «ИнфраЛЮМ ФТ-08М»

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет управлять колесом эталонов приборов «ИнфраЛЮМ ФТ-08» и «ИнфраЛЮМ ФТ-08М», т.е. помещать в световой поток прибора проверочные образцы, установленные в данном колесе.

Возможны три положения колеса эталонов:

- обычное измерение. Это штатное положение колеса при обычной работе спектрометра;
- контрольный образец 1 (в световой поток вводится проверочный образец – поставляется по специальному заказу). Может быть использован при проверках работоспособности спектрометра;
- контрольный образец 2 (в световой поток вводится проверочный образец – пленка полистирола). Используется при проверке работоспособности спектрометра.

1) Для входа в окно управления приводами в главном меню программы выберите пункт **Прибор/Управление приводами** (Рис. 3-6).

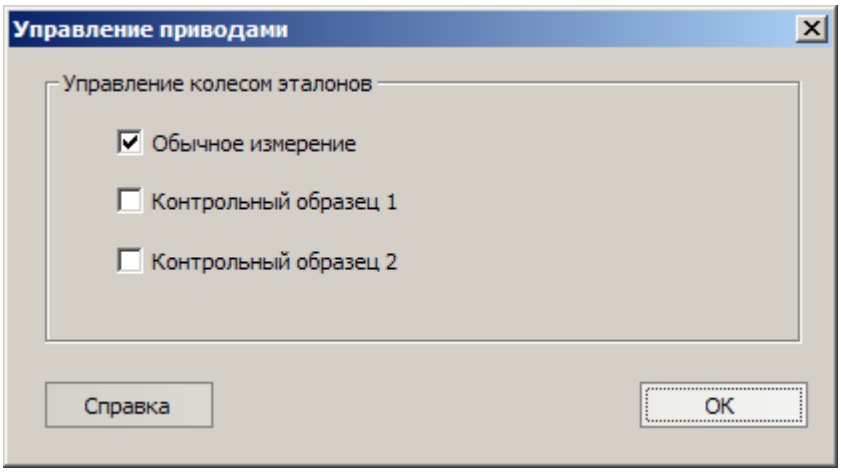


Рис. 3-6 Диалоговое окно «Управление приводами» при работе с приборами «ИнфраЛЮМ ФТ-08» и «ИнфраЛЮМ ФТ-08М»

2) Для того чтобы колесо встало в определенное положение, установите галочку напротив требуемого положения. При открытии диалогового окна по умолчанию стоит галочка напротив действительного положения колеса.

3) Для вызова справки диалогового окна ***Управление приводами*** нажмите кнопку **Справка**.

4) Для выхода из окна с сохраненными настройками нажмите кнопку **OK**.

3.4.2 Работа с приводами приборов «ИнфраЛЮМ ФТ-10» и «ИнфраЛЮМ ФТ-12»

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет управлять автосамплером приборов «ИнфраЛЮМ ФТ-10» и «ИнфраЛЮМ ФТ-12» (устройством перемещения кюветы (с анализируемым образцом) в световом потоке), т.е. устанавливать в световой поток различные части кюветы с образцом, либо устанавливать вместо кюветы эталон.

Возможны следующие положения автосамплера:

- положение эталон (в световой поток вводится эталонная пластина). Это штатное положение автосамплера при измерении фонового спектра;
- положения 1-8 (в световой поток вводится кювета (с образцом) в одном из возможных положений кюветы). Может применяться при измерении спектров образца;
- положение выгрузки кюветы (кювета с образцом выводится из спектрометра, в световой поток вводится эталонная пластина). Используется при замене анализируемого образца в кювете.

С помощью программы «СпектраЛЮМ» можно также заблокировать работу кнопки выгрузки кюветы, расположенной на приборах «ИнфраЛЮМ ФТ-10» и «ИнфраЛЮМ ФТ-12», что позволяет управлять автосамплером только из программы.

1) Для входа в окно управления приводами в главном меню программы выберите пункт **Прибор/Управление приводами**. Откроется диалоговое окно ***Управление приводами*** (Рис. 3-7).

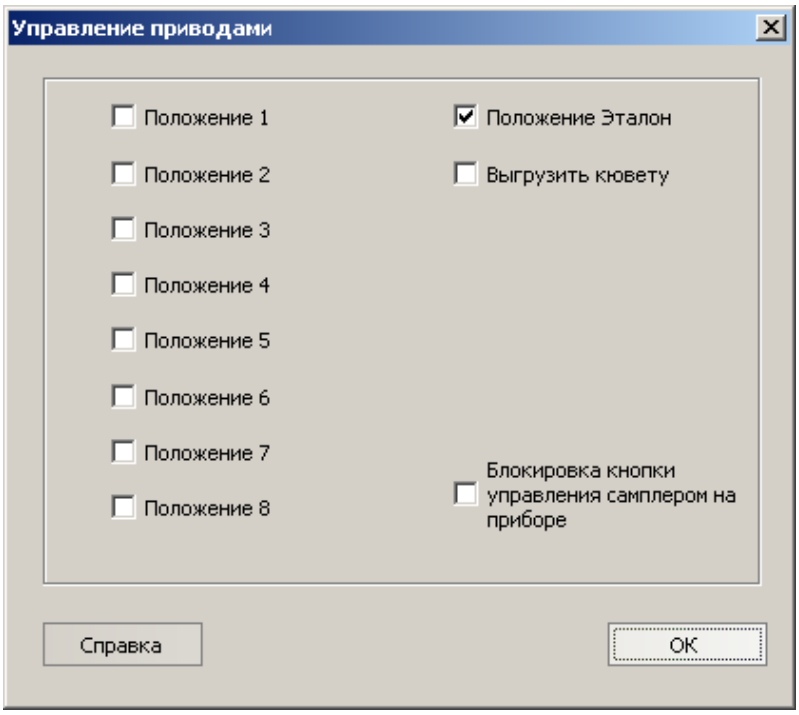


Рис. 3-7 Диалоговое окно «Управление приводами» при работе с приборами «ИнфраЛЮМ ФТ-10» и «ИнфраЛЮМ ФТ-12»

2) Для того чтобы кювета встала в определенное положение, установите галочку напротив требуемого положения. При открытии диалогового окна (Рис. 3-7) по умолчанию стоит галочка напротив действительного положения самплера.

3) Для блокировки кнопки управления самплером на приборе установите галочку напротив требуемого положения.

4) Для вызова справки диалогового окна ***Управление приводами*** нажмите кнопку **Справка**.

5) Для выхода из окна с сохраненными настройками нажмите кнопку **OK**.

3.4.3 Работа с приводами прибора «ИнфраЛЮМ ФТ-20»

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет управлять кнопкой щупа прибора «ИнфраЛЮМ ФТ-20» (устройство (кнопка), использующееся для запуска измерений без применения программы СпектраЛЮМ).

Таким образом, управлять измерениями, проводимыми с помощью прибора «ИнфраЛЮМ ФТ-20», можно с помощью кнопки щупа.

Для того чтобы измерение начиналось нажатием на кнопку щупа, необходимо сделать следующее:

1) Для входа в окно управления приводами в главном меню программы выберите пункт **Прибор/Управление приводами**. Откроется диалоговое окно ***Управление приводами*** (Рис. 3-8).

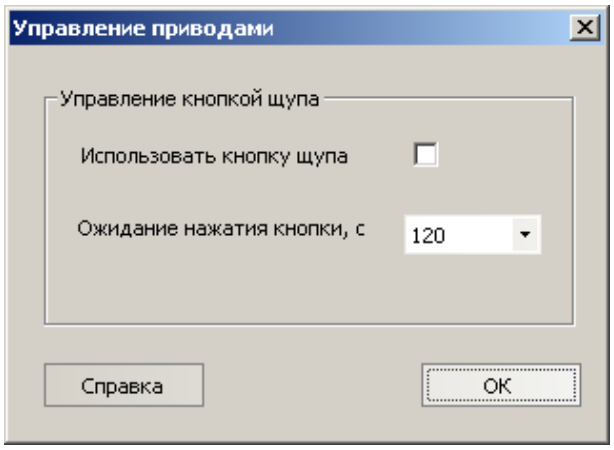


Рис. 3-8 Диалоговое окно «Управление приводами» при работе с прибором «ИнфраЛЮМ ФТ-20»

2) Для использования кнопки щупа установите галочку напротив положения **Управление кнопкой щупа**.

3) С помощью счетчика задайте время ожидания нажатия кнопки для запуска начала следующего измерения (т.е. время, через которое мы можем нажатием кнопки щупа запустить повторное измерение). По умолчанию повторное нажатие кнопки щупа для проведения измерения возможно только по истечении 120с.

4) Для вызова справки диалогового окна ***Управление приводами*** нажмите кнопку **Справка**.

5) Для выхода из окна с сохраненными настройками нажмите кнопку **OK**.

3.4.4 Работа с приводами прибора «ИнфраЛЮМ ФТ-40» и «ИнфраЛЮМ ФТ-12» с просыпным устройством

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет управлять:

- колесом эталонов (т.е. помещать в световой поток прибора проверочные образцы, установленные в колесе);

- просыпным устройством (устройством, обеспечивающим заполнение и освобождение измерительной кюветы);
- перестройкой длины оптической кюветы.

1) Для входа в окно управления приводами в главном меню программы выберите пункт **Прибор/Управление приводами** (Рис. 3-9).

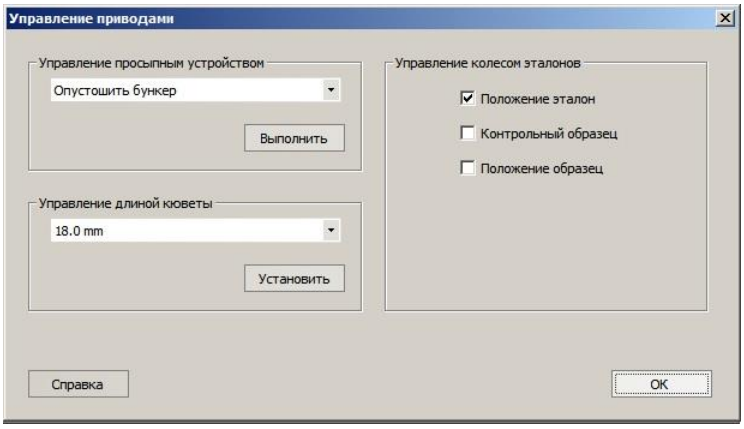


Рис. 3-9 Диалоговое окно «Управление приводами» при работе с приборами «ИнфраЛЮМ ФТ-40» и «ИнфраЛЮМ ФТ-12» с просыпным устройством

2) Для того чтобы колесо встало в определенное положение, установите галочку напротив требуемого положения. При открытии диалогового окна по умолчанию стоит галочка напротив действительного положения колеса.

Возможна установка следующих положений колеса эталонов:

-положение эталон (в световой поток вводится эталонная пластина). Это штатное положение колеса при измерении фонового спектра;

-положение контрольный образец (в световой поток вводится контрольный образец). Применяется при проверке работоспособности спектрометра;

-положение образец. Используется при измерении спектров анализируемых образцов.

3) Для управления просыпным устройством выберите соответствующую команду из выпадающего списка секции **Управление просыпным устройством**.

4) Нажмите кнопку **Выполнить**.

Возможно выполнение следующих операций с просыпным устройством:

-опустошить бункер (выполняется для полной выгрузки анализируемого образца из прибора);

-опустошить кювету (выполняется для выгрузки анализируемого образца из кюветы);

-заполнить кювету (выполняется для заполнения кюветы анализируемым образцом);

-выполнить пересыпку (выполняется для выгрузки образца из кюветы с последующим заполнением кюветы следующей порцией того же образца).

5) Для изменения длины кюветы выберите с помощью счетчика в секции **Управление длиной кюветы** соответствующую длину:

-кювета может перестраиваться в следующем диапазоне: 6…35 мм.

6) Нажмите кнопку **Установить**.

7) Для вызова справки диалогового окна ***Управление приводами*** нажмите кнопку **Справка**.

8) Для выхода из окна с сохраненными настройками нажмите кнопку **OK**.

3.5 Настройки спектрометра

Данные настройки позволяют изменить характеристики прибора, что может повлечь за собой изменение вида получаемых спектров.

Изменять настройки рекомендуется только, соблюдая четкие инструкции, изложенные в «Руководстве по эксплуатации» на соответствующий прибор, либо по указаниям представителя ООО «ЛММ».

1) Для изменения настроек спектрометра в главном меню программы выберите пункт **Прибор/Настройки спектрометра**. Откроется диалоговое окно ***Настройки спектрометра*** (Рис. 3-10).

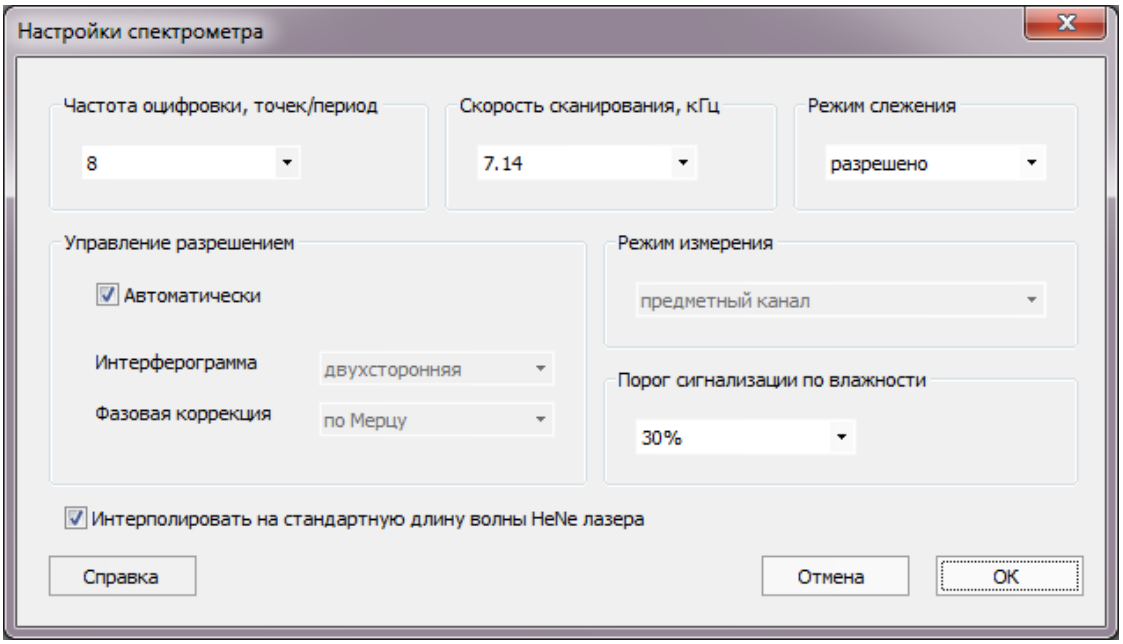


Рис. 3-10 Диалоговое окно «Настройки спектрометра»

2) В диалоговом окне ***Настройки спектрометра*** (Рис. 3-10) можно изменить следующие параметры:

- Частота оцифровки (в точках на период лазерной синусоиды) регистрируемой интерферограммы. Для спектрометров типа «ИнфраЛЮМ» оптимальным является значение 8;

- Скорость сканирования подвижного элемента (светоделителя). Для спектрометров типа «ИнфраЛЮМ» устанавливают оптимальное значение скорости, которое указано в формуляре на соответствующий спектрометр. Если в формуляре не указано конкретное значение скорости, оптимальным считается значение 7,14 кГц;

- Режим слежения. Это режим включения или выключения автокалибровки коэффициентов усиления полезного сигнала. При обычных измерениях режим слежения должен быть включен;

- Управление разрешением. В режиме **Автоматически** (установлена галочка): программа устанавливает оптимальные вид интерферограммы и тип фазовой коррекции в зависимости от заданного оператором спектрального разрешения. При снятой галочке **Автоматически,** вид интерферограммы и тип фазовой коррекции необходимо устанавливать оператору;

- Интерферограмма. При регистрации спектров с разрешением не выше 1 $см^{-1}$ рекомендуется устанавливать вид интерферограммы

«Двухсторонняя» и выбирать коррекцию фазы «По модулю». При работе с разрешением выше 1 $см^{-1}$ рекомендуется применять вид интерферограммы «Односторонняя». При этом фазовую коррекцию устанавливают «По Мерцу»;

- Фазовая коррекция. Алгоритм фазовой коррекции «по модулю» применяется при регистрации двусторонних интерферограмм для компенсации возможных фазовых искажений. Методы фазовой коррекции «по Мерцу» и «по Форману» применяются для односторонних интерферограмм при недостатке фазовой информации. Например, при использовании метода «по Мерцу» интерполируется фазовая информация о втором «крыле» односторонней интерферограммы, и поэтому метод дает более точный результат, если фазовая компонента спектра меняется плавно. Для двусторонних интерферограмм применение фазовой коррекции по методу Мерца не дает никаких преимуществ относительно коррекции по модулю. Более того, может привести к незначительному ухудшению качества скорректированного спектра относительно истинного, вследствие использования дополнительной цифровой обработки данных;

- Интерполировать на стандартную длину волны лазера. Установка контрольной отметки включает (выключает) режим корректировки спектральных данных на нормированное значение частоты HeNe-лазера, равное 0,6328 мкм;

- Режим измерения. Некоторые приборы типа «ИнфраЛЮМ» помимо основного (предметного) канала имеют опорный канал для повышения стабильности получаемых результатов. В таком случае оператор может выбрать режим измерения, при котором будет регистрироваться сигнал только предметного канала, либо только опорного канала, либо предметного с нормировкой на опорный.

- Порог сигнализации по влажности. Секция активна только для приборов «ИнфраЛЮМ ФТ-08», «ИнфраЛЮМ ФТ-08М», «ИнфраЛЮМ ФТ-40» и «ИнфраЛЮМ ФТ-12» с просыпным устройством. Если значение влажности воздуха под гермокожухом интерферометра превысит установленный порог, то при входе в программу «СпектраЛЮМ» будет выводиться сообщение «Влажность в интерферометре превышает заданную норму. Замените влагопоглощающий компонент в осушительном патроне».

3) Для выхода из окна ***Настройки спектрометра*** с сохранением введенных изменений нажмите кнопку **OK**.

4) Для выхода из окна ***Настройки спектрометра*** без каких-либо изменений нажмите кнопку **Отмена**.

5) Для вызова справки окна ***Настройки спектрометра*** нажмите кнопку **Справка**.

4 Регистрация спектров

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет регистрировать:

- Фоновые спектры (см.п.4.1);
- Спектры пропускания, поглощения, отражения, Lg (1/R), Кубелка-Мунка (см.п.4.2);
- Интерферограммы (см.п.4.3).

В спектрометрах типа «ИнфраЛЮМ» используется однолучевая схема измерения, поэтому необходимо предварительно регистрировать фоновый спектр (спектр сравнения), а затем выбрать необходимый режим регистрации спектра исследуемого образца.

Для приборов типа «ИнфраЛЮМ ФТ-10», «ИнфраЛЮМ ФТ-12», «ИнфраЛЮМ ФТ-12» с просыпным устройством, «ИнфраЛЮМ ФТ-20», «ИнфраЛЮМ ФТ-40», имеющих вспомогательный опорный канал измерения, программа «СпектраЛЮМ» позволяет проводить регистрации спектров, как основного (предметного) канала, так и опорного, а также предметного канала с нормировкой на опорный. Выбор канала измерения осуществляется в ***Настройках спектрометра*** (см.п.3.5).

Для того чтобы приступить к измерениям, необходимо подготовить спектрометр в соответствии с *Руководством по эксплуатации* на соответствующий прибор.

Для корректной регистрации спектров следует установить необходимые параметры работы спектрометра, оптимальные значения которых рекомендованы в *Руководстве по эксплуатации* на соответствующий прибор, а также установить параметры регистрации спектров.

Установка параметров работы спектрометра изложена в п.3.5, а параметров регистрации спектра в п.п.4.1-4.3.

4.1 Регистрация фонового спектра

Регистрация фоновых спектров является необходимой операцией перед регистрацией спектра анализируемой пробы для всех приборов с однолучевой схемой измерения.

Фоновый спектр регистрируется при установке в кюветное отделение спектрометра кюветы без анализируемого вещества. Кювета может быть пустой, либо заполнена растворителем, в котором будет в последствии растворена анализируемая проба.

В программе «СпектраЛЮМ» реализованы два режима измерения фонового спектра:

- единичное измерение фонового спектра;
- циклическое измерение фоновых спектров.

4.1.1 Единичное измерение фонового спектра

Для регистрации фонового спектра необходимо выполнить следующее:

1) Установите пустую кювету или кювету с растворителем в кюветное отделение.
2) Убедитесь, что заданы необходимые настройки спектрометра.
3) Нажмите на иконку **Регистрация фонового спектра**  на панели инструментов или выберите в главном меню пункт **Регистрация/Фоновый спектр**. В открывшемся окне ***Параметры регистрации фонового спектра*** (Рис. 4-1) белым цветом выделены текстовые поля и списки, соответствующие тем параметрам регистрации, которые необходимо установить.

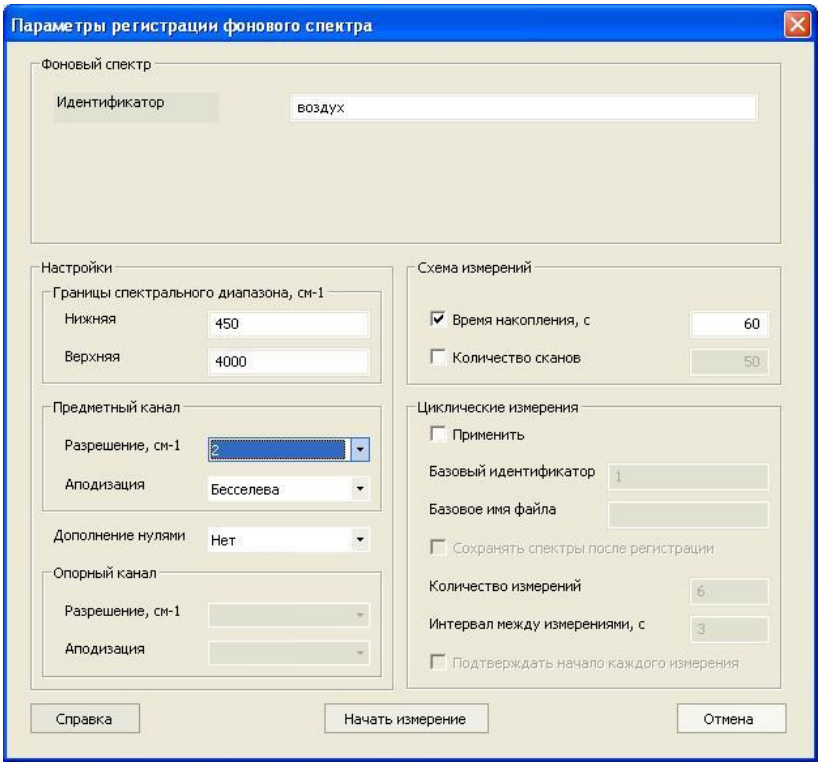


Рис. 4-1 Диалоговое окно «Параметры регистрации фонового спектра»

4) В текстовом окне **Идентификатор** введите необходимые комментарии.

5) Для выполнения измерения фонового спектра необходимо выбрать ряд настроек регистрации:

- Спектральный диапазон. Рабочий спектральный диапазон указан в Руководстве по эксплуатации конкретного типа спектрометра. Можно ограничить регистрацию спектра в более узком диапазоне в соответствии с интересующей спектральной областью проводимого анализа;

- Разрешение. Разрешение регистрируемого спектра подбирается в зависимости от типа исследуемого образца. Для образцов, обладающих относительно широкими пиками поглощения, не имеет смысла регистрировать спектр с высоким разрешением, и, напротив, для образцов с более узкими полосами поглощения регистрация спектра с низким разрешением приведет к потере спектральной информации. Для каждой модификации спектрометров ИнфраЛЮМ предлагаемый список разрешений будет индивидуален (см. Руководство по эксплуатации на соответствующий прибор);

- Тип аподизации. Это процедура коррекции зарегистрированной интерферограммы. Возможные типы применяемой аподизации:

Бесселева, Н-Б Сильная, Н-Б Средняя, Н-Б Слабая, Прямоугольная. Функция аподизации выбирается, исходя из поставленной задачи. Если требуется поиск интересующих пиков при высоких разрешениях и без необходимости подавления шумов, то используется настройка «Слабая аподизация Нортона–Бира» (Н-Б Слабая) либо «Прямоугольная аподизация». Прямоугольная аподизация практически не подавляет вторичных экстремумов интерферограммы, что приводит к сильно зашумленному спектру. Если предъявляются высокие требования к отношению сигнал/шум, и допустимо искажение контура полосы поглощения, то выбирается настройка «Сильная аподизация Нортона – Бира» (Н-Б Сильная) либо «Средняя аподизация Нортона – Бира» (Н-Б Средняя). На практике часто распространено применение Бесселевой функции аподизации, обеспечивающей минимум искажений полезного сигнала;

- Фактор заполнения интерферограммы «нулями». Это процедура дополнения краев интерферограммы нулями, т.е. интерполяция интерферограммы, в результате чего повышается точность обработки данных. Максимальное значение фактора заполнения нулями ограничено разрешением спектра;

- Количество сканов/время накопления. Один скан - это однократная запись интерферограммы. Время накопления (время выполнения измерений) зависит от количества установленных сканов, а также выбранного разрешения и скорости сканирования. Отношение сигнал/шум увеличивается пропорционально квадратному корню из числа сканов, однако увеличение числа сканов приводит к увеличению времени измерения. Поэтому число сканов (время накопления) выбирают в зависимости от требуемой задачи проводимого анализа, соотнося зашумленность спектра с временем измерения.

6) Нажмите кнопку **Начать измерение**. При нажатии данной кнопки появится диалоговое окно ***Регистрация*** (Рис. 4-2) с прогресс-баром и счетчиком оставшихся сканов. Измерения начинаются сразу при открытии данного окна.

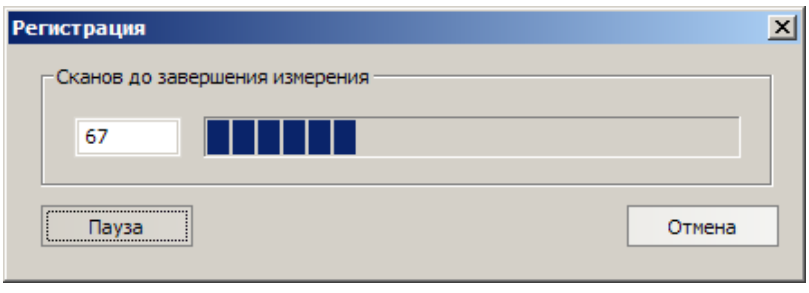


Рис. 4-2 Диалоговое окно «Регистрация»

Если при сканировании будет нажата кнопка **Пауза**, то сканирование будет приостановлено. Нажав кнопку **Продолжить** сканирование будет продолжено.

При нажатии кнопки **Отмена** появится сообщение (Рис. 4-3). При нажатии кнопки **Да** откроется диалоговое окно ***Параметры регистрации фонового спектра*** (Рис. 4-1). При нажатии кнопки **Нет** сканирование будет продолжено.

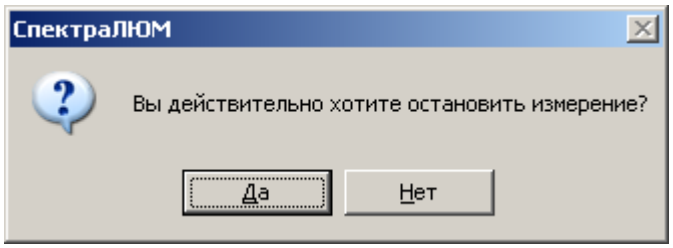


Рис. 4-3 Сообщение о приостановке измерения

7) По окончании регистрации появляется главное окно программы с зарегистрированным спектром(Рис. 4-4).

Если подключенный спектрометр снабжен опорным каналом, то можно регистрировать фоновые спектры:

- предметного канала;
- опорного канала;
- предметного канала с нормировкой на опорный.

Регистрируемый тип фонового спектра зависит от выбранного режима регистрации в настройках спектрометра.

В зависимости от выбранного режима, в окне ***Параметры регистрации фонового спектра*** (Рис. 4-1) некоторые секции могут быть неактивны.

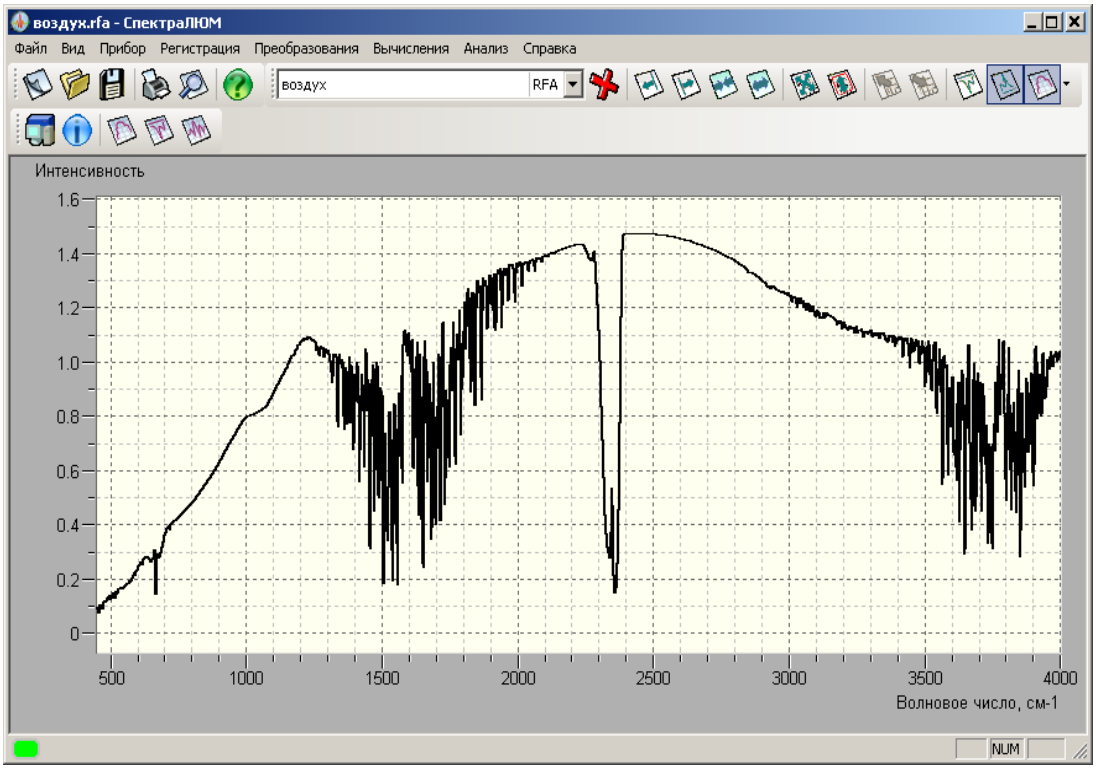


Рис. 4-4 Главное окно программы. Зарегистрированный фоновый спектр

4.1.2 Циклическое измерение фоновых спектров

Циклические измерения фоновых спектров – это измерения, которые проводятся в автоматическом режиме с заданной периодичностью.
В режиме циклической записи можно отображать все зарегистрированные спектры на экране, а можно только последний зарегистрированный спектр. Для отображения только последнего спектра необходимо установить галочку в строке **Только активный спектр** в главном меню программы, выбрав пункт **Вид/Только активный спектр**. Для отображения всех спектров необходимо повторно выбрать пункт меню **Вид/Только активный спектр** для снятия установленной галочки.

1) Повторите п.п.1-5, описанные выше для единичного измерения фонового спектра.

2) Установите галочку в окне **Применить** (Рис. 4-5) секции **Циклические измерения** диалогового окна ***Параметры регистрации фонового спектра***.

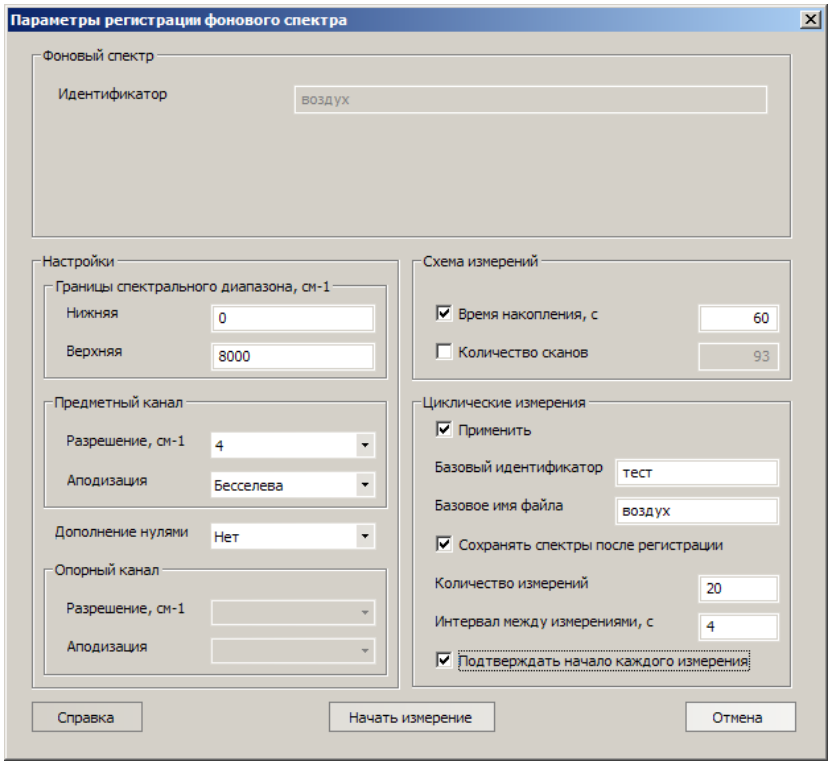


Рис. 4-5 Диалоговое окно «Параметры регистрации фонового спектра». Циклические измерения

3) Для выполнения циклического измерения фоновых спектров необходимо задать ряд параметров регистрации:

- базовый идентификатор (идентификатор спектров, комментарии к спектру);
- количество измерений (одно измерение – это регистрация одного спектра по заданному количеству сканов);
- интервал между измерениями (это промежуток времени от завершения одного измерения и до запуска следующего).

4) Если необходимо подтверждение начала каждого измерения, то установите галочку в соответствующее окно. Таким образом, первое измерение будет проводиться, как при единичном измерении (без подтверждения оператором). По его окончании будет выводиться спектр, а через указанный ранее оператором интервал, появляться окно ***Регистрация*** с кнопками **Продолжить** и **Отмена** (Рис. 4-6). Для начала второго измерения в цикле требуется подтверждение оператором (нажатие кнопки **Продолжить**). Если не была установлена метка подтверждения начала каждого измерения, то все циклические измерения проводятся без участия оператора (Рис. 4-2).

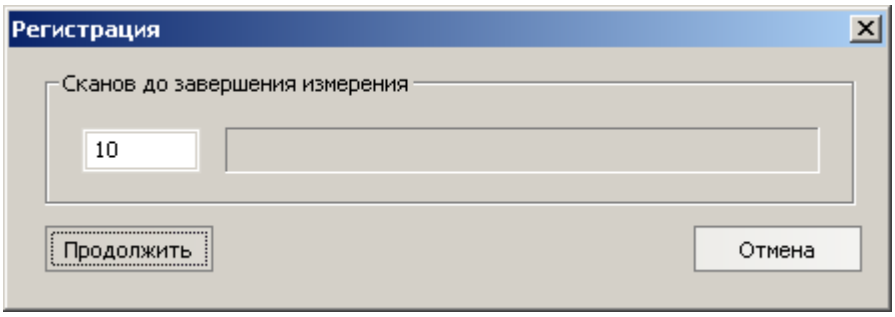


Рис. 4-6 Диалоговое окно «Регистрация» при циклических измерениях с подтверждением начала каждого измерения

5) Для того чтобы спектры после циклической регистрации автоматически сохранялись установите галочку в строке **Сохранять спектры после регистрации** (Рис. 4-5).

6) В строке **Базовое имя файла** (Рис. 4-5) задайте имя (это имя, под которым будет сохранена циклическая запись спектра).

7) Нажмите кнопку **Начать измерение** (Рис. 4-5).

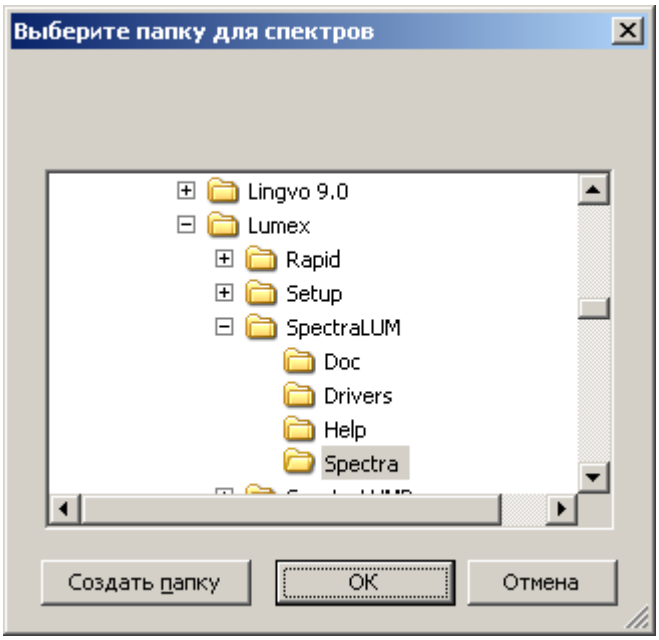


Рис. 4-7 Диалоговое окно «Выберите папку для спектров»

8) В открывшемся диалоговом окне (Рис. 4-7) выберите папку для сохранения спектров.

9) Если в выбранной папке уже существуют указанные файлы, то при нажатии кнопки **OK** появится предупреждающее сообщение (Рис. 4-8). При нажатии кнопки **Да** появится окно ***Регистрация***, при этом существующие файлы спектров с указанным базовым име-

нем будут изменены на новые файлы с тем же именем. При нажатии кнопки **Нет** откроется окно ***Выберите папку для спектров*** (Рис. 4-7).

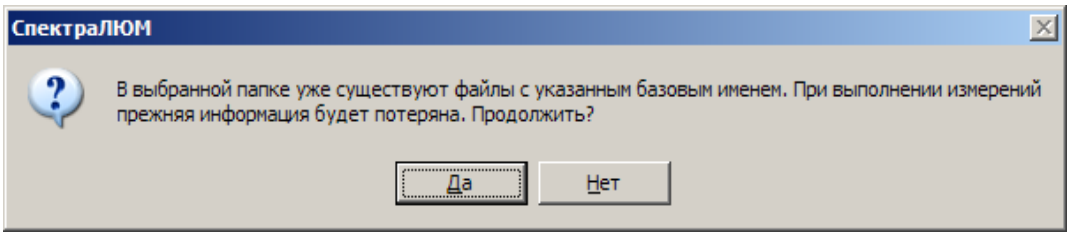


Рис. 4-8 Предупреждающее сообщение о том, что файлы с указанным базовым именем уже существуют.

10) Нажмите кнопку **OK** (Рис. 4-7). Откроется диалоговое окно ***Регистрация*** (Рис. 4-2) или (Рис. 4-6).

11) Для возврата в окно ***Параметры регистрации фонового спектра*** нажмите кнопку **Отмена** (Рис. 4-7).

12) Для выхода из диалогового окна ***Параметры регистрации фонового спектра*** (Рис. 4-5) нажмите кнопку **Отмена**.

13) Для вызова справки по окну ***Параметры регистрации фонового спектра*** (Рис. 4-5) нажмите кнопку **Справка**.

4.2 Регистрация спектра

Данная функция позволяет регистрировать спектры пропускания, поглощения, отражения (R), lg (1/R), Кубелки – Мунка анализируемой пробы.

В спектрометрах типа «ИнфраЛЮМ» используется однолучевая схема, поэтому спектр может быть зарегистрирован только после регистрации фонового спектра, либо с использованием выбранного фонового спектра из файла.

Данные спектры регистрируются при установке в кюветное отделение спектрометра кюветы с анализируемым веществом.

Регистрация спектра доступна только при подключенном приборе, находящемся в рабочем режиме питания.

В программе «СпектраЛЮМ» реализованы два режима измерения спектра:

- единичное измерение спектра;
- циклическое измерение спектров.

4.2.1 Единичное измерение спектра

Для регистрации спектра необходимо выполнить следующее:

1) Установите кювету с анализируемым веществом в кюветное отделение.

2) Убедитесь, что заданы необходимые настройки спектрометра.

3) Нажмите на иконку **Регистрация спектра**  на панели инструментов или выберите в главном меню пункт **Регистрация/Спектр**. Откроется диалоговое окно ***Параметры регистрации спектра*** (Рис. 4-9).

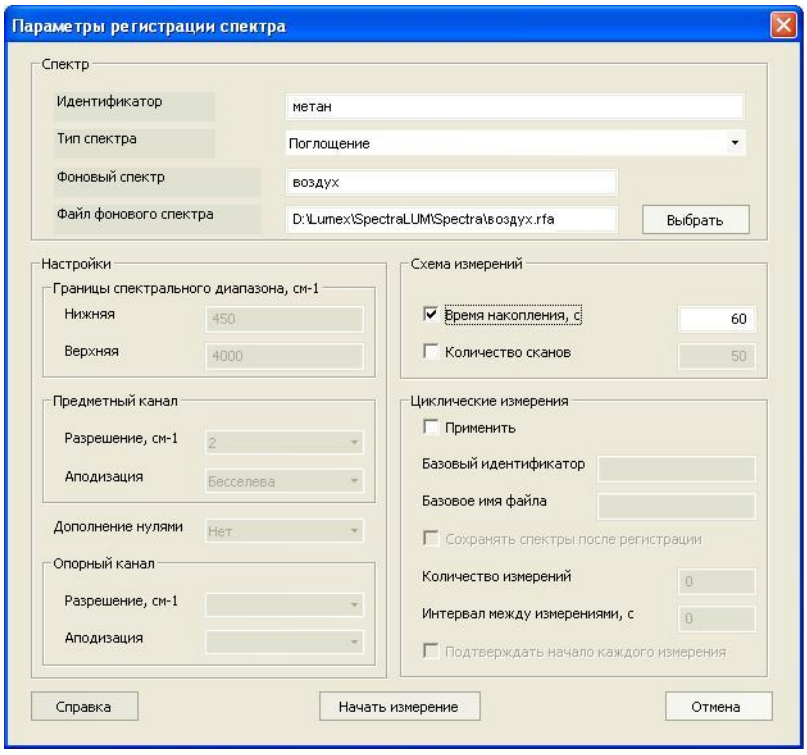


Рис. 4-9 Диалоговое окно «Параметры регистрации спектра»

4) В текстовом окне **Идентификатор** введите необходимые комментарии.

5) Измерение спектра на приборе типа «ИнфраЛЮМ» возможно только относительно фонового спектра, зарегистрированного на этом же приборе. Если отсутствует фоновый спектр, то напротив текстового окна **Файл фонового спектра** нажмите кнопку **Выбрать**. Откроется стандартное окно открытия файла (Рис. 4-10).

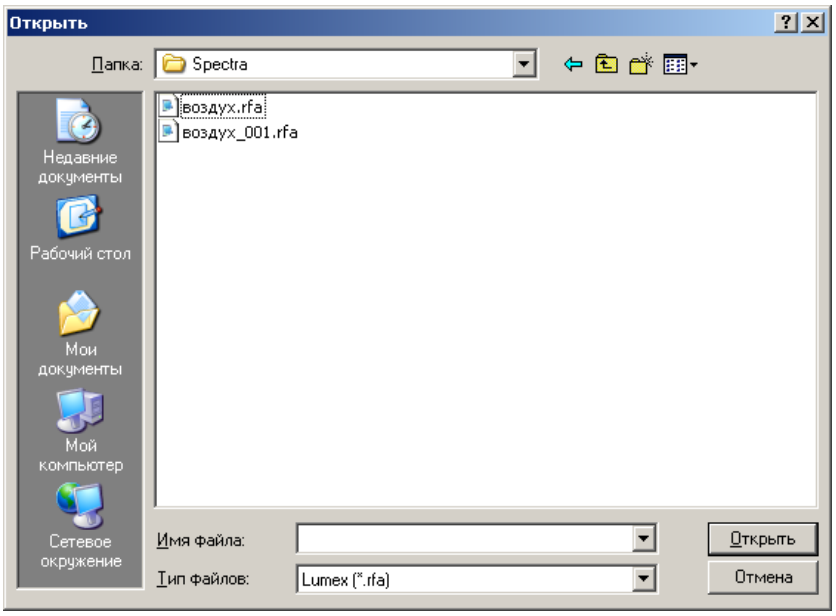


Рис. 4-10 Стандартное окно открытия файла

6) В открывшемся стандартном окне поиска файла найдите и выделите необходимый фоновый спектр и нажмите кнопку **Открыть**. В строке **Фоновый спектр** и **Файл фонового спектра** (Рис. 4-9) будут прописаны соответствующие данные. Программа не позволяет использовать фоновый спектр, зарегистрированный на приборе с другим серийным номером.

7) Для выполнения измерения спектра необходимо выбрать ряд настроек регистрации (Рис. 4-9):

- Тип спектра. Возможна регистрация спектров пропускания, поглощения. В случае использования приставок появляется возможность регистрации спектров отражения R, Lg(1/R), Кубелка-Мунка;

- Количество сканов/время накопления.

Прочие параметры регистрации автоматически устанавливаются такими же, как при регистрации выбранного фонового спектра.

8) Нажмите кнопку **Начать измерение**. При нажатии данной кнопки появится диалоговое окно ***Регистрация*** (Рис. 4-2) с прогресс-баром и счетчиком оставшихся сканов. Измерения начинаются сразу при открытии данного окна.

9) Если при сканировании будет нажата кнопка **Пауза** (Рис. 4-2), то сканирование будет приостановлено. Нажав кнопку **Продолжить** сканирование будет продолжено.

10) При нажатии кнопки **Отмена** (Рис. 4-2) появится сообщение (Рис. 4-3). При нажатии кнопки **Да** (Рис. 4-3) откроется диалоговое окно ***Параметры регистрации фонового спектра*** (Рис. 4-1). При нажатии кнопки **Нет** (Рис. 4-3) сканирование будет продолжено.

11) По окончании регистрации откроется главное окно программы с зарегистрированным спектром (Рис. 4-11).

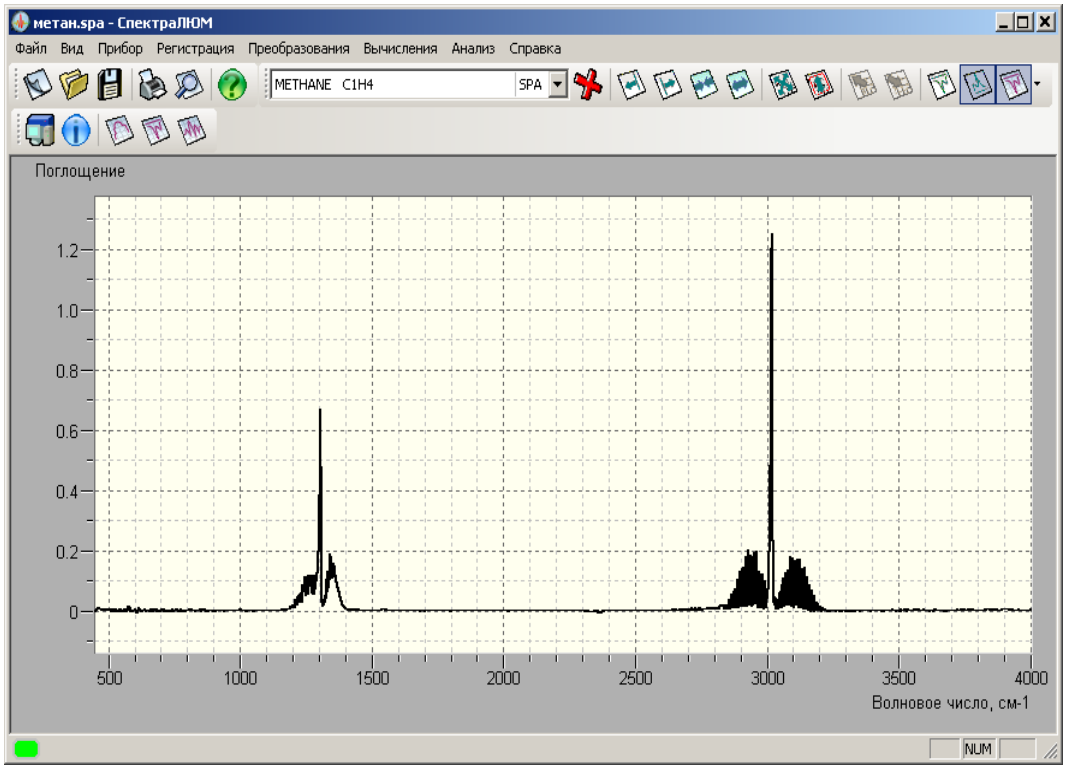


Рис. 4-11 Главное окно программы. Зарегистрированный спектр

4.2.2 Циклическое измерение спектров

Циклические измерения спектров – это измерения, которые проводятся в автоматическом режиме с заданной периодичностью.

В режиме циклической записи можно отображать все зарегистрированные спектры на экране, а можно только последний зарегистрированный спектр. Для отображения только последнего спектра необходимо установить галочку в строке **Только активный спектр** в главном меню программы, выбрав пункт **Вид/Только активный спектр**. Для отображения всех спектров необходимо повторно выбрать пункт меню **Вид/Только активный спектр** для снятия установленной галочки.

1) Повторите п.п.1-5, описанные выше для единичного измерения спектра.

2) Установите галочку в окне **Применить** секции **Циклические измерения** диалогового окна ***Параметры регистрации спектра*** (Рис. 4-9).

3) Для выполнения циклического измерения спектров необходимо задать ряд параметров регистрации:

- Тип спектра (возможна регистрация спектров пропускания, поглощения; в случае использования некоторых приставок появляется возможность регистрации спектров отражения (R), Lg(1/R), Кубелка-Мунка);

- Базовый идентификатор (идентификатор спектров, комментарии к спектру);

- Количество измерений (одно измерение – это регистрация одного спектра по заданному количеству сканов);

- Интервал между измерениями.

4) Если необходимо подтверждение начала каждого измерения, то установите галочку в текстовой строке **Подтверждать начало каждого измерения** (Рис. 4-9). Таким образом, первое измерение будет проводиться, как при единичном измерении (без подтверждения оператором). По его окончании будет выводиться спектр, а через указанный ранее оператором интервал, появляться окно ***Регистрация*** (Рис. 4-6) с кнопками **Продолжить** и **Отмена**. Для начала второго измерения цикла требуется подтверждение оператором (нажатие кнопки **Продолжить**). Если не была установлена метка подтверждения начала каждого измерения, то все циклические измерения проводятся без участия оператора.

5) Для того чтобы спектры после циклической регистрации автоматически сохранялись установите галочку в окне ***Сохранять спектры после регистрации*** (Рис. 4-9).

6) В строке **Базовое имя файла** (Рис. 4-9) задайте имя (это имя, под которым будет сохранена циклическая запись спектра).

7) Нажмите кнопку **Начать измерение** (Рис. 4-9).

8) В открывшемся диалоговом окне (Рис. 4-7) выберите папку для сохранения спектров.

9) Нажмите кнопку **OK** (Рис. 4-7). Откроется диалоговое окно ***Регистрация*** (Рис. 4-2) или (Рис. 4-6)

10) Для возврата в окно ***Параметры регистрации спектра*** нажмите кнопку **Отмена** (Рис. 4-2) или (Рис. 4-6).

11) Для выхода из диалогового окна ***Параметры регистрации спектра*** (Рис. 4-9) нажмите кнопку **Отмена**.

12) Для вызова справки по окну ***Параметры регистрации спектра*** (Рис. 4-9) нажмите кнопку **Справка**.

4.3 Регистрация интерферограммы

Данная функция позволяет регистрировать интерферограммы, которые являются исходными данными для вычисления спектров.

Возможны два режима измерения интерферограммы:

- единичное измерение интерферограммы;
- циклическое измерение интерферограмм.

4.3.1 Единичное измерение интерферограммы

Для измерения интерферограммы необходимо выполнить следующее:

1) Убедитесь, что заданы необходимые настройки спектрометра.

2) Нажмите кнопку **Регистрация интерферограммы**  на панели инструментов или выберите в главном меню программы пункт **Ре-**

гистрация/Интерферограмма. Откроется диалоговое окно ***Параметры регистрации интерферограммы*** (Рис. 4-12).

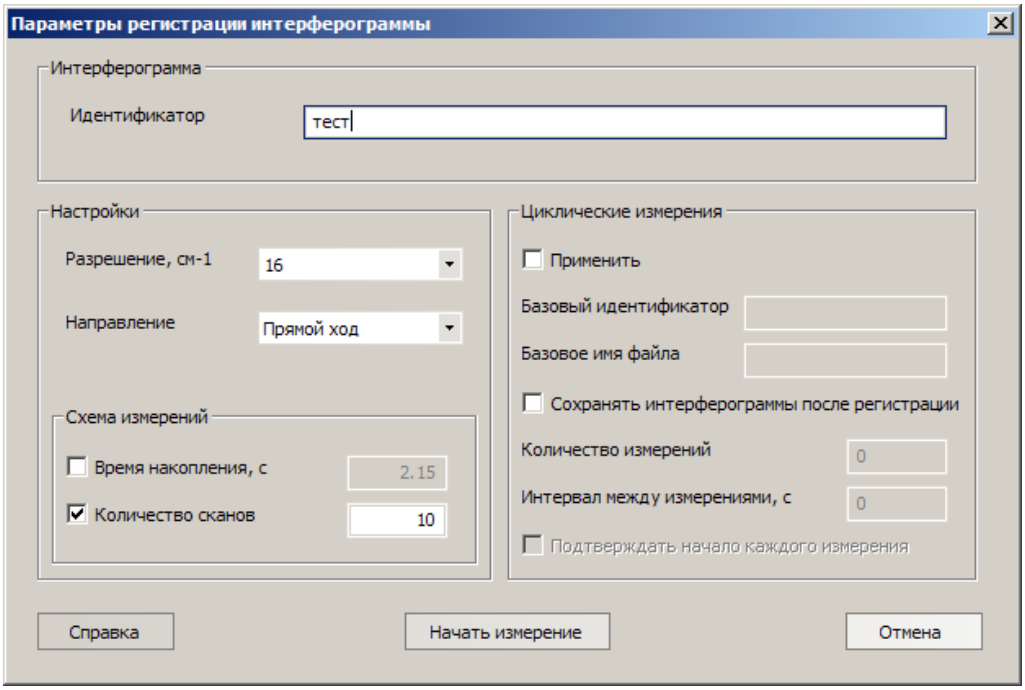


Рис. 4-12 Диалоговое окно «Параметры регистрации интерферограммы»

3) Для выполнения измерения интерферограммы необходимо выбрать ряд настроек регистрации:

- Направление интерферограммы (возможна регистрация интерферограмм прямого хода, обратного хода и прямого+обратного);

- Количество сканов/время накопления (один скан - это однократная запись интерферограммы). Время накопления (время выполнения измерений) зависит от количества установленных сканов, а также выбранного разрешения и скорости сканирования. Отношение сигнал/шум увеличивается пропорционально квадратному корню из числа сканов, однако увеличение числа сканов приводит к увеличению времени измерения. Поэтому число сканов (время накопления) выбирают в зависимости от требуемой задачи проводимого анализа, соотнося зашумленность спектра с временем измерения).

4) Нажмите кнопку **Начать измерение**. При нажатии данной кнопки появится диалоговое окно ***Регистрация*** (Рис. 4-2) с прогресс-баром и счетчиком оставшихся сканов. Измерения начинаются сразу при открытии данного окна.

5) Если при сканировании будет нажата кнопка **Пауза** (Рис. 4-2), то сканирование будет приостановлено. Нажав кнопку **Продолжить** сканирование будет продолжено.

6) При нажатии кнопки **Отмена** (Рис. 4-2) появится сообщение (Рис. 4-3). При нажатии кнопки **Да** (Рис. 4-3) откроется диалоговое окно ***Параметры регистрации фонового спектра*** (Рис. 4-1). При нажатии кнопки **Нет** (Рис. 4-3) сканирование будет продолжено.

7) По окончании регистрации откроется главное окно программы с зарегистрированной интерферограммой (Рис. 4-13).

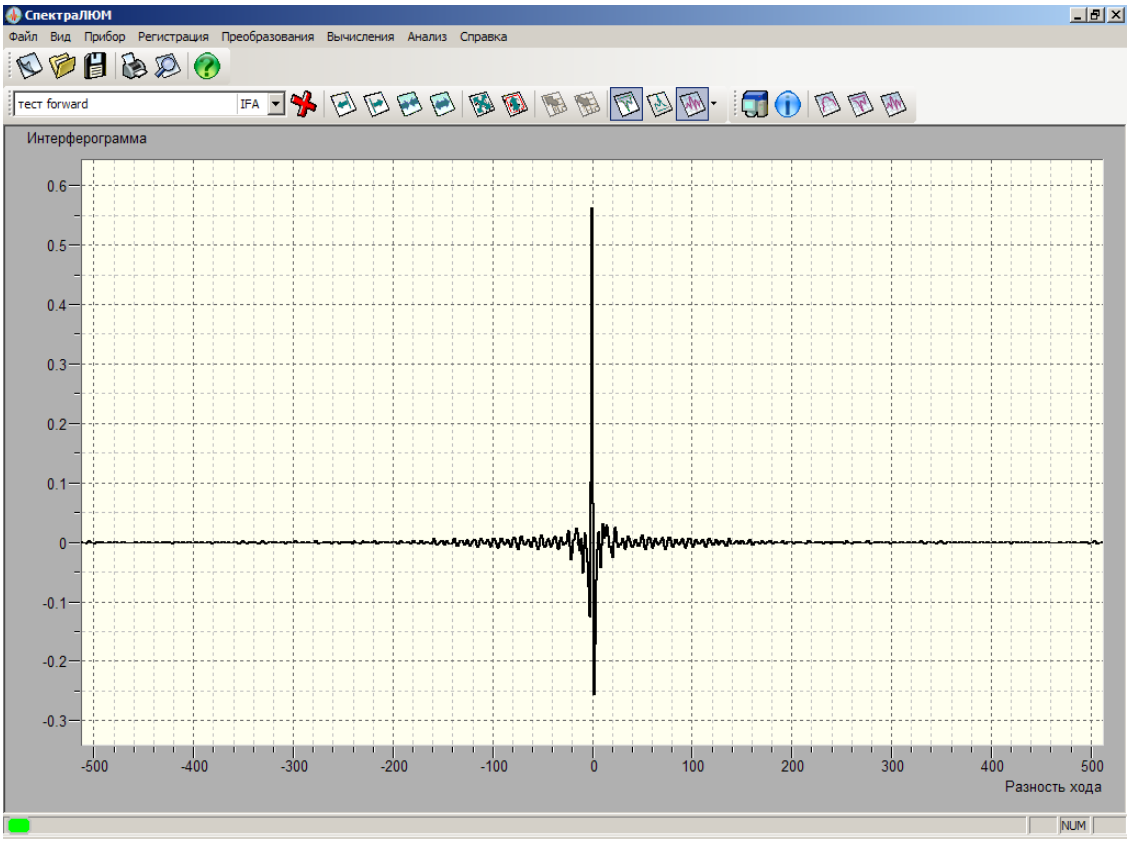


Рис. 4-13 Главное окно программы. Зарегистрированная интерферограмма.

Если подключенный спектрометр снабжен опорным каналом, то можно регистрировать интерферограммы:

- предметного канала;
- опорного канала.

4.3.2 Циклическое измерение интерферограмм

Циклические измерения интерферограмм – это измерения, которые проводятся в автоматическом режиме с заданной периодичностью.

В режиме циклической записи можно отображать все зарегистрированные интерферограммы на экране, а можно только последнюю зарегистрированную интерферограмму. Для отображения только последней интерферограммы необходимо установить галочку в строке **Только активный спектр** в главном меню программы, выбрав пункт **Вид/Только активный спектр**. Для отображения всех интерферограмм необходимо повторно выбрать пункт меню **Вид/Только активный спектр** для снятия установленной галочки.

1) Повторите п.п.1-3, описанные выше для единичного измерения интерферограммы.

2) Установите галочку в текстовой строке **Применить** секции **Циклические измерения** диалогового окна ***Параметры регистрации интерферограммы*** (Рис. 4-14).

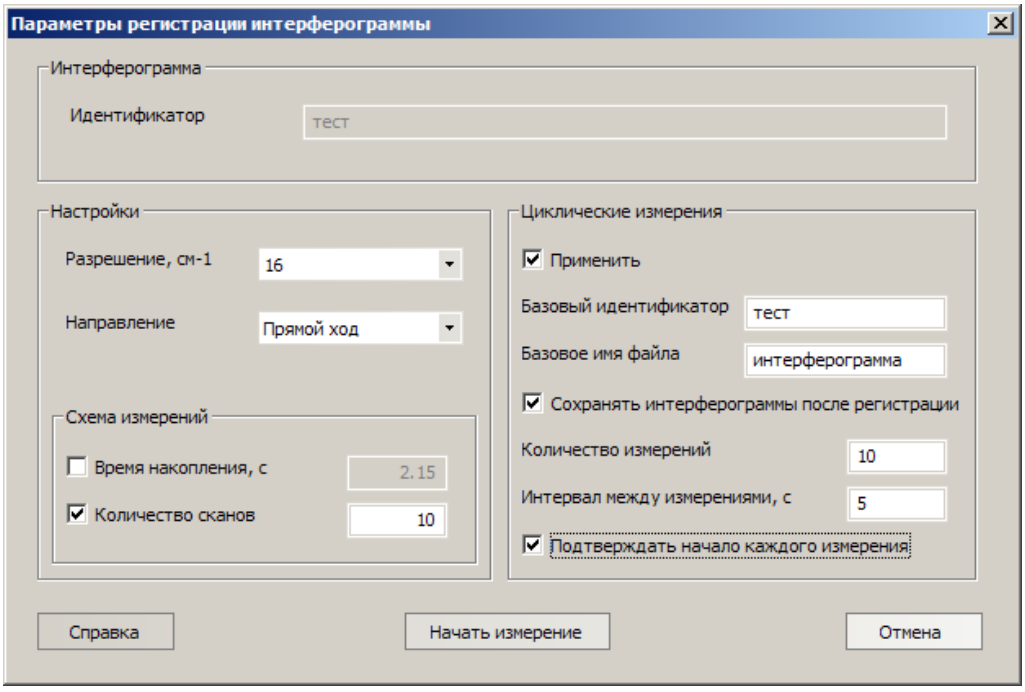


Рис. 4-14 Диалоговое окно «Параметры регистрации интерферограммы»

3) Для выполнения циклического измерения фоновых спектров необходимо задать ряд параметров регистрации:

- Базовый идентификатор (идентификатор интерферограмм, комментарии к интерферограммам);
- Количество измерений (одно измерение – это регистрация одной интерферограммы по заданному количеству сканов);
- Интервал между измерениями.

4) Если необходимо подтверждение начала каждого измерения, то установите галочку в текстовой строке **Подтверждать начало каждого измерения**. Таким образом, первое измерение будет проводиться, как при единичном измерении (без подтверждения оператором). По его окончании будет выводиться спектр, а через указанный ранее оператором интервал, появляться окно ***Регистрация*** (Рис. 4-6) с кнопками **Продолжить** и **Отмена**. Для начала второго измерения цикла требуется подтверждение оператором (нажатие кнопки **Продолжить**). Если не была установлена метка подтверждения начала каждого измерения, то все циклические измерения проводятся без участия оператора.

5) Для того чтобы спектры после циклической регистрации автоматически сохранялись установите галочку в окне ***Сохранять интерферограммы после регистрации*** (Рис. 4-14).

6) В строке **Базовое имя файла** (Рис. 4-14) задайте имя (это имя, под которым будет сохранена циклическая запись интерферограммы).

7) Нажмите кнопку **Начать измерение** (Рис. 4-14).

8) В открывшемся диалоговом окне (Рис. 4-7) выберите папку для сохранения интерферограмм.

9) Нажмите кнопку **OK** (Рис. 4-7). Откроется диалоговое окно ***Регистрация*** (Рис. 4-2) или (Рис. 4-6).

10) Для возврата в окно ***Параметры регистрации интерферограммы*** нажмите кнопку **Отмена** (Рис. 4-2) или (Рис. 4-6).

11) Для выхода из диалогового окна ***интерферограммы*** (Рис. 4-14) нажмите кнопку **Отмена**.

12) Для вызова справки по окну ***Параметры регистрации интерферограммы*** (Рис. 4-14) нажмите кнопку **Справка**.

5 Просмотр спектра

Возможен просмотр, как зарегистрированных спектров, так и спектров, сохранённых ранее в виде файлов.

При просмотре спектров удобно использовать кнопки, соответствующие сервисным командам просмотра спектра, вынесенные на панель инструментов «Просмотр» (см.п.2.4.3).

5.1 Принципы отображения спектров

Для отображения только фоновых спектров, только спектров или только интерферограмм в окне просмотра необходимо выполнить следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт меню **Вид/Отображать**.

2) В открывшемся меню отметьте тот вид спектров, которые необходимо отобразить на экране: фоновые спектры, спектры или интерферограммы:

   - Спектр – на экране будут отображаться только спектры;
   - Фоновый спектр - на экране будут отображаться только фоновые спектры;
   - Интерферограмма - на экране будут отображаться только интерферограммы.

5.2 Активный спектр

На панели инструментов находится выпадающий список (см.п.2.4.3), содержащий список всех открытых спектров (независимо от типа). При выборе спектра из списка он становится активным. По умолчанию — это последний открытый или сохраненный спектр. Активный спектр прорисо-

вывается более жирной линией. Некоторые операции по обработке спектров (выравнивание базовой линии, коррекция НПВО, вырезание участков спектров), математические вычисления и различный анализ действуют только на активный спектр.

5.3 Определение координат точки спектра с помощью курсора

Поместите курсор в окно спектра. Нажатие левой кнопки мыши приведет к появлению горизонтальной и вертикальной линий, проходящих через точку, выделенную курсором мыши (Рис. 5-1). В левом нижнем углу окна спектра появятся координаты точки (значение волнового числа и интенсивности выделенной точки). Для отказа от этого режима отпустите левую кнопку мыши. Отображение координат курсора не скидывается после отжатия левой кнопки мыши, если в этот момента нажата клавиша **Shift** на клавиатуре компьютера.

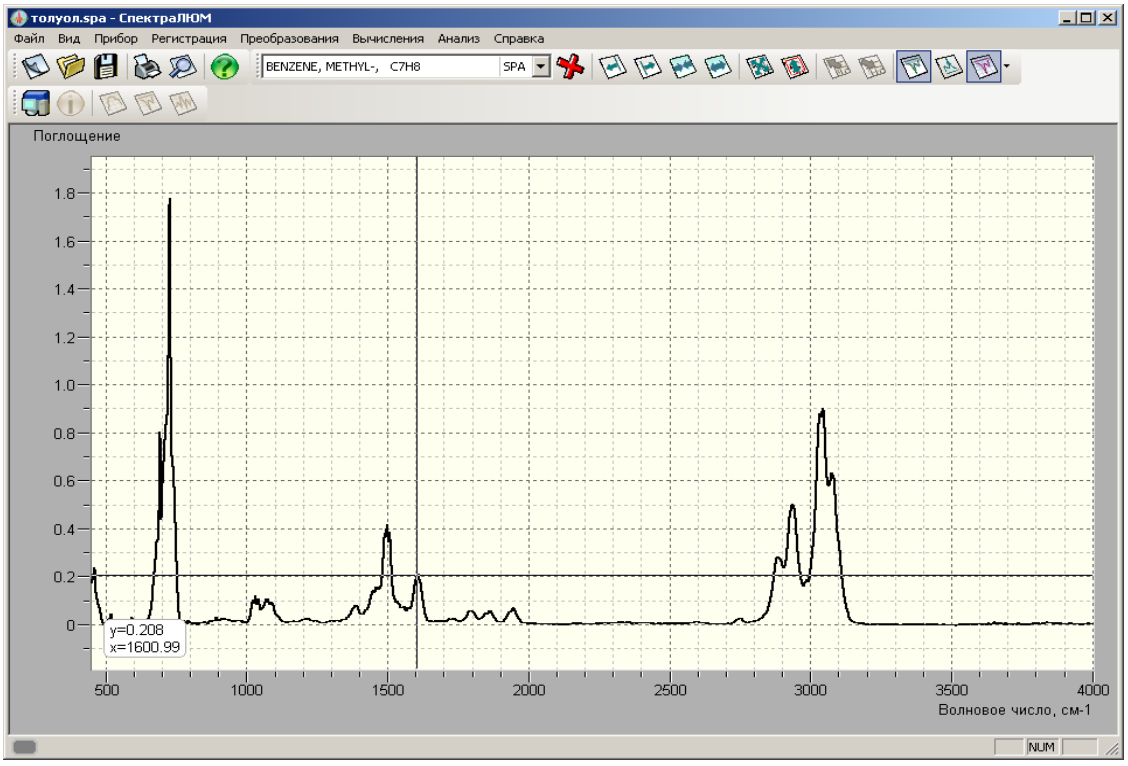


Рис. 5-1 Определение координат точки спектра с помощью курсора

5.4 Увеличение части спектра

Для увеличения интересующей Вас части спектра необходимо провести с помощью мыши следующие действия.

Поместите курсор в окно спектра. Выделите площадь в области спектра, которую следует увеличить. Для этого нажмите левую кнопку мыши, выбрав один из углов выделяемой площади, затем, удерживая кнопку мыши в нажатом положении, переместите курсор в место расположения противоположного угла выделяемого участка и отпустите кнопку. В момент перемещения курсора мыши в левом нижнем углу окна спектра указываются координаты курсора. После проведенных операций искомая площадь будет выделена рамкой, снабженной размерными маркерами (Рис. 5-2).

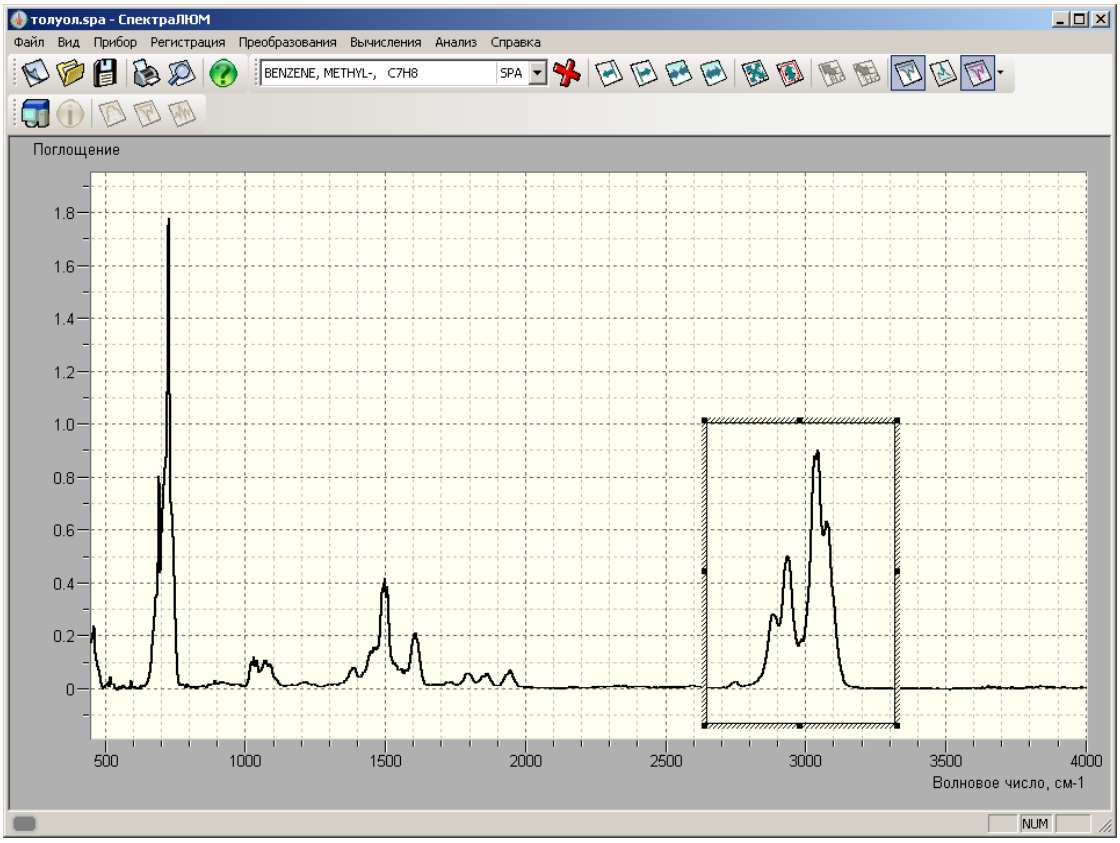


Рис. 5-2 Увеличение части спектра

Размер рамки можно изменить, перемещая рамку и маркеры окна с помощью мыши. Значения горизонтальных и вертикальных координат границ выделенного прямоугольника указываются по его сторонам. Для отказа от выделенного прямоугольника дважды нажмите правую кнопку мыши. Выделенный прямоугольник может быть перемещен в любой уча-

сток графика спектра. Для этого нажмите левую клавишу мыши и, удерживая ее в нажатом положении, поместите рамку на нужный участок.

Для просмотра выделенной части спектра дважды щёлкните левой клавишей мыши.

5.5 Смещение спектра влево (вправо)

Для смещения загруженных спектров по оси X влево (вправо) используются следующие командные кнопки на панели инструментов «Просмотр»:

Сдвиг влево ,

Сдвиг вправо .

Или в главном меню программы выберите пункт меню **Вид/Сдвиг влево** или **Вид/Сдвиг вправо**.

5.6 Сжатие (растяжение) спектра по оси X

Для сжатия (растяжения) загруженных спектров по оси X используются следующие командные кнопки на панели инструментов «Просмотр»:

Сжать ,

Растянуть .

Или в главном меню программы выберите пункт меню **Вид/Сжать** или **Вид/Растянуть**.

5.7 Настройка окна отображения

Для точного задания границ окна просмотра спектров и интерферограмм необходимо выполнить следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт меню **Вид/Настройка окна отображения**. Откроется диалоговое окно ***Настройка окна отображения*** (Рис. 5-3).

2) В открывшемся окне введите необходимые максимальные и минимальные значения границ отображения окна по оси X и по оси Y.

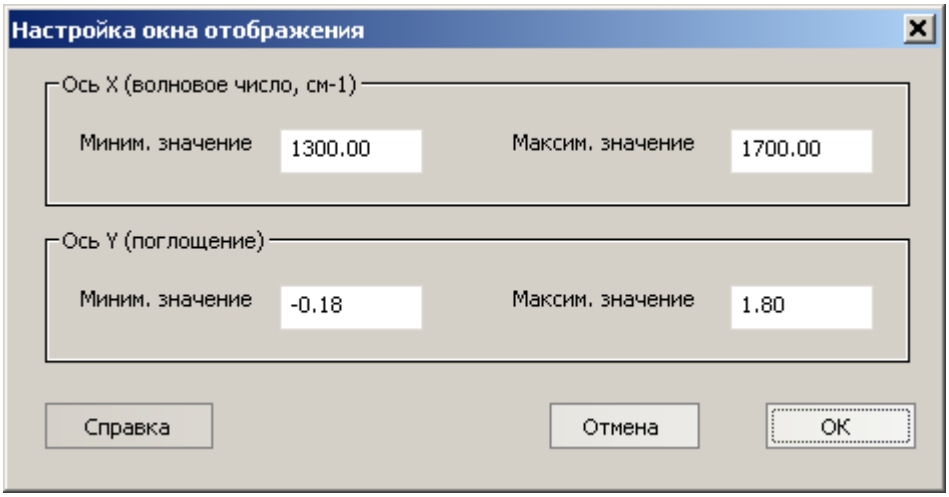


Рис. 5-3 Диалоговое окно «Настройка окна отображения»

3) Для выхода из окна ***Настройка окна отображения*** с сохранением сделанных изменений нажмите кнопку **ОК**. Откроется главное окно программы с заданными значениями границ окна отображения по оси X и по оси Y.

4) Для выхода из данного диалогового окна без сохранения сделанных изменений нажмите кнопку **Отмена**.

5.8 Отображение спектра во весь экран

Для отображения всех точек спектров нажмите кнопку  на панели инструментов «Просмотр» или в главном меню программы выберите пункт меню **Вид/Во весь экран**.

5.9 Автомасштабирование

Чтобы выбрать оптимальный масштаб выделенной части спектра по оси ординат нажмите кнопку  на панели инструментов «Просмотр» или в главном меню программы выберите пункт **меню Вид/Автомасштаб по оси Y**.

5.10 Отмена предыдущей операции

Для отмены предыдущей операции масштабирования, которая была произведена над спектрами нажмите кнопку  на панели инструментов «Просмотр» или в главном меню программы выберите пункт меню **Вид/Отменить (масштаб)**.

5.11 Возврат предыдущей операции

Для возврата отменённой операции масштабирования, которая была произведена над спектрами нажмите кнопку  на панели инструментов «Просмотр» или в главном меню программы выберите пункт меню **Вид/Вернуть (масштаб)**.

5.12 Сетка

Для отображения координатной сетки в главном меню программы выберите пункт меню **Вид/Сетка** или нажав правую кнопку мыши в окне программы, выберите данную команду в контекстном меню.

5.13 Легенда

Для идентификации изображенных на экране спектров можно воспользоваться легендой для отображаемых графиков.

Для этого выберите пункт меню **Вид/Легенда**. Появится галочка напротив данной операции, и в правом верхнем углу экрана появится поле с идентификаторами спектров, отображаемых в окне просмотра. Для того, чтобы скрыть легенду, уберите галочку из строки меню **Вид/Легенда**.

5.14 Цвет активного спектра

Для того чтобы изменить цвет спектра необходимо выполнить следующее:

1) В главном меню программы выберите **Вид/Цвет активного спектра…**. Откроется окно ***Цвет*** (Рис. 5-4) с палитрой цветов для определения цвета активного спектра.

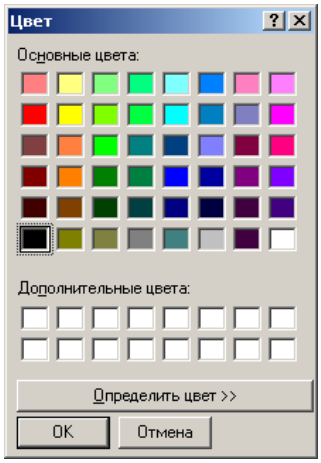


Рис. 5-4 Диалоговое окно «Цвет»

2) Выберите необходимый цвет и нажмите кнопку **OK**.

3) Если нужного цвета нет в палитре основных цветов, нажмите кнопку **Определить цвет >>** и далее **Добавить в набор**.

4) В диалоговом окне ***Цвет*** выберите добавленный цвет и нажмите кнопку **OK**.

5) Для выхода из данного диалогового окна без сохранения сделанных изменений нажмите кнопку **Отмена**.

5.15 Только активный спектр

Для отображения только активного спектра в окне просмотра в главном меню программы выберите пункт **Вид/Только активный спектр**. Для отображения всех спектров в окне просмотра в главном меню программы повторно выберите пункт **Вид/Только активный спектр** для снятия установленной галочки.

5.16 Преобразования по оси X

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет отображать зарегистрированные спектры, где ось абсцисс изображена в следующих величинах:

- в волновых числах (ν);
- в длинах волн (λ).

Волновое число связано с длиной волны выражением:

$$\nu = \frac{1}{\lambda} \qquad (5.16\text{-}1)$$

Единицы измерения волновых чисел в программе «СпектраЛЮМ»: $см^{-1}$.

Единицы измерения длины волны в программе «СпектраЛЮМ»: нм.

В Фурье-спектроскопии наиболее удобным отображением оси абсцисс для спектров является ось волновых чисел ($см^{-1}$). В этом случае обеспечивается равномерное распределение зарегистрированных спектральных точек по линейной шкале волновых чисел.

По умолчанию ось абсцисс в программе «СпектраЛЮМ» отображается в волновых числах ($см^{-1}$).

Для отображения оси абсцисс в длинах волн см.п.5.16.2.

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет отображать зарегистрированные спектры с осью абсцисс, где начало шкалы, может соответствовать, как минимальному значению, так и максимальному значению спектрального диапазона.

По умолчанию ось абсцисс отображается так, что начало шкалы, соответствует минимальному значению спектрального диапазона.

Для отображения оси абсцисс так, чтобы начало шкалы соответствовало максимальному значению спектрального диапазона, см.п.5.16.1.

5.16.1 Инверсия оси абсцисс

Данная функция предназначена для отображения оси абсцисс так, чтобы начало шкалы соответствовало максимальному значению спектрального диапазона.

По умолчанию ось абсцисс в программе «СпектраЛЮМ» отображается так, что начало шкалы соответствует минимальному значению спектрального диапазона.

Для преобразования оси абсцисс с началом шкалы, соответствующей минимальному значению спектрального диапазона в начало шкалы, со-

ответствующей максимальному значению спектрального диапазона выберите в главном меню программы пункт **Преобразования/ Инверсия оси X**.

Напротив данного пункта появится галочка. Ее наличие означает, что начало шкалы абсцисс соответствует максимальному значению спектрального диапазона. Отсутствие галочки означает, что начало шкалы соответствует минимальному значению спектрального диапазона.

5.16.2 Отображение спектров по оси абсцисс в единицах длины волны

Данная функция предназначена для отображения оси абсцисс в единицах длины волны (нм).

По умолчанию ось абсцисс в программе «СпектраЛЮМ» отображается в единицах волнового числа ($см^{-1}$).

Для преобразования оси абсцисс из волновых чисел в длину волны выберите в главном меню программы пункт **Преобразования/Шкала в нм**.

Напротив данного пункта появится галочка. Ее наличие означает, что шкала абсцисс отображена в длинах волн. Отсутствие галочки означает, что шкала абсцисс отображена в волновых числах.

5.17 Преобразования по оси Y

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет преобразовывать любой зарегистрированный спектр в вид удобный для последующей обработки.

Доступные виды преобразования спектров по оси ординат:

- Спектр пропускания (T), см.п.5.17.1;
- Спектр поглощения (A), см.п.5.17.2;
- Спектр отражения (R), см.п.5.17.3;
- Спектр Lg(1/R), см.п.5.17.4;

- Спектр в функции Кубелки-Мунка (F), см.п.5.17.5.

5.17.1 Пропускание

Пропускание (T) - это отношение количества энергии, прошедшей через образец к количеству энергии, падающей на него.

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет преобразовывать спектры поглощения (A), отражения (R), Lg(1/R), Кубелки-Мунка (F) в спектр пропускания (T), выполняя при этом предварительно обратные преобразования данных функций.

Для осуществления данной операции в главном меню выберите пункт **Вычисления/Преобразования/Пропускание** или нажмите на иконку **Режим пропускания**  на панели инструментов (данная функция доступна только в случае, когда спектр в окне просмотра находится в режиме поглощения).

5.17.2 Поглощение

Поглощение (A) есть функция от пропускания (T), определяемая по формуле:

$$A = \lg(\frac{1}{T}) \qquad (5.17\text{-}1)$$

Спектры поглощения удобно использовать при проведении количественного анализа исследуемых образцов, так как величина поглощения A для характерных полос большинства веществ, согласно, закону Бугера-Ламберта-Бера, пропорциональна их концентрации.

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет преобразовывать в спектр поглощения (A) спектры пропускания (T), в соответствии с указанной формулой, а также спектры отражения (R), Lg(1/R), Кубелки-Мунка (F), выполняя при этом предварительное преобразование данных спектров в спектр пропускания (T).

Для осуществления данной операции в главном меню выберите пункт **Вычисления/Преобразования/Поглощение** или нажмите на иконку **Ре-**

жим поглощения  на панели инструментов (данная функция доступна только в случае, когда спектр в окне просмотра находится в режиме пропускания).

5.17.3 Отражение (R)

Отражение (R) – это отношение количества энергии, отраженной от образца к количеству энергии, падающей на него.

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет отображать спектры пропускания (T) в единицах отражения (R). Это может быть удобно, если исходный спектр регистрировался, как спектр пропускания при использовании какой-либо приставки отражения.

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет также преобразовывать в спектр отражения (R) спектры поглощения (A), Lg(1/R), Кубелки-Мунка (F), выполняя при этом обратные преобразования данных функций.

Для осуществления данной операции в главном меню выберите пункт **Вычисления/Преобразования/Отражение** или нажмите на **иконку Режим отражения**  на панели инструментов (данная функция доступна только в случае, когда спектр в окне просмотра находится в режиме поглощения Lg (1/R) или Кубелки-Мунка (F)).

5.17.4 Lg(1/R)

Спектр Lg(1/R) есть функция от спектра отражения (R).

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет преобразовывать в спектр Lg(1/R) спектры отражения (R), а также спектры пропускания (T), поглощения (A), Кубелки-Мунка (F), выполняя при этом предварительные преобразования спектров в спектры отражения (R).

Для осуществления данной операции в главном меню выберите пункт **Вычисления/Преобразования/Lg(1/R)** или нажмите на иконку **Режим Lg(1/R)**  на панели инструментов (данная функция доступна только в случае, когда спектр в окне просмотра находится в режиме отражения).

5.17.5 Кубелка-Мунк

Спектр в функции Кубелки-Мунка (F) вычисляется из спектра отражения (R) по формуле:

$$F = \frac{(1-R)^2}{2R} \qquad (5.17\text{-}2)$$

Спектры в функции Кубелки-Мунка удобно использовать при проведении количественного анализа исследуемых образцов, так как величина F для характерных полос многих веществ пропорциональна их концентрации, если исходный спектр регистрировался с применением приставки диффузного отражения.

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет преобразовывать в спектр Кубелки-Мунка (F) спектры отражения, используя указанную формулу, а также спектры пропускания (T), поглощения (A), Lg(1/R), выполняя при этом предварительно преобразование данных спектров в спектр отражения (R).

Для осуществления данной операции в главном меню выберите пункт **Вычисления/Преобразования/Кубелка-Мунк**.

6 Математические операции

Программа СпектраЛЮМ позволяет не только регистрировать и просматривать, но и обрабатывать полученные спектры поглощения, пропускания, отражения (R), lg(1/R), Кубелки-Мунка.

Некоторым операциям по обработке подвергается только активный спектр. Активным называется тот спектр, который выбран в поле со списком загруженных спектров на панели инструментов «Просмотр». По умолчанию - это последний открытый или сохраненный спектр.

При выходе из программы или очистке экрана несохраненные результаты обработки утрачиваются. Для дальнейшего их использования спектры необходимо сохранить (см.п.8.1).

В главном меню программы **Вычисления** доступны следующие функции:

- Статистика (см.п.6.1) - статистические вычисления спектральных данных в заданных диапазонах;
- Атрибуты (см.п.6.2) - табличная форма отображения спектра с указанием основных параметров регистрации;
- Интенсивность (см.п.6.4) - определение интенсивности в заданной точке;
- Площадь (см.п.6.5) - определение площади под спектральной кривой в заданном диапазоне;
- Поиск экстремумов (см.п.6.3) – поиск пиков;
- Операции спектр – константа (см.п.6.6) - сложение, вычитание, деление и умножение спектра на константу;
- Операции спектр – спектр (см.п.6.7) - сложение, вычитание, деление и умножение спектра на спектр;
- Усреднение спектров (см.п.6.8) - усреднение всех открытых спектров;
- Смесь (см.п.6.9) - сложение нескольких спектров с весовыми коэффициентами;
- Нормировка (см.п.6.10) - нормировка спектров;

- Базовая линия (см.п.6.11) - коррекция базовой линии по заданным параметрам;
- Производные (см.п.6.12) - вычисление 1-й, 2-й, 3-й и 4-й производных;
- Сглаживание (см.п.6.13) - настройка и выполнение сглаживания спектральной кривой;
- Коррекция НПВО (см.п.6.14) - коррекция спектров, зарегистрированных при нарушенном полном внутреннем отражении;
- Преобразование Крамерса-Кронига (см.п.6.15) - преобразование спектра по алгоритму Крамерса-Кронига;
- Вырезание участков спектра (см.п.6.16) - вырезание участков спектра;
- Изменение параметров спектра (см.п.6.17) - изменение идентификатора, спектрального диапазона и разрешения спектра.

6.1 Статистические вычисления

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет вычислять для заданного оператором спектрального диапазона следующие статистические параметры спектра:

- среднее значение;
- отклонение среднего значения от номинального;
- отношение сигнал/шум (по предельному отклонению);
- отношение сигнал/шум (по среднеквадратичному отклонению).

Вычисления проводятся для любого спектра, открытого в главном окне, в тех единицах измерения, в каких спектр отображен на экране (пропускание, поглощение, отражения, lg (1/R), в функции Кубелки-Мунка).

1) В главном меню программы выберите пункт **Вычисления/Статистика**.

2) В открывшемся диалоговом окне ***Статистика*** (Рис. 6-1) в секции **Спектр** из выпадающего списка **Идентификатор образца** выберите спектр.

3) В секции **Настройки** укажите обрабатываемый спектральный диапазон. В поле **Волновое число, см$^{-1}$** введите центральное значение, а в поле **+/-, см$^{-1}$** границы спектрального диапазона, ограничивающие заданное центральное значение.

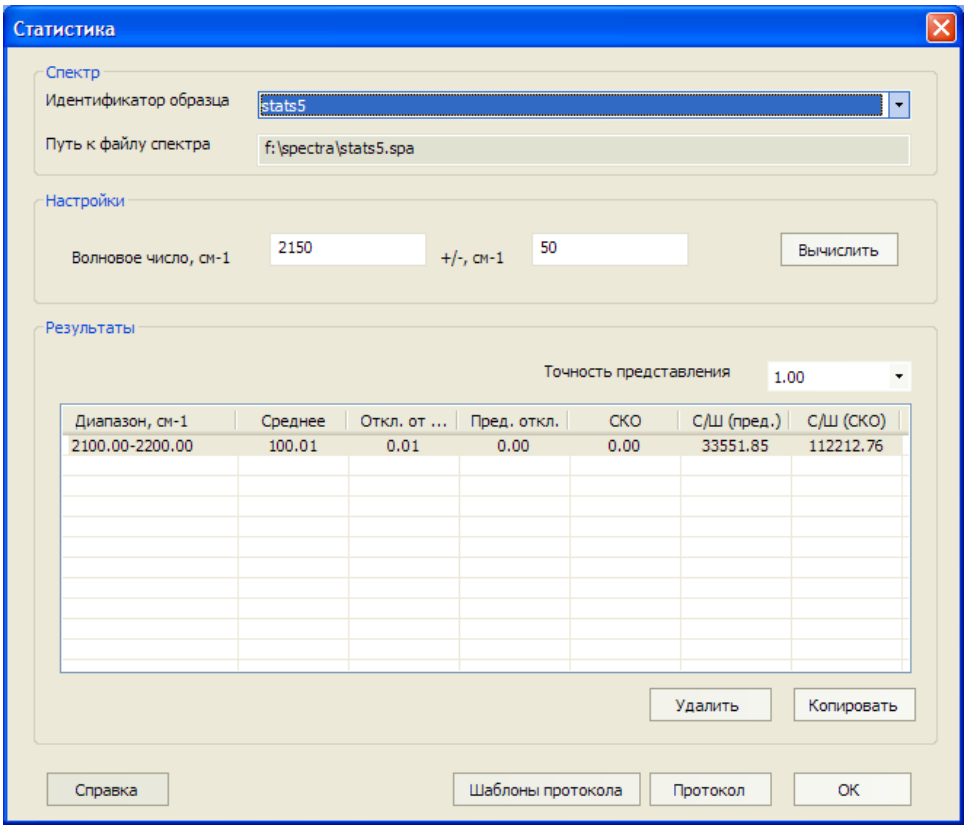


Рис. 6-1 Диалоговое окно «Статистика»

4) Для установки необходимого при отображении результатов количества знаков после запятой в секции **Результаты** выберите нужный формат из выпадающего списка;

5) Нажмите кнопку **Вычислить**. В таблице (Рис. 6-1) появятся результаты расчета для выбранного диапазона:

- Среднее - среднее значение (*M*), рассчитываемое по формуле:

$$M = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} S_i \qquad (6.1\text{-}1),$$

где *Si* – значение интенсивности спектра в i-ой точке диапазона (в единицах измерения, отображенных на графике), *N* – количество точек в заданном оператором спектральном диапазоне.

- Откл. от 100% - отклонение от 100% линии (*H*, только для спектров пропускания и отражения), рассчитываемое по формуле:

$$H = |100 - \mathrm{M}| \qquad (6.1\text{-}2)$$

- Пред. откл. - предельное отклонение (D_{n-n}, размах от максимума к минимуму), рассчитываемое по формуле:

$$D_{n-n} = \max(S_i - Y_i) + \max(Y_i - S_i) \qquad (6.1\text{-}3),$$

где $Y_i = a + b \cdot F_i$ (a и b – коэффициенты регрессии, рассчитываемые по методу наименьших квадратов; F_i- значение волнового числа (длины волны) для i-ой спектральной точки в заданном оператором диапазоне).

- *СКО* - среднеквадратичное отклонение ($D_{СКО}$) рассчитываемое по формуле:

$$D_{СКО} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N}(S_i - Y_i)^2}{N-1}} \qquad (6.1\text{-}4)$$

- *С/Ш* (пред.) - отношение сигнал/шум (по предельному отклонению), рассчитываемое по формуле:

$$С/Ш_{(n-n)} = \frac{M}{D_{n-n}} \qquad (6.1\text{-}5)$$

- *С/Ш (СКО)* - отношение сигнал/шум (по среднеквадратичному отклонению), рассчитываемое по формуле:

$$С/Ш_{(СКО)} = \frac{M}{D_{СКО}} \qquad (6.1\text{-}6)$$

6) При проведении статистической обработки нескольких спектральных диапазонов новые значения будут добавляться в таблицу (Рис. 6-1), не удаляя прежних результатов.

7) Для удаления строки из таблицы результатов нажмите кнопку **Удалить**.

8) Для копирования в буфер всего содержимого таблицы результатов нажмите кнопку **Копировать**.

9) Для просмотра протокола статистики нажмите кнопку **Протокол** (кнопка **Протокол** активна только в том случае, если заполнена таблица с результатами).

10) Для настройки шаблона протокола нажмите кнопку **Шаблоны протокола**.

11) Для просмотра справки по данному диалоговому окну нажмите кнопку **Справка**.

12) Для выхода из данного диалогового окна нажмите кнопку **OK**.

6.2 Табличное отображение спектра

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет посмотреть любой спектр, открытый в главном окне, в табличном виде, с выводом дополнительной информации о параметрах регистрации данного спектра.

1) Для просмотра данных о спектре в главном меню выберите пункт **Вычисления/Атрибуты**. Откроется диалоговое окно ***Атрибуты спектра*** (Рис. 6-2).

2) В открывшемся диалоговом окне ***Атрибуты спектра*** в секции **Спектр** из выпадающего списка **Идентификатор образца** выберите спектр.

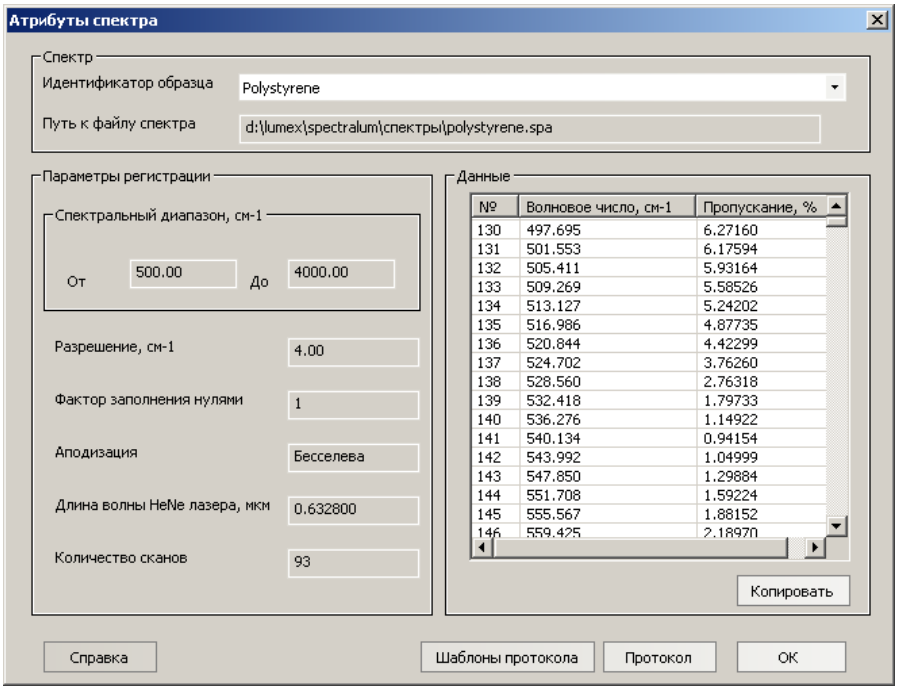


Рис. 6-2 Диалоговое окно «Атрибуты спектра»

В открывшемся окне появляется информация об активном спектре:

- идентификатор образца;

- путь к файлу, где сохранен спектр данного образца;
- параметры регистрации спектра (спектральный диапазон, разрешение, фактор заполнения нулями, аподизация, длина волны HeNe лазера, количество сканов);
- численные значения спектра (данные спектральных точек по осям X и Y). Отображаемый порядковый номер точки соответствует отчету от нулевого значения по оси X.

Значения спектральных точек спектра соответствуют тому виду спектра, который изображен на окне просмотра.

Если программой «СпектраЛЮМ» открыто для просмотра несколько спектров, то в диалоговом окне ***Атрибуты спектра*** можно из выпадающего списка **Идентификатор образца** выбирать идентификаторы других спектров, просматривать их в табличном виде.

3) Для копирования содержимого таблицы с данными нажмите кнопку **Копировать**. При этом произойдет копирование данных в оперативную память компьютера, что позволяет в дальнейшем стандартными средствами Windows внести информацию в удобные для пользователя документы.

4) Для просмотра, сохранения и печати протокола атрибутов нажмите кнопку **Протокол**.

5) Для настройки шаблона протокола нажмите кнопку **Шаблоны протокола**.

6) Для просмотра справки по данному диалоговому окну нажмите кнопку **Справка**.

7) Для выхода из данного диалогового окна нажмите кнопку **OK**.

6.3 Поиск экстремумов

Данная операция используется для поиска экстремумов спектров, отображаемых на экране.

За экстремум принимается любой пик, превышающий заданный оператором уровень шума.

Поиск экстремумов осуществляется в заданном оператором спектральном диапазоне, а также выше или ниже (в зависимости от типа спектра) указанного порога.

Для фоновых спектров, спектров поглощения, Lg(1/R) и Кубелки-Мунка поиск осуществляется выше заданного порога.

Для спектров пропускания и отражения поиск осуществляется ниже заданного порога.

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет по выбору оператора осуществлять поиск либо только максимумов, либо только минимумов пиков, либо всех экстремумов спектра в заданных настройках поиска.

Для осуществления поиска экстремумов выполните следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Вычисления/Поиск экстремумов**. Откроется диалоговое окно ***Поиск экстремумов*** (Рис. 6-3).

2) В открывшемся диалоговом окне в секции **Спектр** из выпадающего списка **Идентификатор образца** выберите спектр.

3) Задайте спектральный диапазон поиска в секции **Спектральный диапазон**.

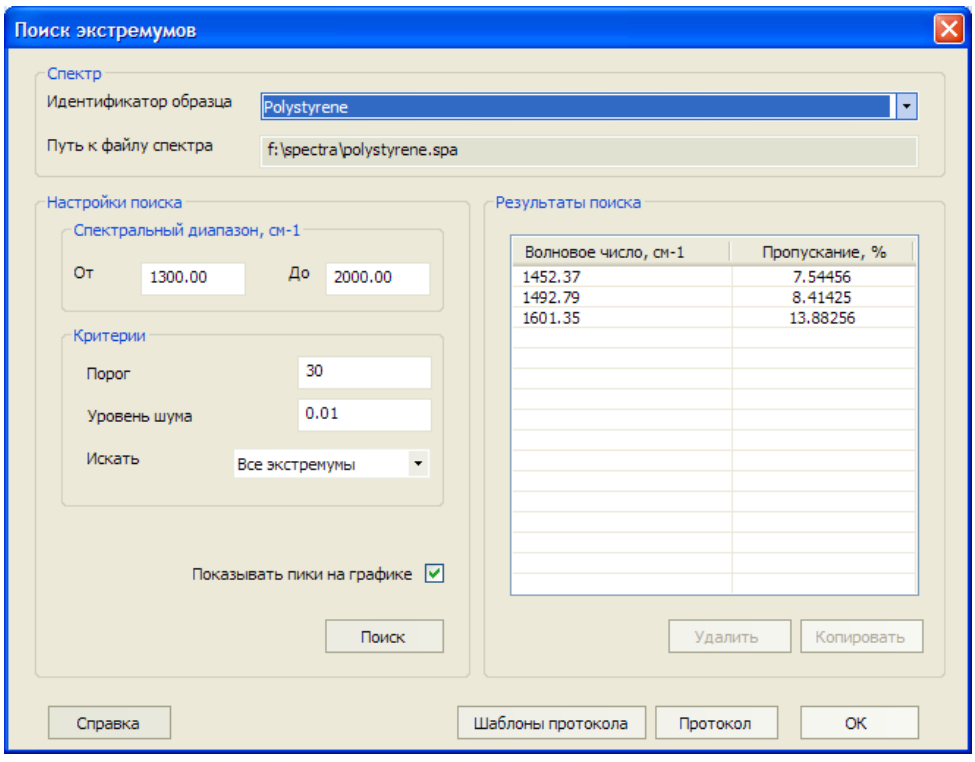


Рис. 6-3 Диалоговое окно «Поиск экстремумов»

4) В секции **Критерии** задайте порог срабатывания, уровень шума и из выпадающего списка выберите то, что вы хотите найти (все экстремумы, только максимумы или только минимумы).

5) Нажмите кнопку **Поиск.** В секции **Результаты** появится список экстремумов (Рис. 6-3).

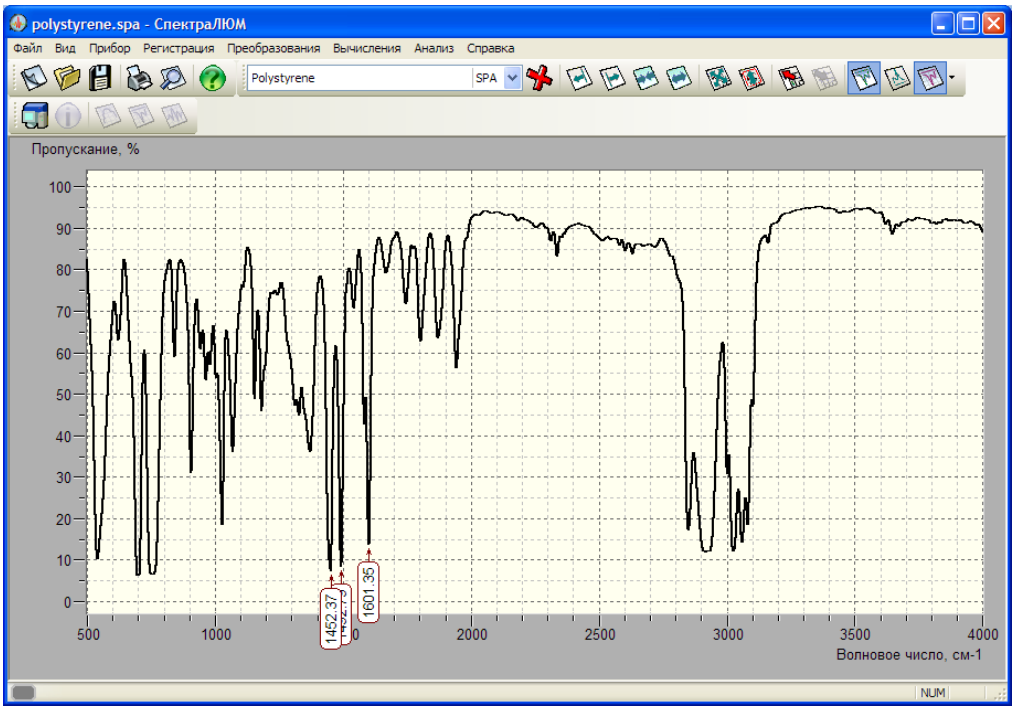


Рис. 6-4 Диалоговое окно «Поиск экстремумов». Отображение результатов на графике

6) Для отображения найденных экстремумов на графике (Рис. 6-4) поставьте галочку в окне **Показывать пики на графике** (Рис. 6-3).

7) Для удаления лишних экстремумов выделите выбранные экстремумы в окне результатов поиска и нажмите кнопку **Удалить**.

8) Для того чтобы скопировать данные о найденных экстремумах (например, в Word) выделите выбранные экстремумы в окне результатов поиска и нажмите кнопку **Копировать**.

9) Для просмотра протокола экстремумов нажмите кнопку **Протокол**.

10) Для настройки шаблона протокола нажмите кнопку **Шаблоны протокола**.

11) Для просмотра справки по данному диалоговому окну нажмите кнопку **Справка**.

12) Для выхода из данного диалогового окна нажмите кнопку **OK**.

6.4 Вычисление интенсивности

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет вычислять значения ординаты спектра для заданного оператором значения абсциссы.
Данная операция доступна для всех типов спектров кроме интерферограмм.

Для вычисления интенсивности выполните следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Вычисления/Интенсивность**. Откроется диалоговое окно ***Интенсивность*** (Рис. 6-5).

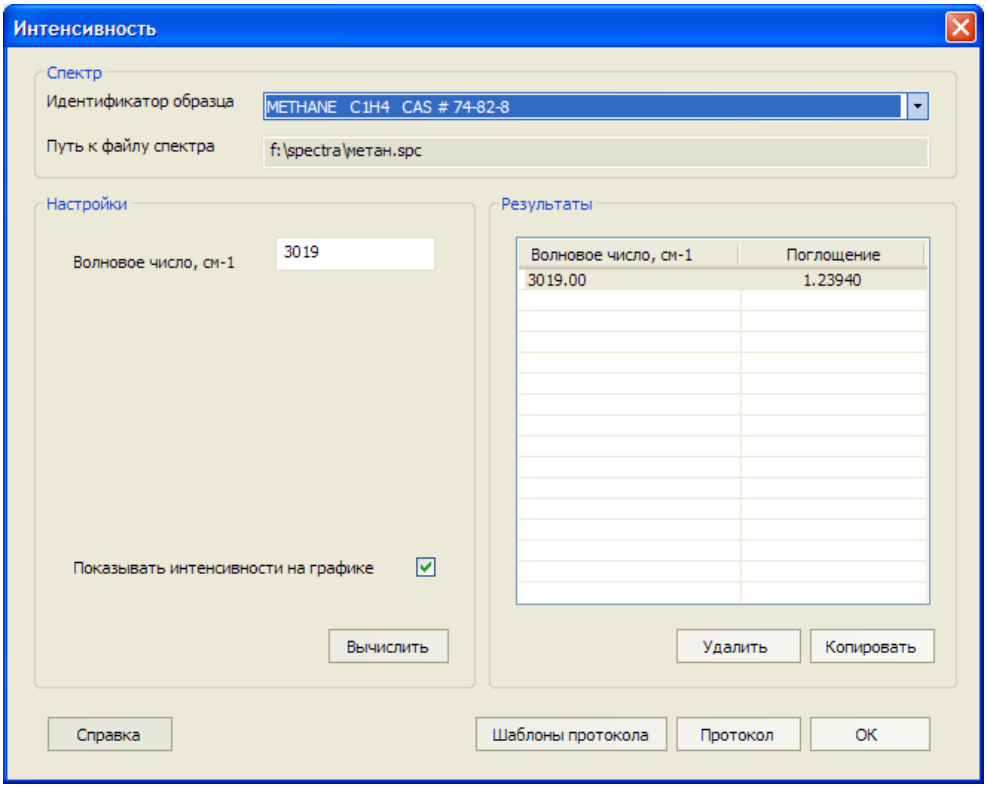


Рис. 6-5 Диалоговое окно «Интенсивность»

2) В открывшемся диалоговом окне в секции **Спектр** из выпадающего списка **Идентификатор образца** выберите спектр.

3) Задайте волновое число в поле **Волновое число** (или **Длина волны**) секции **Настройки**.

4) Нажмите кнопку **Вычислить**. В секции **Результаты** появятся результаты (Рис. 6-5).

5) Для отображения найденных значений интенсивностей на графике (Рис. 6-6) поставьте галочку в окне **Показывать интенсивности на графике** (Рис. 6-5), при этом будет отображаться информация в виде этикетки с записью y=xxxx, x=xxxx для всех рассчитанных интенсивностей. y- рассчитанная интенсивность, x- волновое число (длина волны) соответствующее данной точке (Рис. 6-6).

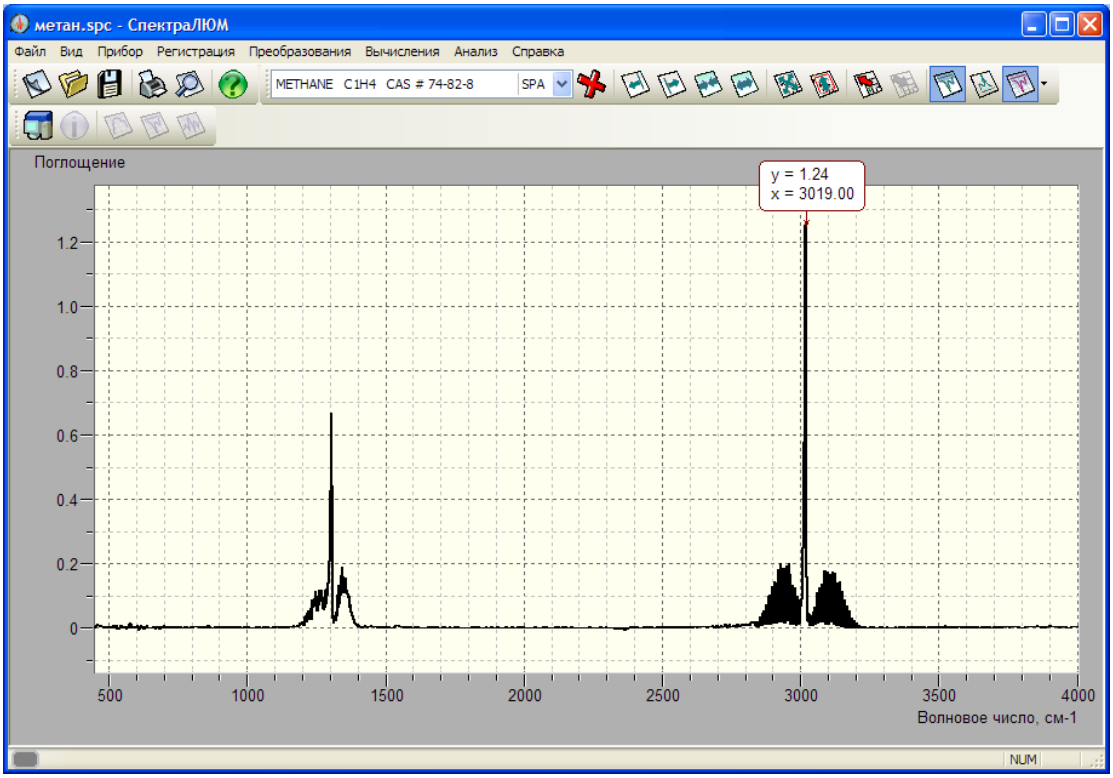


Рис. 6-6 Диалоговое окно «Интенсивность».
Отображение результатов на графике

6) Для удаления найденных значений выделите необходимые строки в таблице результатов и нажмите кнопку **Удалить**.

7) Для того чтобы скопировать данные из таблицы результатов (например, в Word) нажмите кнопку **Копировать**.

8) Для просмотра протокола вычисления интенсивностей нажмите кнопку **Протокол**.

9) Для настройки шаблона протокола нажмите кнопку **Шаблоны протокола**.

10) Для просмотра справки по данному диалоговому окну нажмите кнопку **Справка**.

11) Для выхода из данного диалогового окна нажмите кнопку **OK**.

6.5 Вычисление площади и высоты пика

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет вычислять и отображать на графике площадь и высоту пиков в заданном оператором спектральном диапазоне.

Площадь и высота пика может вычисляться, как с учетом коррекции базовой линии, так и без нее.

В первом случае, площадь вычисляется для фигуры, ограниченной кривой спектра и линией, соединяющей точки спектра на границах заданного оператором спектрального диапазона. Высота пика в данном случае определяется расстоянием на перпендикуляре, опущенным от максимальной или минимальной (в зависимости от типа спектра) точки спектра до базовой линии.

Во втором случае, площадь вычисляется для фигуры, ограниченной кривой спектра, перпендикулярами, опущенными от точек спектра на границах заданного оператором спектрального диапазона до оси абсцисс, и осью абсцисс. Высота пика в данном случае определяется расстоянием на перпендикуляре, опущенным от максимальной или минимальной (в зависимости от типа спектра) точки спектра до оси абсцисс.

Данная операция применима для всех типов спектров кроме интерферограмм.

Для вычисления площади пика выполните следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Вычисления/Площадь**. Откроется диалоговое окно ***Площадь пика*** (Рис. 6-7).

2) В открывшемся диалоговом окне в секции **Спектр** из выпадающего списка **Идентификатор образца** выберите спектр.

3) В поле **Спектральный диапазон** задайте требуемый спектральный диапазон.

4) В окне **Производить коррекцию базовой линии** поставьте галочку, если необходимо, чтобы результаты выводились с учетом коррекции базовой линии.

5) Установите необходимое при отображении результатов количество знаков после запятой, выбрав нужный формат из выпадающего списка;

6) Нажмите кнопку **Вычислить**. После действий, описанных выше, будет заполнена таблица результатов (Рис. 6-7): выведены значения волнового числа, высоты пика и площади пика.

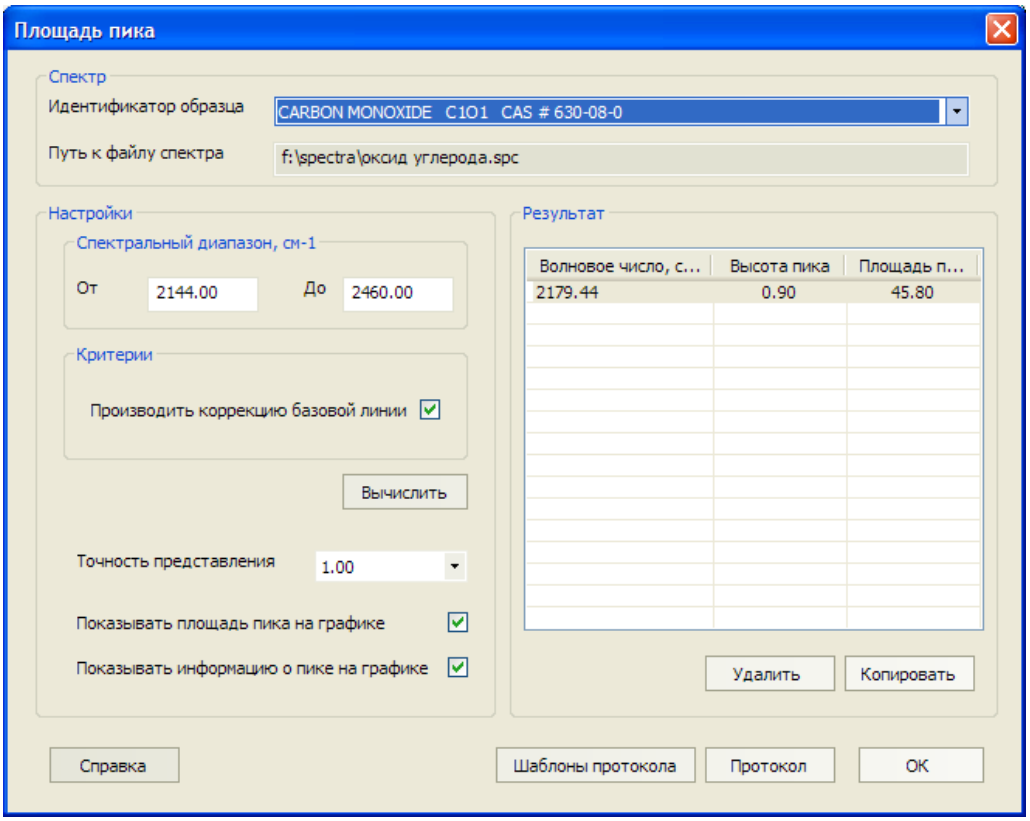


Рис. 6-7 Диалоговое окно «Площадь пика»

7) Для отображения информации по данному пику на графике (Рис. 6-8), выделите определенную строку в таблице результатов, поставьте галочки в окна **Показывать площадь пика на графике** (Рис. 6-7) (будет отображаться рассчитываемая площадь) и **Показывать информацию о пике на графике** (Рис. 6-7) (будет отображаться на графике информация о пике в виде этикетки с записью S=…, H=…, x= …,см$^{-1}$, где S- рассчитанная площадь пика, H- рассчитанная высота пика, x- волновое число (длина волны) соответствующее данному пику). Этикетка будет располагаться рядом с пиком (стрелочка от этикетки указывает на соответствующий пик). При выводе информации о пике на график так же будет прорисовываться линия, соответствующая значению H (Рис. 6-8).

8) Для того чтобы удалить найденные значения из таблицы пиков, выделите необходимые строки и нажмите кнопку **Удалить**.

9) Для того чтобы скопировать данные о найденных пиках (например, в Word) нажмите кнопку **Копировать**.

10) Для просмотра протокола вычисления площади нажмите кнопку **Протокол**.

11) Для настройки шаблона протокола нажмите кнопку **Шаблоны протокола**.

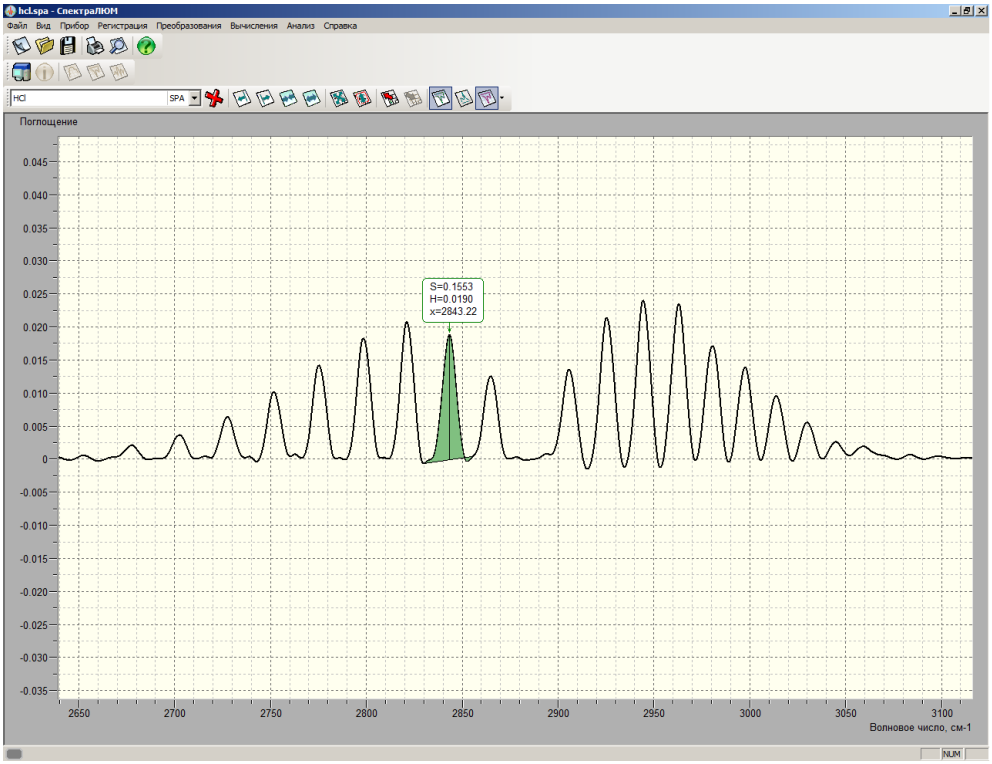


Рис. 6-8 Диалоговое окно «Площадь пика». Отображение результатов на графике

12) Для просмотра справки по данному диалоговому окну нажмите кнопку **Справка**.

13) Для выхода из данного диалогового окна нажмите кнопку **ОК**.

6.6 Операции спектр-константа

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет проводить математические операции деления, умножения, вычитания и сложения спектра с заданной оператором постоянной величиной.

Данные операции осуществляются только с активным спектром.

Для каждого типа спектра доступны определенные операции:

- для спектров пропускания, отражения (R) доступны операции умножить на, делить на;
- для спектров поглощения, lg(1/R), Кубелка-Мунк - умножить на, делить на, прибавить, вычесть;
- для фонового спектра - умножить на, делить на, прибавить, вычесть;
- для интерферограмм - умножить на, делить на, прибавить, вычесть.

Для осуществления операции спектр-константа выполните следующее:

1) В главном меню программы выберите **пункт Вычисления/Операции спектр-константа**. Откроется диалоговое окно ***Операции спектр-константа*** (Рис. 6-9).

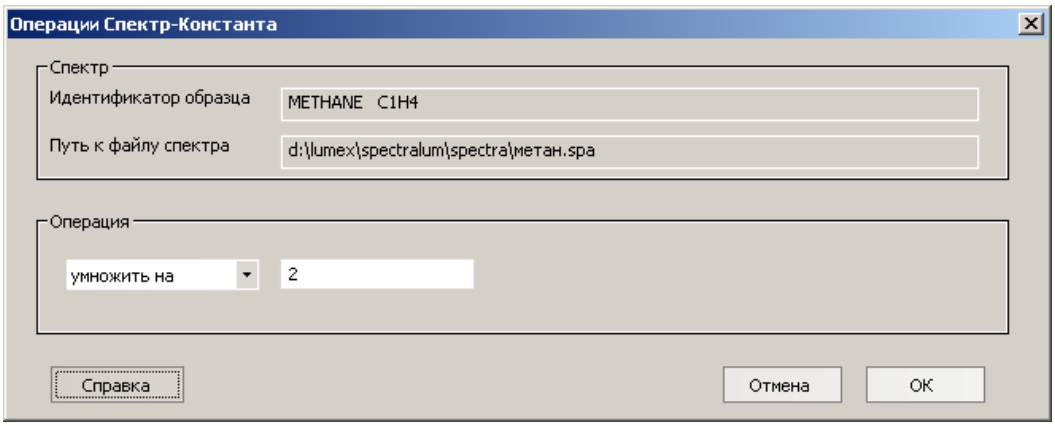


Рис. 6-9 Диалоговое окно «Операции спектр-константа»

2) В секции **Операция** из выпадающего списка выберите необходимую математическую операцию и в пустое поле введите значение, на величину которого вы хотите изменить интенсивность спектра.

3) Нажмите кнопку **OK**.

4) В открывшемся диалоговом окне ***Идентификатор нового спектра*** (Рис. 6-10) в поле **Идентификатор образца** введите идентификатор нового спектра, по умолчанию программой предлагается “идентификатор образца (modified1)”.

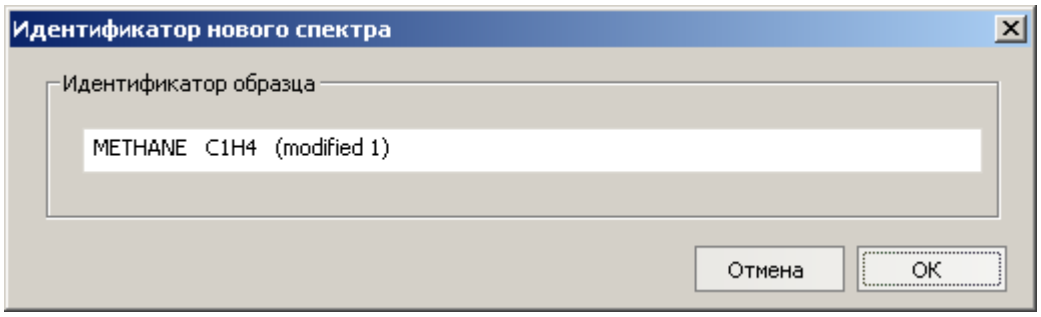


Рис. 6-10 Диалоговое окно «Идентификатор нового спектра»

5) Нажмите кнопку **OK**. В противном случае нажмите **Отмена** (идентификатор образца не будет изменен).

6) Для выхода из диалогового окна ***Операции спектр-константа*** без каких-либо изменений нажмите **Отмена**.

7) Для вызова справки данного окна нажмите кнопку **Справка**.

6.7 Операции спектр-спектр

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет производить математические операции сложения, вычитания, деления и умножения с двумя, выбранными оператором, спектрами.

Для каждого типа спектра доступны определенные операции:

- для спектров пропускания, отражения (R) доступны операции умножить на, делить на;
- для спектров поглощения, lg(1/R), Кубелка-Мунк - прибавить, вычесть;
- для фонового спектра - прибавить, вычесть, умножить на, поделить на;
- для интерферограмм - прибавить, вычесть.

Данные операции доступны в том случае, если в окне просмотра открыто не менее двух спектров или интерферограмм.

Для проведения операций со спектрами выполните следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Вычисления/Операции спектр- спектр**. Откроется диалоговое окно ***Операции спектр-спектр*** (Рис. 6-11).

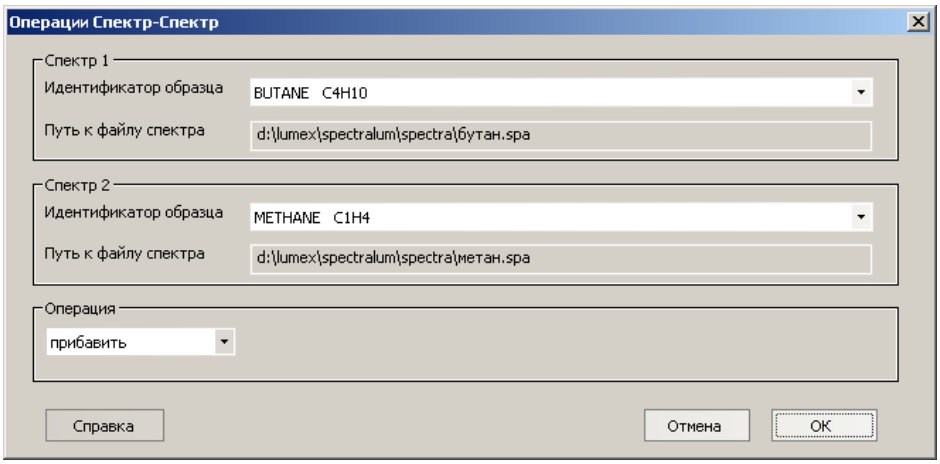


Рис. 6-11 Диалоговое окно «Операции спектр-спектр»

2) В открывшемся диалоговом окне в секции **Спектр 1** из выпадающего списка **Идентификатор образца** выберите первый необходимый для выполнения математической операции спектр.

3) В секции **Спектр 2** из выпадающего списка **Идентификатор образца** выберите второй необходимый для выполнения математической операции спектр.

4) В секции **Операция** из выпадающего списка выберите требуемую математическую операцию.

5) Нажмите кнопку **OK**.

6) В открывшемся диалоговом окне ***Идентификатор нового спектра*** (Рис. 6-10) в поле **Идентификатор образца** введите идентификатор нового спектра, по умолчанию программой предлагается “идентификатор образца (modified1)”.

7) Нажмите кнопку **OK**. В противном случае нажмите **Отмена** (идентификатор образца не будет изменен).

8) Для выхода из диалогового окна ***Операции Спектр-Спектр*** без каких-либо изменений нажмите кнопку **Отмена**.

9) Для вызова справки данного окна нажмите кнопку **Справка**.

6.8 Усреднение спектров

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет вычислить усредненный спектр из всех спектров, открытых в окне просмотра.

Данная операция доступна только в том случае, если в окне просмотра открыто не менее 2-х спектров.

Операция усреднения применима для всех типов спектров кроме интерферограмм.

Для осуществления данной операции выполните следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Вычисления/Усреднение спектров**.

2) В открывшемся диалоговом окне ***Идентификатор нового спектра*** (Рис. 6-10) в поле **Идентификатор образца** введите идентификатор нового спектра, по умолчанию программой предлагается “идентификатор образца (modified1)”.

3) Нажмите кнопку **OK**. В противном случае нажмите **Отмена** (идентификатор образца не будет изменен).

4) Для просмотра справки данного окна нажмите кнопку **Справка**.

6.9 Создание "смеси"

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет получить комбинированный спектр («смесь») путем сложения различных спектров с весами, указанными для них оператором.

Ввод весов возможен как в долях, так и в процентах.

Ограничений на значения весов нет (сумма весов может быть больше 1 или 100%).

Данная операция доступна для всех типов спектров, кроме интерферограмм.

Для построения смеси выполните следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Вычисления/Смесь**. Откроется диалоговое окно ***Построение смеси*** (Рис. 6-12).

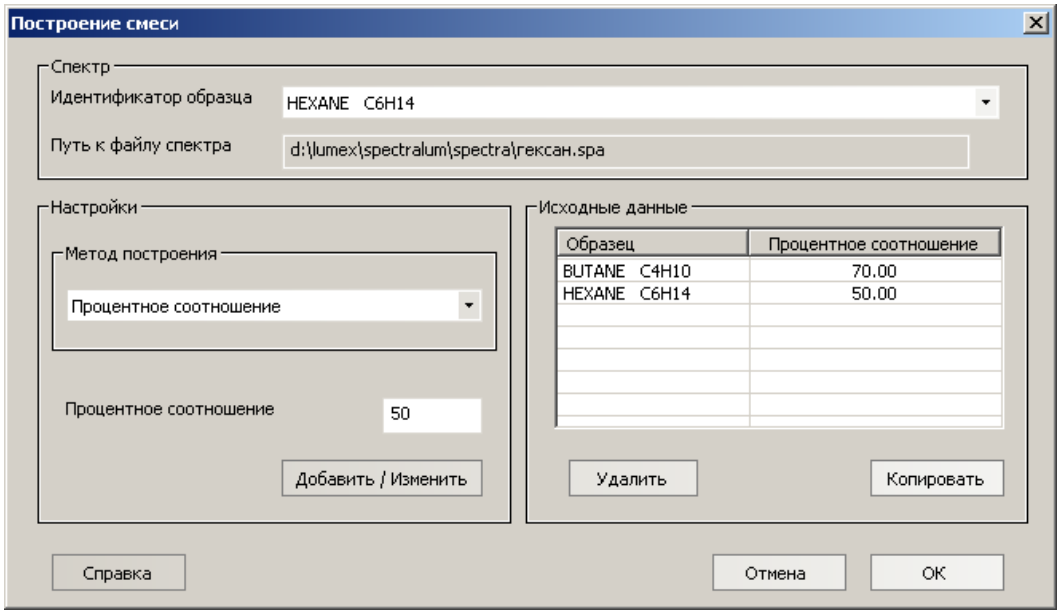


Рис. 6-12 Диалоговое окно «Построение смеси»

2) В открывшемся окне из выпадающего списка **Идентификатор образца** выберите требуемый из предложенных идентификаторов.

3) В секции **Метод построения** из выпадающего списка выберите один из двух методов построения смеси: с использованием весовых коэффициентов или процентных соотношений.

4) В текстовом поле **Весовой коэффициент** (**Процентное соотношение**) введите коэффициент или процент.

5) Нажмите кнопку **Добавить/Изменить**, при этом заполнится одна строчка таблицы **Исходные данные** (Рис. 6-12).

6) Повторите п.п.2-5 для следующего образца (идентификатора образца спектра) “смеси” (Рис. 6-12).

7) Для изменения весового коэффициента (процентного соотношения) образца, участвующего в построении смеси, выделите его в таблице **Исходные данные**.

8) В текстовом поле **Весовой коэффициент (Процентное соотношение)** введите новое значение коэффициента или процента.

9) Нажмите кнопку **Добавить/Изменить**, при этом **Исходные данные** будут изменены.

10) Для удаления какого-либо образца из таблицы исходных данных выделите необходимую строку и нажмите кнопку **Удалить**.

11) Для копирования содержимого таблицы исходных данных в буфер нажмите кнопку **Копировать**.

12) Нажмите кнопку **OK**.

13) В открывшемся диалоговом окне ***Идентификатор нового спектра*** (Рис. 6-10) в поле **Идентификатор образца** введите идентификатор нового спектра, по умолчанию программой предлагается “идентификатор образца (modified1)”.

14) Нажмите кнопку **OK**. В противном случае нажмите **Отмена** (идентификатор образца не будет изменен). Откроется главное окно программы с результатами построения смеси (Рис. 6-13).

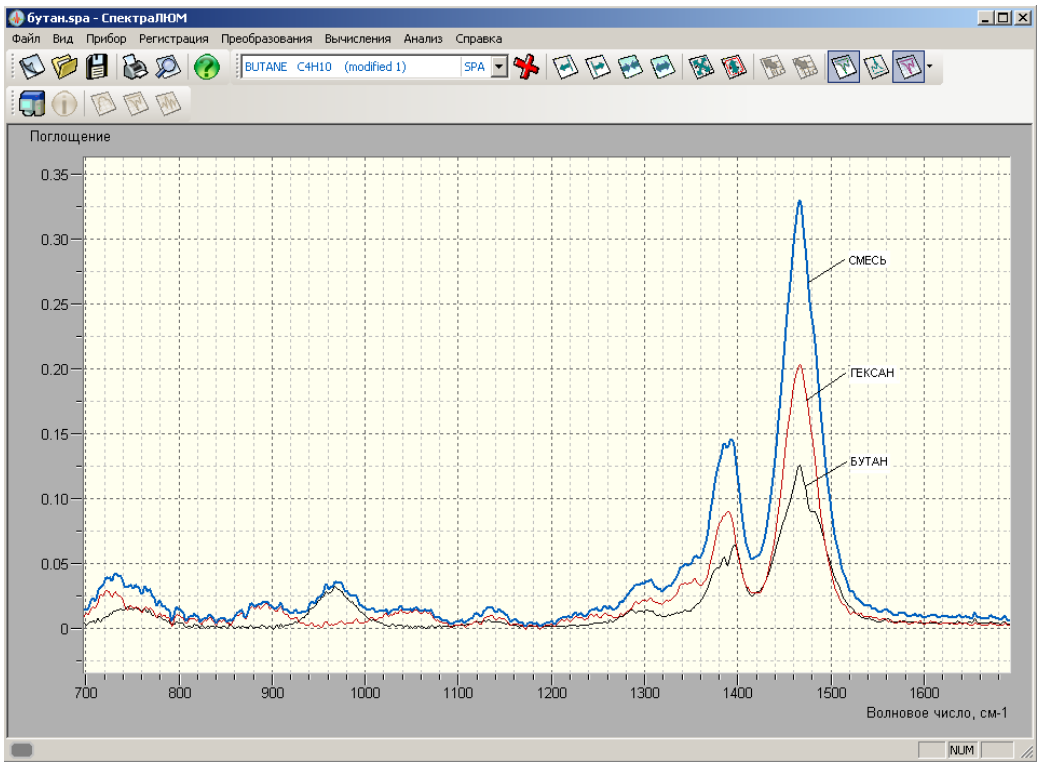


Рис. 6-13 Построение смеси. Результат

15) Для выхода из диалогового окна **Построение смеси** без каких-либо изменений нажмите кнопку **Отмена**.

16) Для вызова справки данного окна нажмите кнопку **Справка**.

6.10 Нормировка спектров

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет осуществлять нормировку активного спектра к заданному оператором значению высоты или площади конкретного пика.

Пик, по которому осуществляется нормировка, определяется программой автоматически в заданных оператором границах спектрального диапазона.

Программа позволяет осуществлять нормировку спектра также по площади другого спектра, выбранного оператором.

Нормировка производится для всех типов спектров, кроме спектров пропускания, отражения и интерферограмм.

Для осуществления нормировки спектра выполните следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Вычисления/Нормировка**. Откроется диалоговое окно ***Нормировка*** (Рис. 6-14).

2) В открывшемся диалоговом окне задайте **Спектральный диапазон**, в пределах которого будет искаться высота пика или его площадь.

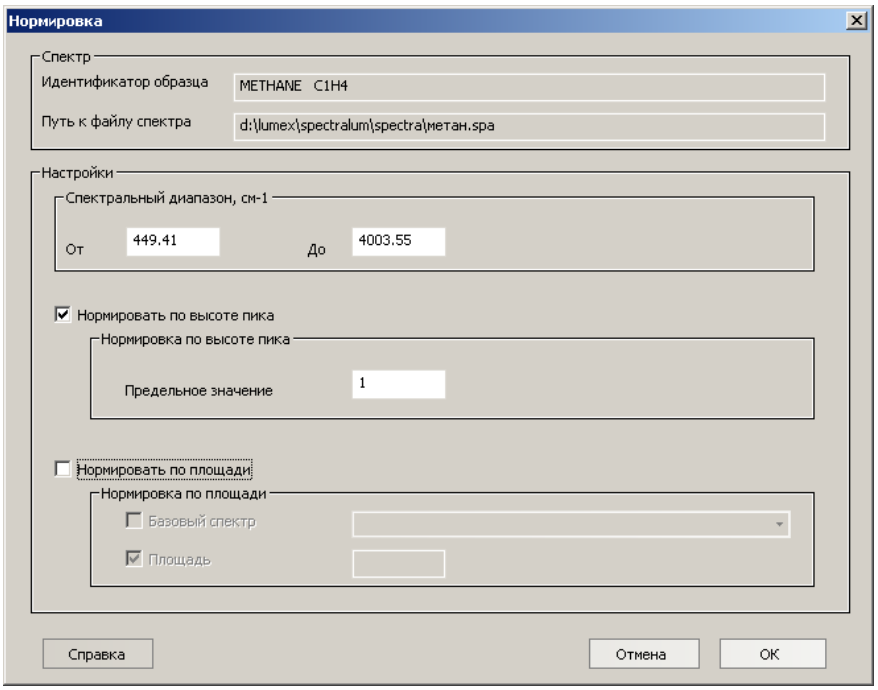


Рис. 6-14 Диалоговое окно «Нормировка»

3) Выберите тип нормировки: **Нормировать по высоте пика** или **Нормировать по площади**. Для этого установите галочку в соответствующее окно.

4) **При нормировке по площади** галочка по умолчанию находится в положении **Площадь**. Если необходимо нормировать по отношению к какому-то базовому спектру из списка загруженных, то необходимо установить галочку в окно **Базовый спектр**. При нормировке спектра по отношению к базовому изменение спектра происходит так, что площадь под спектральной кривой равняется площади базового спектра в указанном диапазоне. При нормировке по отношению к конкретному числу (площади) изменение спектра происходит так, что площадь под кривой спектра равняется заданной.

5) При **нормировке по высоте** введите требуемую высоту пика.

6) Нажмите кнопку **OK**.

7) В открывшемся диалоговом окне ***Идентификатор нового спектра*** (Рис. 6-10) в поле **Идентификатор образца** введите идентификатор нового спектра, по умолчанию программой предлагается “идентификатор образца (modified1)”.

8) Нажмите кнопку **OK**. В противном случае нажмите **Отмена** (идентификатор образца не будет изменен).

9) Для выхода из диалогового окна ***Нормировка*** без каких-либо изменений нажмите **Отмена**.

10) Для вызова справки данного окна нажмите кнопку **Справка**.

6.11 Выравнивание базовой линии

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет корректировать вид спектра путем выравнивания базовой линии.

Выравнивание базовой линии возможно, как в автоматическом режиме (по жестко заданному алгоритму), так и в ручном с возможностью изменения настроек оператором.

Выравнивание базовой линии осуществляется для всех типов спектров, кроме фонового и интерферограммы. Операция действует только на активный спектр.

Операции по выравниванию базовой линии осуществляются со спектрами пропускания, в которые предварительно программа переводит спектр, если он открыт оператором в другом виде, с последующим обратным преобразованием.

6.11.1 Автоматическая коррекция базовой линии

В автоматическом режиме выравнивание базовой линии осуществляется для всех точек спектра, путем вычитания из исходного спектра аппроксимирующего полинома второй степени, проведенного через все точки спектра.

Для того чтобы в автоматическом режиме выравнивание базовой линии было корректным в спектре должны быть продолжительные спектральные участки, которые могли бы рассматриваться в качестве базовой линии.

Для осуществления автоматической коррекции базовой линии выполните следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Вычисления/Базовая линия**.

2) Выберите метод коррекции: **Автоматическая коррекция**.

3) В открывшемся диалоговом окне ***Идентификатор нового спектра*** (Рис. 6-10) в поле **Идентификатор образца** введите идентификатор нового спектра, по умолчанию программой предлагается “идентификатор образца (modified1)”.

4) Нажмите кнопку **OK**. В противном случае нажмите **Отмена** (идентификатор образца не будет изменен). Откроется главное окно программы с коррекцией базовой линии спектра (Рис. 6-15).

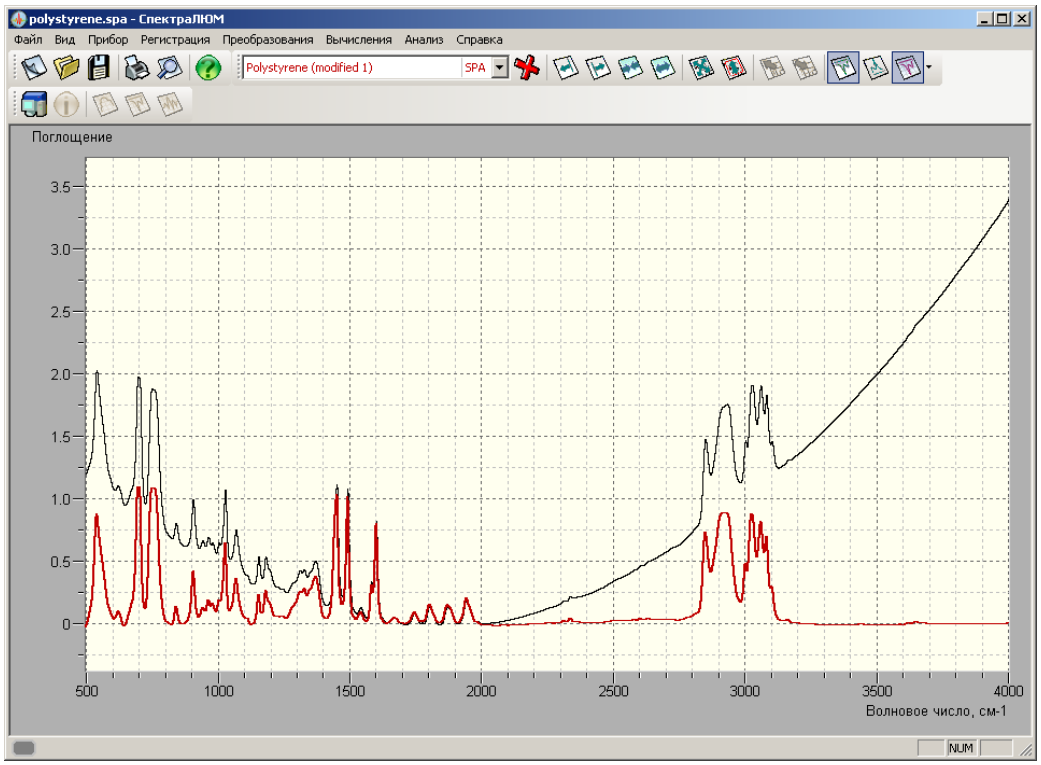


Рис. 6-15 Автоматическая коррекция базовой линии

6.11.2 Ручная коррекция базовой линии

В ручном режиме коррекции базовой линии оператор может сам выбрать алгоритм выравнивания.

Алгоритм выравнивания базовой линии зависит от числа заданных спектральных точек, через которые оператор хочет провести базовую линию.

Степень (k) аппроксимирующего полинома, который вычитается из исходного спектра, определяется по формуле:

$$k = n - 1 \qquad (6.11\text{-}1),$$

где n - число спектральных точек, указанных оператором.

Полином, проходящий через указанные точки, по желанию оператора можно увидеть на графике.

Выравнивание базовой линии может осуществляться, как для всего спектра, отображенного на экране, так и для участка спектра, ограниченного крайними точками из заданных оператором.

Выравнивание базовой линии осуществляется путем вычитания из исходного спектра аппроксимирующего полинома соответствующей степени. Для участков спектра, для которых выравнивать базовую линию не нужно, вычитается полином нулевой степени.

Для осуществления ручной коррекции базовой линии выполните следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Вычисления/Базовая линия**.

2) В секции **Спектр** из выпадающего списка **Идентификатор образца** выберите спектр.

3) Выберите метод коррекции: **Ручная коррекция**. Откроется диалоговое окно ***Ручная коррекция базовой линии*** (Рис. 6-16, Рис. 6-17).

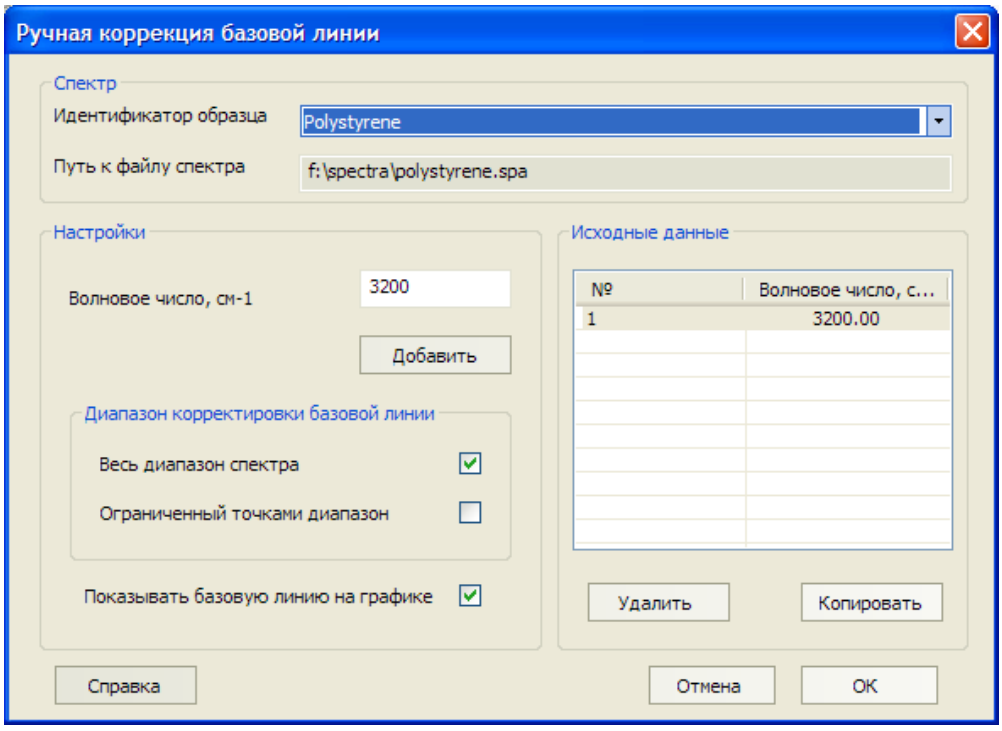


Рис. 6-16 Диалоговое окно «Ручная коррекция базовой линии». Исходные данные. Весь диапазон спектра

4) В строке **Волновое число** введите необходимое значение волнового числа.

5) Нажмите кнопку **Добавить**. При этом заполнится первая строчка в таблице **Исходные данные** (Рис. 6-16, Рис. 6-17).

6) В секции **Диапазон корректировки базовой линии** поставьте галочку в окне **Весь диапазон спектра** Рис. 6-16 (коррекция всего исходного спектра) или **Ограниченный точками диапазон** Рис. 6-17 (коррекция только в диапазоне, ограниченном минимальным и максимальным значением из заданных оператором точек по оси X (волновое число/длина волны).

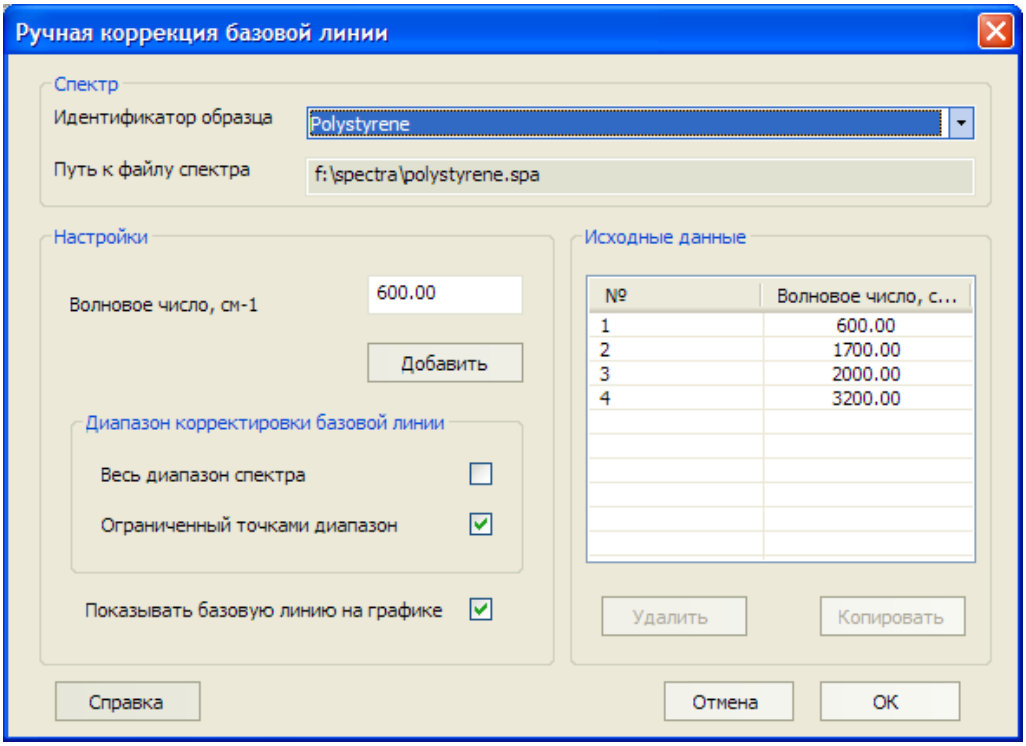


Рис. 6-17 Диалоговое окно «Ручная коррекция базовой линии». Исходные данные. Ограниченный точками диапазон

7) Для отображения базовой линии на спектре (Рис. 6-18, Рис. 6-19) установите галочку в окне **Показывать базовую линию на графике** (Рис. 6-16, Рис. 6-17).

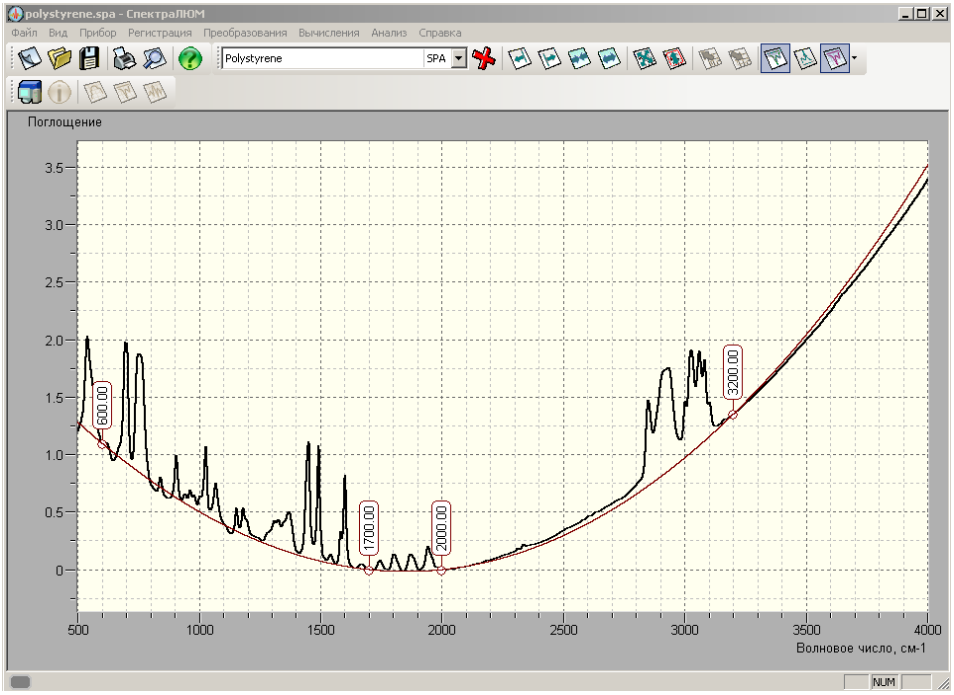


Рис. 6-18 Ручная коррекция базовой линии. Весь диапазон спектра.

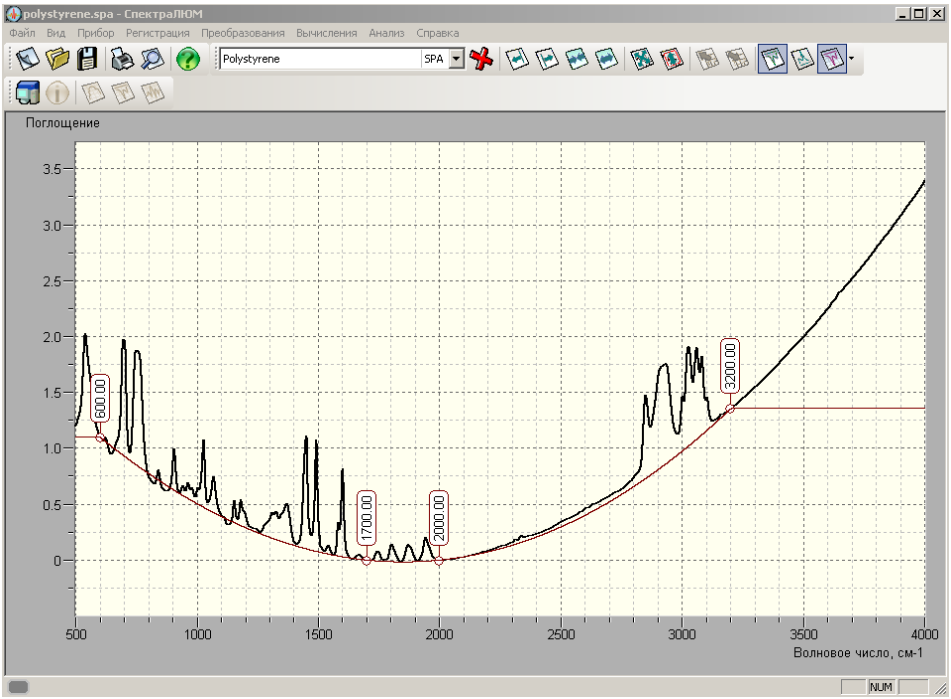


Рис. 6-19 Ручная коррекция базовой линии.
Ограниченный точками диапазон

8) Для удаления какого-либо значения волнового числа из таблицы исходных данных выделите необходимую строку и нажмите кнопку **Удалить**.

9) Для того чтобы скопировать данные таблицы (например, в Word) нажмите кнопку **Копировать**.

10) Нажмите кнопку **OK** (Рис. 6-16, Рис. 6-17).

11) В открывшемся диалоговом окне ***Идентификатор нового спектра*** (Рис. 6-10) в поле **Идентификатор образца** введите идентификатор нового спектра, по умолчанию программой предлагается “идентификатор образца (modified1)”.

12) Нажмите кнопку **OK**. В противном случае нажмите **Отмена** (идентификатор образца не будет изменен). Откроется главное окно программы с коррекцией базовой линии спектра (Рис. 6-20, Рис. 6-21).

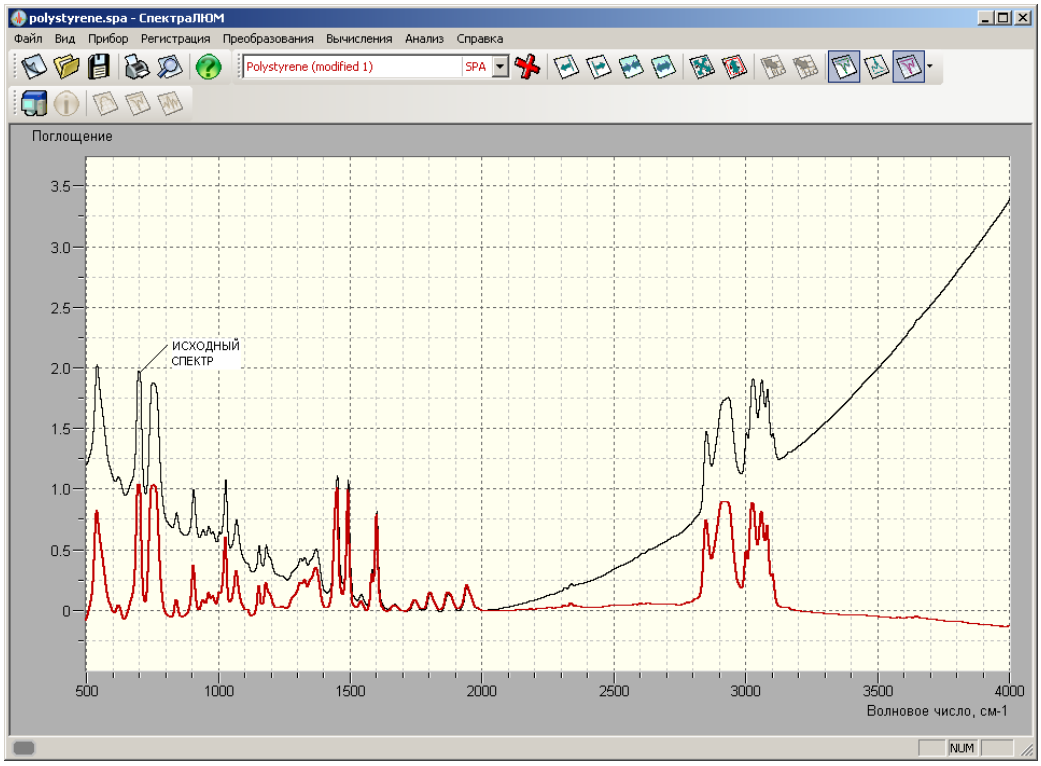


Рис. 6-20 Ручная коррекция базовой линии. Весь диапазон спектра. Результат

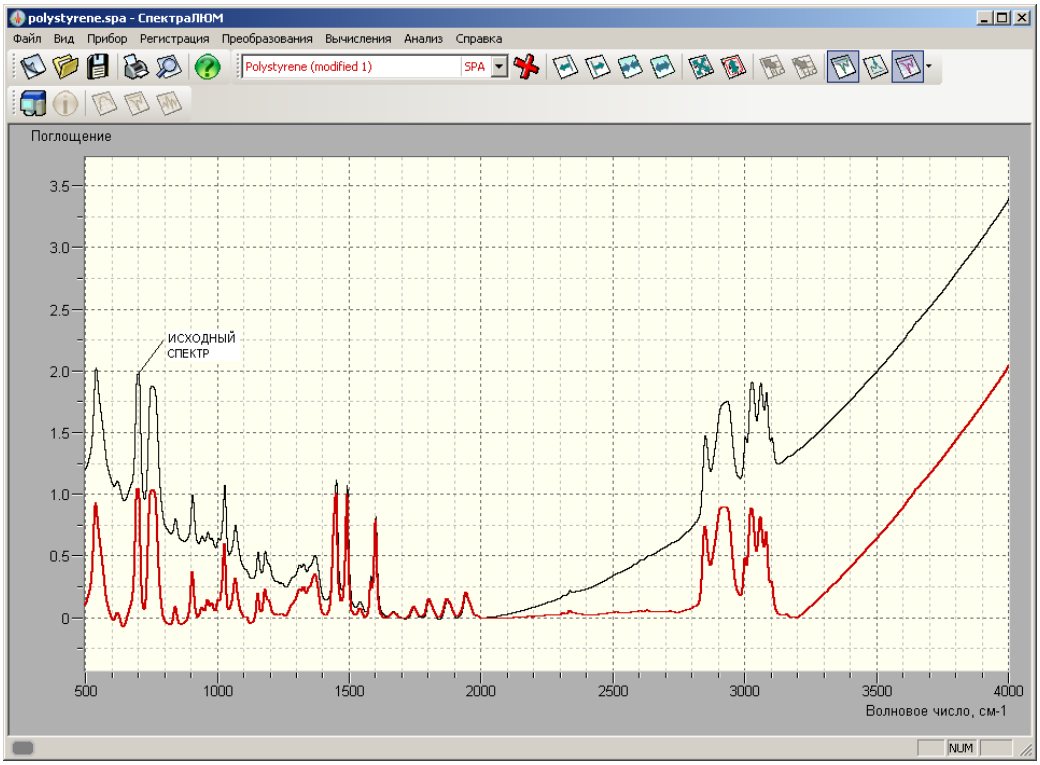


Рис. 6-21 Ручная коррекция базовой линии. Ограниченный точками диапазон. Результат

13) Для выхода из диалогового окна ***Ручная коррекция базовой линии*** без каких-либо изменений нажмите кнопку **Отмена**.

14) Для вызова справки данного окна нажмите кнопку **Справка**.

6.12 Взятие производных от спектра

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет брать производные различных порядков от активного спектра.

Дифференцирование спектров позволяет устранять постоянные составляющие спектра, а также улучшить разрешение пиков.

Увеличение порядка производной увеличивает эффект выделения интересующих пиков, но в тоже время усиливает уровень шума.

Перед процедурой взятия производных программой осуществляется сглаживание спектра по алгоритму Савицкого-Голея с использованием аппроксимирующего полинома четвертой степени. При этом оператор

может задавать число спектральных точек, определяющих ширину сглаживающего окна.

Данная операция применима для всех типов спектров, кроме фоновых и интерферограмм.

Для вычисления производной от спектра выполните следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Вычисления/Производные**. Откроется диалоговое окно ***Производные*** (Рис. 6-22).

2) В открывшемся диалоговом окне в секции **Настройки** из выпадающего списка **Производная** выберите порядок производной.

3) Из выпадающего списка **Число точек** выберите необходимое значение.

4) Нажмите кнопку **OK**.

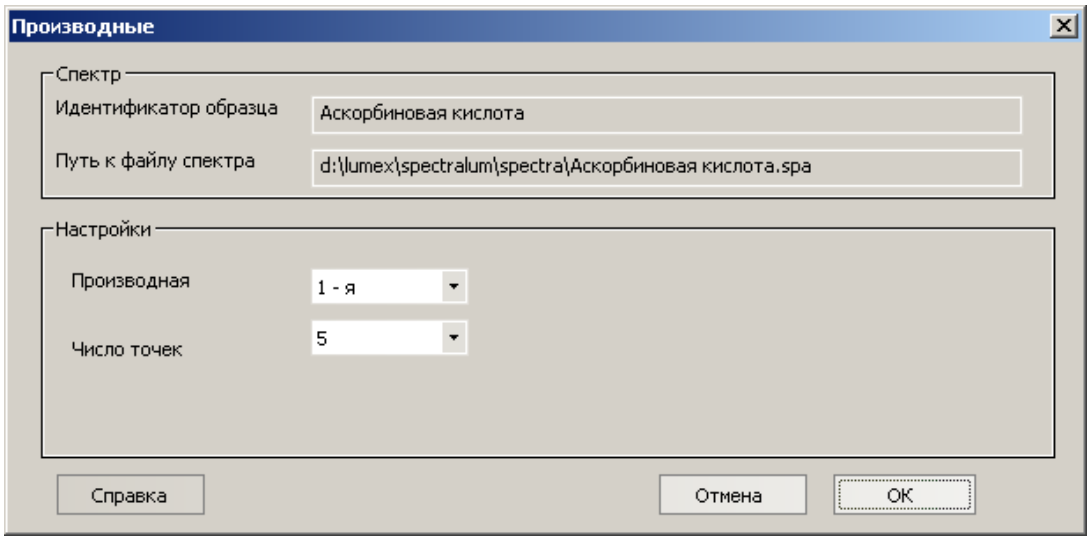


Рис. 6-22 Диалоговое окно «Производные»

5) В открывшемся диалоговом окне ***Идентификатор нового спектра*** (Рис. 6-10) в поле **Идентификатор образца** введите идентификатор нового спектра, по умолчанию программой предлагается “идентификатор образца (modified1)”.

6) Нажмите кнопку **OK**. В противном случае нажмите **Отмена** (идентификатор образца не будет изменен). Откроется главное окно программы с результатом вычисления производной (Рис. 6-23).

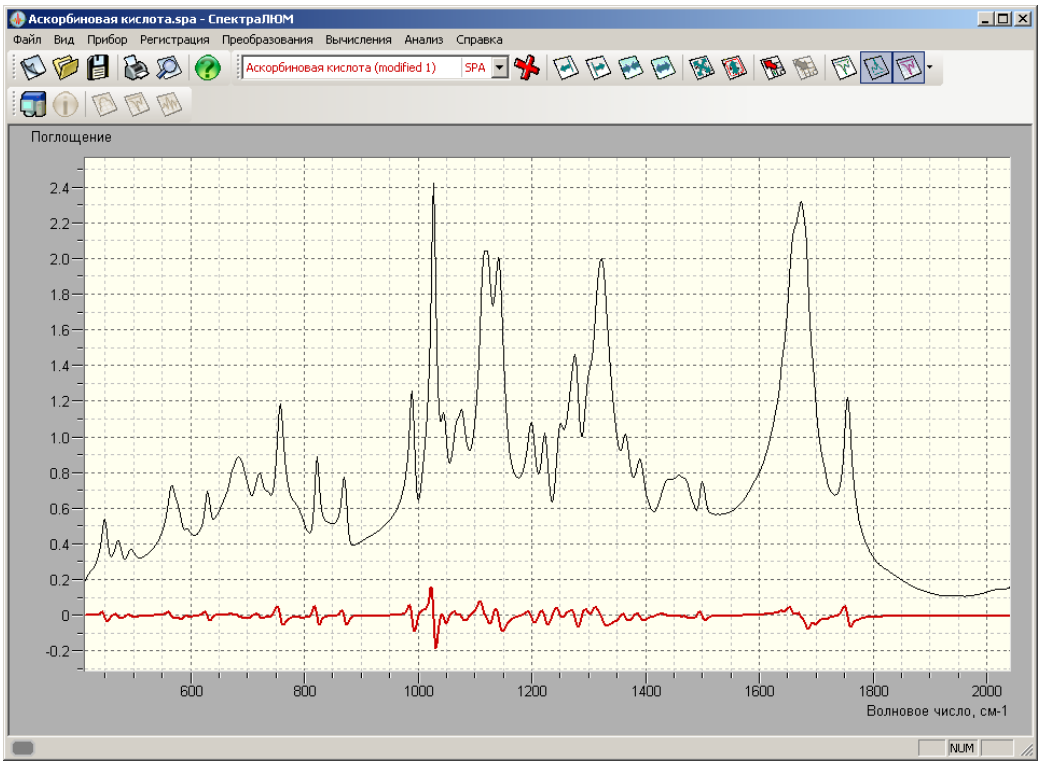


Рис. 6-23 Производные. Результат вычисления производной

7) Для выхода из диалогового окна ***Производные*** без каких-либо изменений нажмите кнопку **Отмена**.

8) Для вызова справки данного окна нажмите кнопку **Справка**.

6.13 Сглаживание

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет осуществлять сглаживание спектра, что может обеспечить снижение уровня шумов в преобразованном спектре.

Процедура сглаживания подразумевает замену ординаты каждой точки спектра сглаженным значением, вычисленным в заданной окрестности для каждой точки. Ширина окрестности устанавливается оператором в виде количества точек, задающих ширину спектрального интервала, в котором происходит вычисление сглаживающего значения. Вычисление сглаживающего значения возможно по двум, на выбор оператора, алгоритмам:

- Савицкого-Голея;

- сглаживающего среднего.

В алгоритме сглаживающего среднего усреднение данных в установленном интервале осуществляется с постоянным весовым коэффициентом.

В алгоритме Савицкого-Голея усреднение данных в установленном интервале осуществляется с весовыми коэффициентами, позволяющими аппроксимировать полученную кривую полиномом второй или четвертой степени. Степень полинома задается оператором.

Общие рекомендации: Ширина интервала (количество точек) должна быть приблизительно равна половине ширины интересующего пика. Если ширина интервала будет слишком мала, то сглаживание будет недостаточным. Если ширина интервала будет больше полуширины интересующего пика, то после сглаживания сильно исказится форма пика.

Искажение пиков меньше сказывается на их площади, чем на их высоте.

Данная операция применима ко всем типам спектров, кроме интерферограмм.

Для осуществления сглаживания спектра выполните следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Вычисления/Сглаживание**. Откроется диалоговое окно ***Сглаживание*** (Рис. 6-24, Рис. 6-25).

2) В открывшемся диалоговом окне в секции **Настройки** подсекции **Алгоритм** установите галочку в соответствующее окошко: **Савицкого-Голея** (Рис. 6-24 или **скользящего среднего** (Рис. 6-25)).

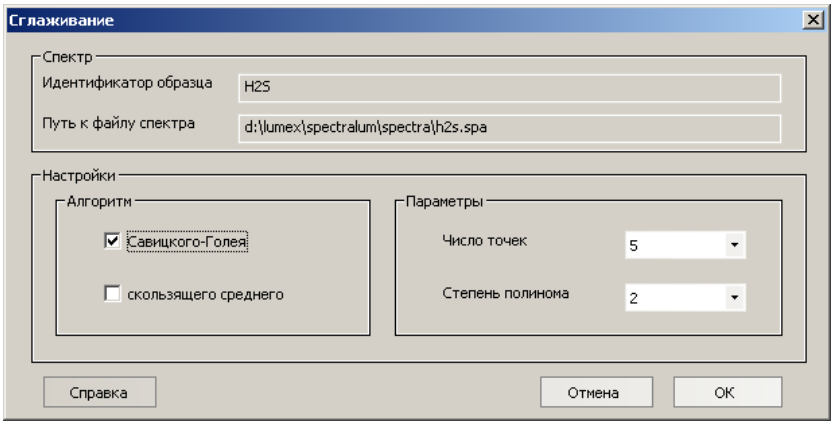


Рис. 6-24 Диалоговое окно «Сглаживание»

3) Из выпадающего списка **Число точек** подсекции **Параметры** (Рис. 6-24, Рис. 6-25) выберите необходимое значение.

4) В случае выбора алгоритма Савицкого-Голея в подсекции **Параметры** из выпадающего списка **Степень полинома** (Рис. 6-24) выберите необходимое значение. Для алгоритма скользящего среднего данный список неактивен (Рис. 6-25).

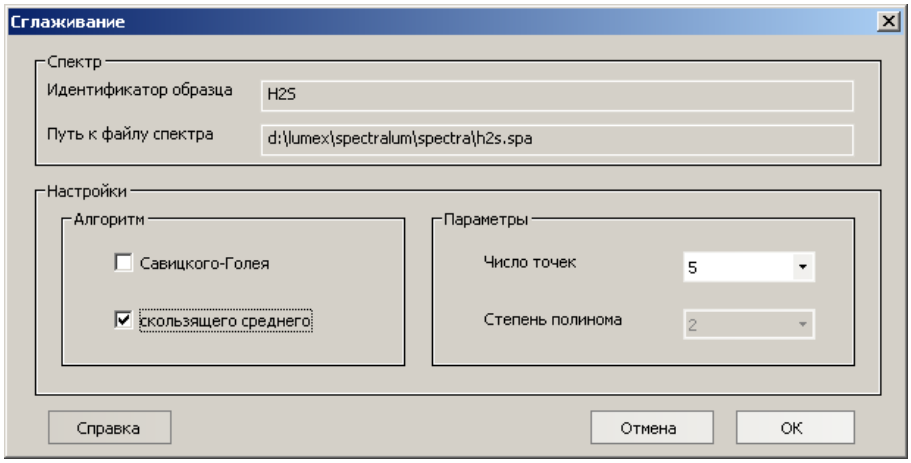


Рис. 6-25 Сглаживание. Исходные данные.
Алгоритм скользящего среднего

5) Нажмите кнопку **OK**.

6) В открывшемся диалоговом окне ***Идентификатор нового спектра*** (Рис. 6-10) в поле **Идентификатор образца** введите идентификатор нового спектра, по умолчанию программой предлагается “идентификатор образца (modified1)”.

7) Нажмите кнопку **OK**. В противном случае нажмите **Отмена** (идентификатор образца не будет изменен). Откроется главное окно программы с результатами сглаживания (Рис. 6-26).

8) Для выхода из диалогового окна ***Сглаживание*** без каких-либо изменений нажмите кнопку **Отмена**.

9) Для вызова справки данного окна нажмите кнопку **Справка**.

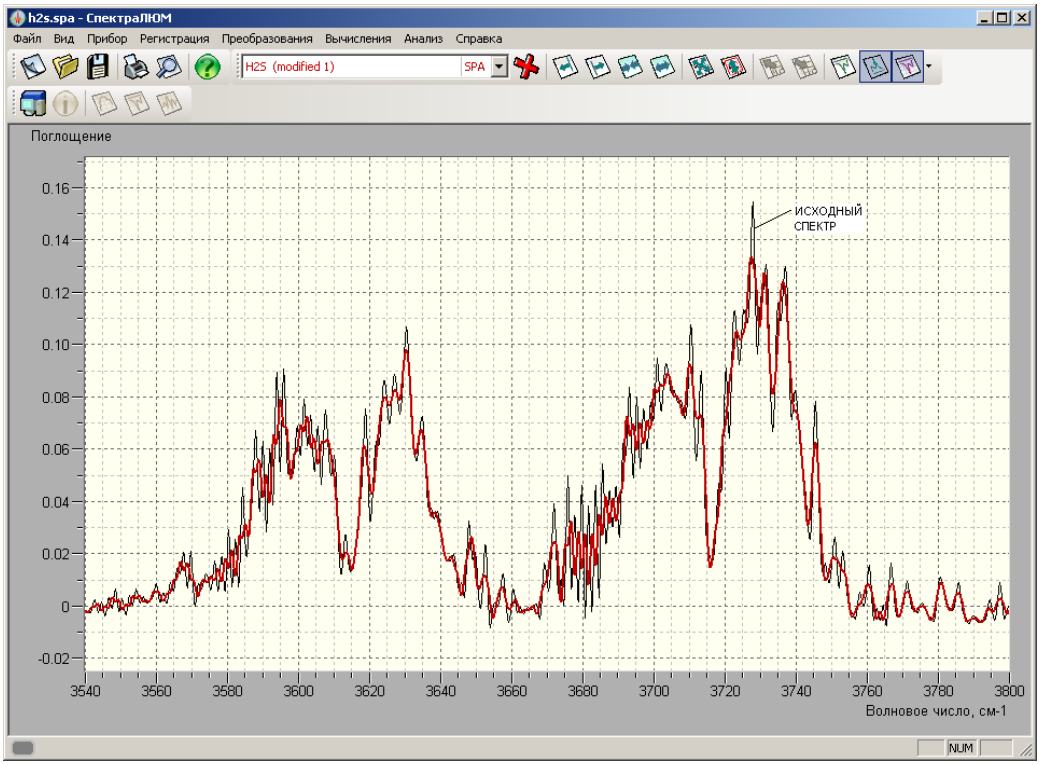


Рис. 6-26 Сглаживание. Результат сглаживания спектра по алгоритму Савицкого-Голея

6.14 Коррекция НПВО

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет проводить коррекцию спектров нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО).

Под коррекцией понимается пересчет интенсивностей спектра отражения с моделированием одинаковой глубины проникновения света для всех длин волн. Использование коррекции НПВО позволяет сравнивать полученные спектры отражения со спектрами пропускания таких же образцов.

Предлагаемая коррекция позволяет также оператору учитывать и коэффициент контакта образца с кристаллом.

Коэффициент контакта, который указывает оператор, может варьироваться от 0,0 до 0,9. Чем меньше коэффициент контакта, тем плотнее прижат образец к кристаллу. Так, например, коэффициент контакта, равный 0, может применяться для жидких проб.

Предлагаемая коррекция представляет собой умножение интенсивности спектра lg(1/R) на коэффициент *Gi*:

$$G_i = \frac{\lambda_{\min} \cdot (1-k)}{\lambda_i - \lambda_{\min} \cdot k} \qquad (6.14\text{-}1),$$

где $\lambda_{\min}$ - минимальная длина волны в спектре, нм; λ_i - длина волны в i-ой точке спектра, нм; k - коэффициент контакта.

Для выполнения коррекции НПВО выполните следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Вычисления/Коррекция НПВО**. Откроется диалоговое окно ***Коррекция спектров НПВО*** (Рис. 6-27).

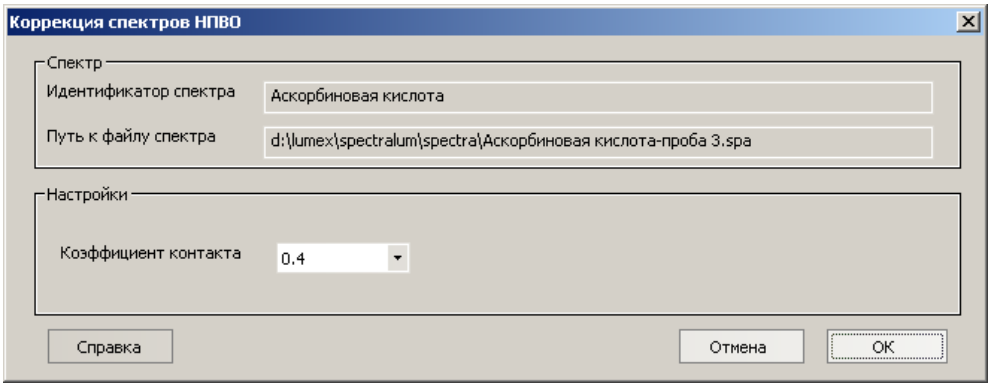


Рис. 6-27 Диалоговое окно «Коррекция спектров НПВО»

2) В открывшемся диалоговом окне в секции **Настройки** из выпадающего списка выберите **Коэффициент контакта** (значение фактора коррекции). **Коэффициент контакта** выбирается в диапазоне от 0,0 до 0,9.

3) Нажмите кнопку **OK**.

4) В открывшемся диалоговом окне ***Идентификатор нового спектра*** (Рис. 6-10) в поле **Идентификатор образца** введите идентификатор нового спектра, по умолчанию программой предлагается “идентификатор образца (modified1)”.

5) Нажмите кнопку **OK**. В противном случае нажмите **Отмена** (идентификатор образца не будет изменен). Откроется главное окно программы с результатом коррекции спектра НПВО (Рис. 6-28).

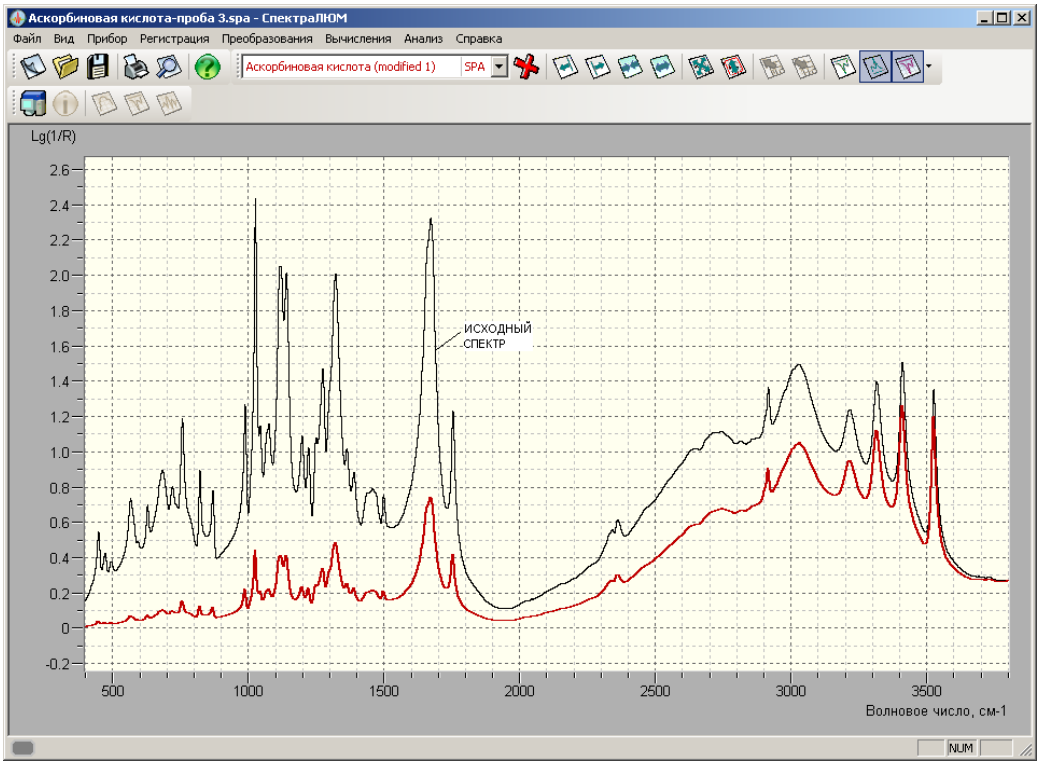


Рис. 6-28 Коррекция спектров НПВО. Результат коррекции спектра НПВО

6) Для выхода из диалогового ***окна Коррекция спектров НПВО*** без каких-либо изменений нажмите кнопку **Отмена**.

7) Для вызова справки данного окна нажмите кнопку **Справка**.

6.15 Преобразование Крамерса-Кронига

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет проводить преобразование Крамерса-Кронига над спектрами зеркального отражения, в результате которого исходный спектр пересчитывается в спектр поглощения.

Чтобы не было принципиальных конфликтов с отображением названий оси ординат в программе, преобразование Крамерса–Кронига осуществляется над активным спектром, предварительно переведенным в Lg(1/R).

Спектр, над которым выполнено преобразование Крамерса-Кронига представляет собой спектр поглощения, хотя в программе СпектраЛЮМ в данном случае ось ординат называется Lg(1/R).

При этом следует учитывать, что полученные значения поглощения не есть абсолютные величины, т.к. вычислены они в предположении, что поглощающий слой образца составляет 1мкм. В связи с этим, спектры, подвергнутые данному преобразованию, не рекомендуется использовать для количественного анализа.

Общие рекомендации:

Для получения более корректных результатов, края спектрального диапазона, в котором зарегистрирован исходный спектр, не должны содержать полос поглощения и (или) шумов.

6.16 Вырезание участков спектра

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет удалять нежелательные части спектра с последующей интерполяцией вырезанного участка базовой линией.

Вырезание участков спектра возможно, как в режиме коррекции CO_2 и H_2O с возможностью выбора для вырезания наиболее интенсивных полос поглощения CO_2 и H_2O пользователем из предложенных, так и в ручном, с возможностью ввода границ диапазонов вырезания участков спектра оператором.

Вырезание участков спектра осуществляется для всех типов спектров, кроме интерферограммы. Операция действует только на активный спектр.

6.16.1 Коррекция CO_2 и H_2O

В режиме коррекции CO_2 и H_2O осуществляется вырезание полос пропускания (поглощения) молекул CO_2 и H_2O по выбору пользователя. Для вырезания доступны следующие диапазоны:

- 580 - 780 $см^{-1}$ и 2225 - 2400 $см^{-1}$ для исключения полос углекислого газа;
- 1245 - 2050 $см^{-1}$, 3400 - 4150 $см^{-1}$ и 5100 - 5580 $см^{-1}$ для исключения полос паров воды.

Вырезанные участки интерполируются базовой линией. Сплайн базовой линии вычисляется по спектральным данным участков слева и справа от границ вырезаемого участка. Для этого используются диапазоны, указанные в таблице 1:

Таблица 1

Вырезаемый участок, $см^{-1}$	Участок слева от вырезаемого для вычисления сплайна базовой линии, $см^{-1}$	Участок справа от вырезаемого для вычисления сплайна базовой линии, $см^{-1}$
580 - 780	480 - 580	780 - 880
1245-2050	1100 - 1245	2050 – 2185
2225 - 2400	2075 - 2225	2400 - 2700
3400 - 4150	3100 – 3400	4150 - 4300
5100 - 5580	5000 - 5100	5580 - 5680

Для правильной интерполяции базовой линии на вырезанном участке необходимо убедиться, что в тех диапазонах, которые используются для определения сплайна базовой линии, нет посторонних пиков. Иначе интерполяция базовой линии на вырезанном участке будет некорректна.

Для вырезания полос CO_2 и H_2O выполните следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Вычисления/Вырезание участков спектра**.

2) Выберите метод вырезания: **Коррекция CO_2 и H_2O**. Откроется диалоговое окно ***Вырезание полос CO2 и H2O*** (Рис. 6-29).

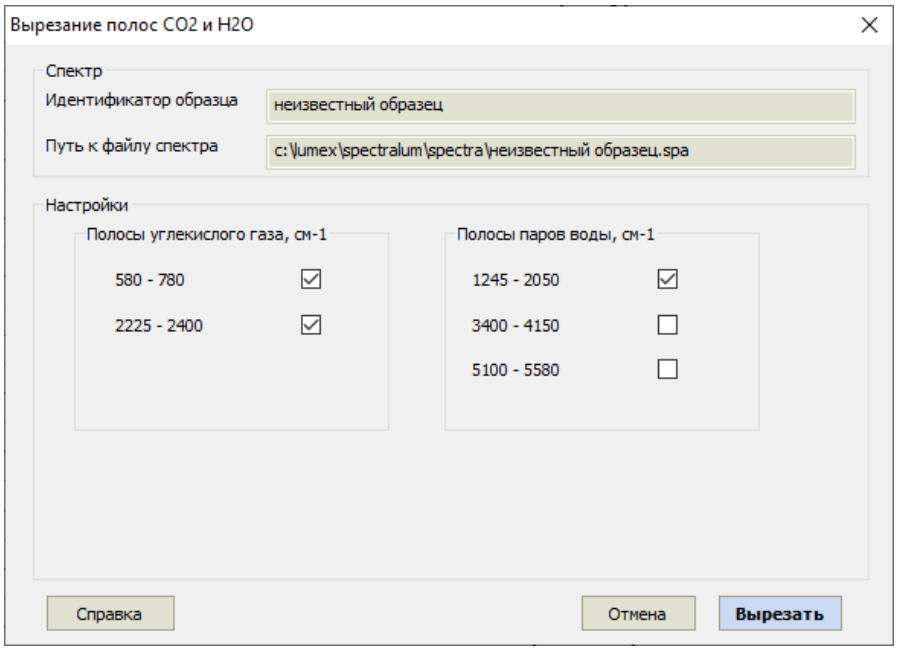


Рис. 6-29 Диалоговое окно «Вырезание полос CO_2 и H_2O»

3) В открывшемся окне в секции **Настройки** поставьте галочки напротив участков, которые необходимо вырезать.

4) Нажмите кнопку **Вырезать**. После этого может появиться окно с предупреждением, что какой-либо участок не может быть вырезан ввиду близости к границе спектрального диапазона. Это означает, что выбранный участок или базовая линия для его корректной интерполяции находится за границами диапазона зарегистрированного спектра. Закройте это сообщение, нажав кнопку **ОК**. Для выполнения требуемой операции необходимо зарегистрировать спектр в более широком диапазоне

5) В открывшемся диалоговом окне ***Идентификатор нового спектра*** (Рис. 6-10) в поле **Идентификатор образца** введите идентификатор нового спектра, по умолчанию программой предлагается “идентификатор образца (modified1)”.

6) Нажмите **ОК**. В противном случае нажмите **Отмена** (идентификатор образца не будет изменен). Откроется главное окно программы с корректированным спектром (Рис. 6-30, Рис. 6-31).

7) Для выхода из диалогового окна ***Вырезание полос CO2 и H2O*** без каких-либо изменений нажмите кнопку **Отмена** или крестик в правом верхнем углу окна.

8) Для вызова справки данного окна нажмите кнопку **Справка**.

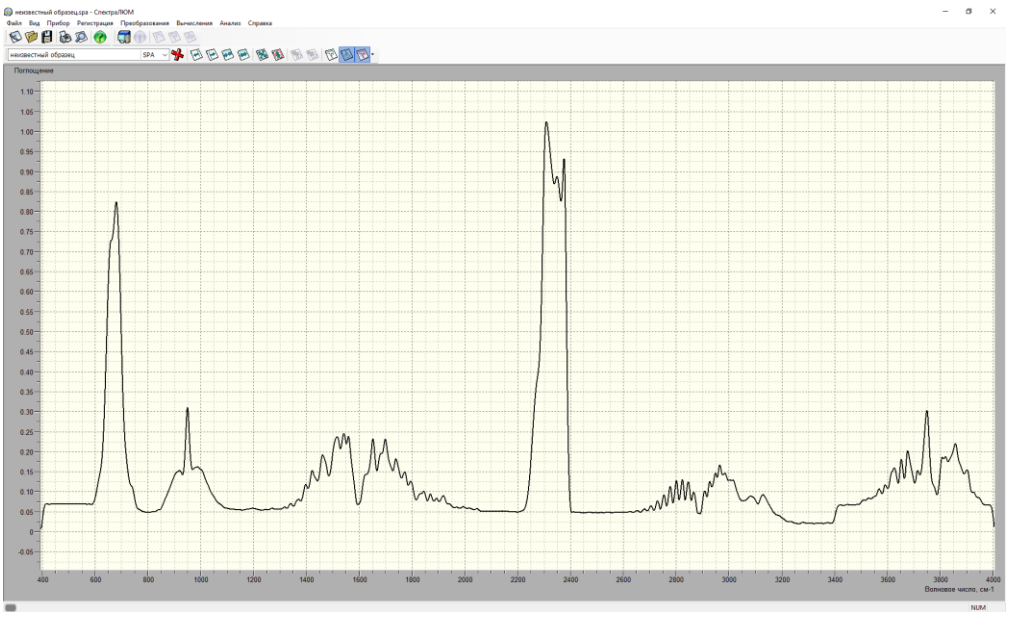


Рис. 6-30 Вырезание участков спектра. Коррекция CO_2 и H_2O. Исходный спектр

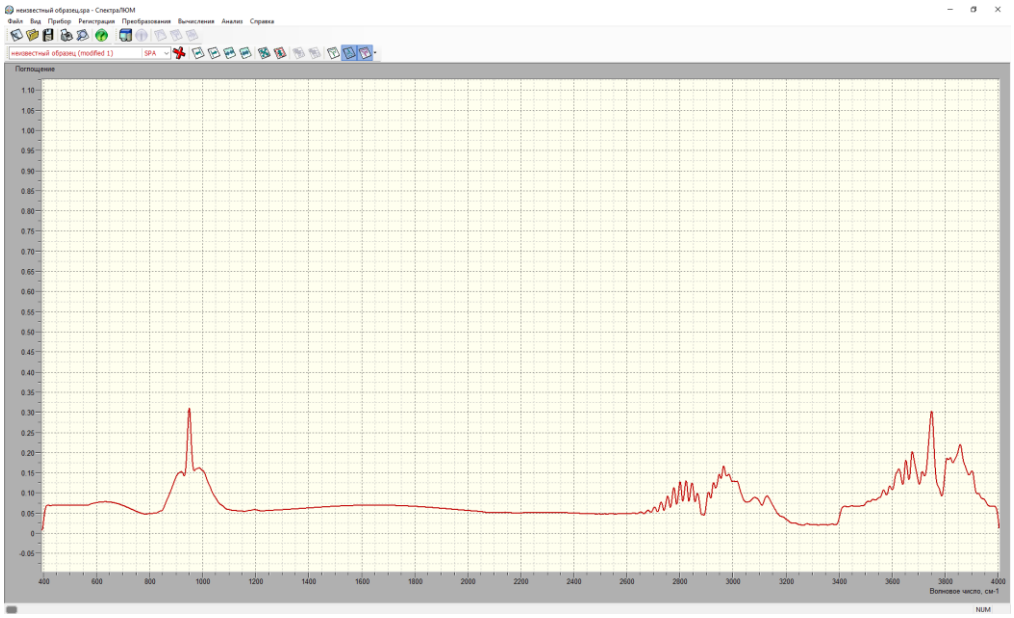


Рис. 6-31 Вырезание участков спектра. Коррекция CO_2 и H_2O. Результирующий спектр

6.16.2 Ручная коррекция

В ручном режиме коррекции оператор может сам ввести границы диапазона вырезания участков спектра. Вырезанные участки интерполируются базовой линией. Сплайн базовой линии вычисляется по спектральным данным участков по 100 $см^{-1}$ слева и справа от границ вырезаемого участка.

Для правильной интерполяции базовой линии на вырезанном участке необходимо убедиться, что в тех диапазонах, которые используются для определения сплайна базовой линии, нет посторонних пиков. Иначе интерполяция базовой линии на вырезанном участке будет некорректна.

Для осуществления ручной коррекции выполните следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Вычисления/Вырезание участков спектра**.

2) Выберите метод вырезания: **Ручная коррекция**. Откроется диалоговое окно ***Вырезание участков спектра*** (Рис. 6-32).

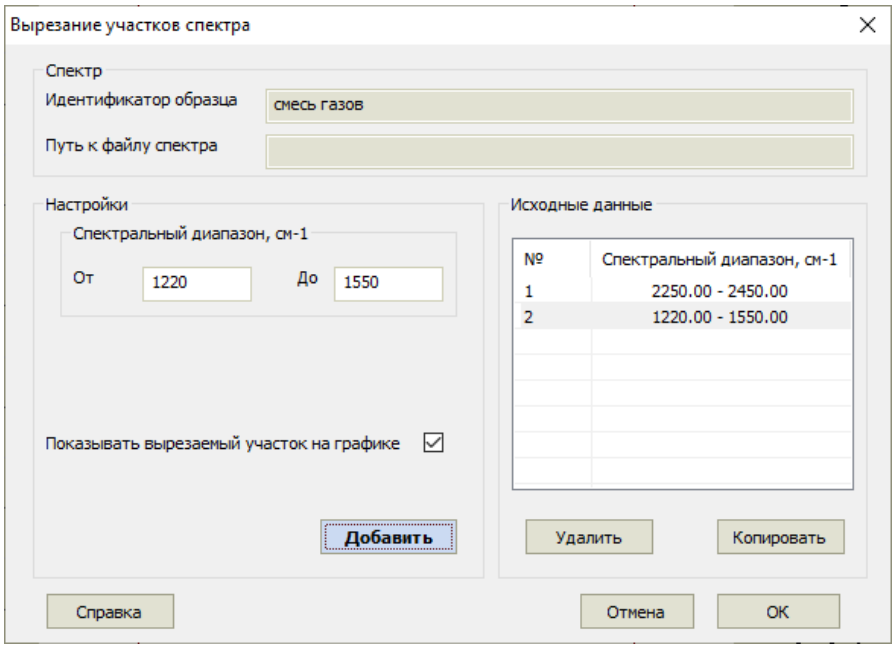


Рис. 6-32 Диалоговое окно «Вырезание участков спектра». Ручная коррекция

3) В открывшемся окне в секции **Настройки** подсекции **Спектральный диапазон** в строках **От** и **До** задайте необходимые границы диапазона.

4) Нажмите кнопку **Добавить**.

5) Повторите п.п. 3-4, если это требуется.

6) Установите галочку в окне **Показывать вырезаемый участок на графике** (Рис. 6-32), если необходимо, чтобы вырезаемые участки (вертикальные полосы другого цвета) отображались на спектре.

7) Для удаления какого-либо значения спектрального диапазона из таблицы исходных данных выделите необходимую строку и нажмите кнопку **Удалить**.

8) Для копирования содержимого таблицы исходных данных в буфер нажмите кнопку **Копировать**.

9) Нажмите кнопку **OK**.

10) В открывшемся диалоговом окне ***Идентификатор нового спектра*** (Рис. 6-10) в поле **Идентификатор образца** введите идентификатор нового спектра, по умолчанию программой предлагается “идентификатор образца (modified1)”.

11) Нажмите кнопку **OK**. В противном случае нажмите Отмена (идентификатор образца не будет изменен). Откроется главное окно программы с корректированным спектром (Рис. 6-33, Рис. 6-34).

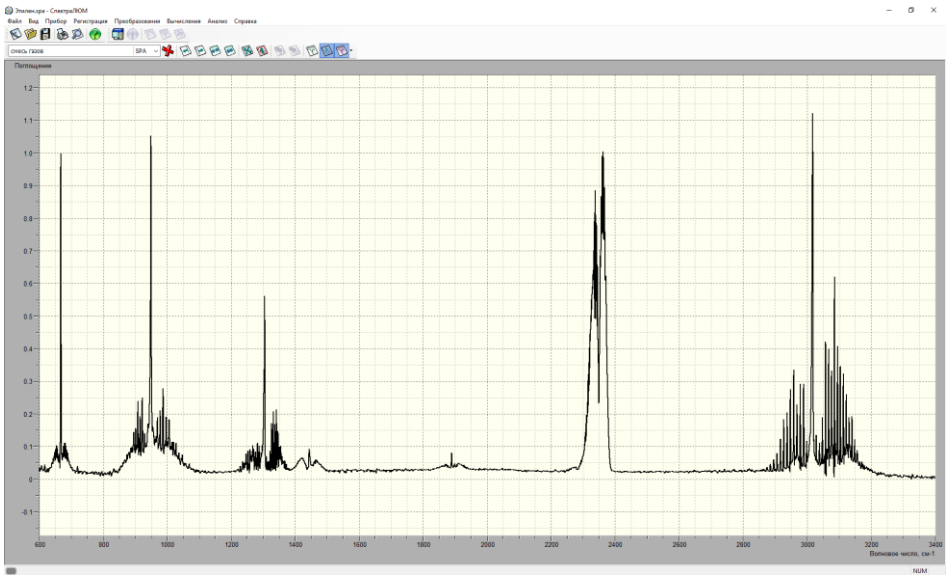


Рис. 6-33 Вырезание участков спектра. Ручная коррекция. Исходный спектр

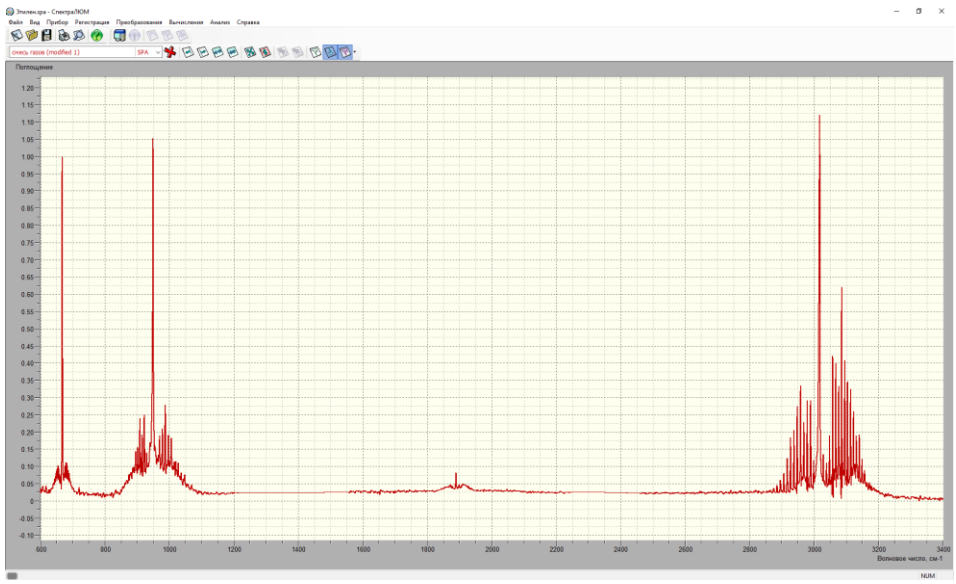


Рис. 6-34 Вырезание участков спектра. Результат ручной коррекции

12) Для выхода из диалогового окна ***Вырезание участков спектра*** без каких-либо изменений нажмите кнопку **Отмена**.

13) Для вызова справки данного окна нажмите кнопку **Справка**.

6.17 Изменение параметров спектра

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет изменять некоторые параметры ранее зарегистрированных спектров:

- сужать спектральный диапазон;
- уменьшать спектральное разрешение;
- увеличивать число точек в спектре путем дополнения интерферограммы нулями;
- проводить интерполяцию спектра на стандартную длину волны HeNe-лазера (0,6328 мкм);
- изменять идентификатор спектра.

Операции производятся для всех типов спектров, кроме интерферограмм.

Для изменения параметров спектра выполните следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Вычисления/Изменение параметров спектра**. Откроется диалоговое окно ***Изменение параметров спектра*** (Рис. 6-35).

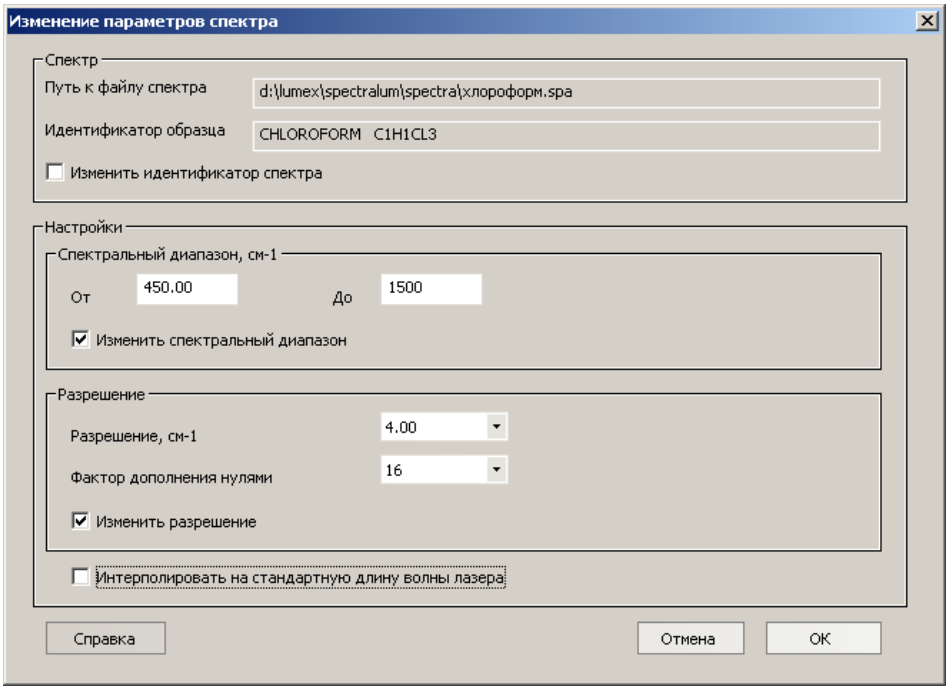


Рис. 6-35 Диалоговое окно «Изменение параметров спектра»

2) Для изменения спектрального диапазона в диалоговом окне ***Изменение параметров спектра*** в секции **Настройки** подсекции **Спектральный диапазон**, **см$^{-1}$** установите галочку в окне **Изменить спектральный диапазон**. В полях **От** и **До** установите требуемые границы диапазона. Изменять диапазон можно только в сторону сужения.

3) Для изменения спектрального разрешения в диалоговом окне ***Изменение параметров спектра*** в секции **Настройки** подсекции **Разрешение** установите галочку в окне **Изменить разрешение**. Из выпадающего списка **Разрешение** выберите соответствующее значение. Разрешение можно изменить только в сторону ухудшения, по отношению к разрешению, при котором спектр регистрировался. Для каждой модификации спектрометров ИнфраЛЮМ предлагаемый список разрешений будет индивидуален.

4) Для увеличения числа точек в спектре путем дополнения интерферограммы нулями в диалоговом окне ***Изменение параметров спектра*** в секции **Настройки** подсекции **Разрешение** установите галочку в окне **Изменить разрешение**. Из выпадающего списка **Фактор дополнения нулями** выберите соответствующее значение. Список значений фактора дополнения нулями формируется в зависимости от заданного разрешения

5) Для проведения интерполяции спектра на стандартную длину волны HeNe-лазера в диалоговом окне ***Изменение параметров спектра*** в секции **Настройки** установите галочку в окне **Интерполировать на стандартную длину волны лазера**. Если спектр уже приведен к стандартной длине волны – функция неактивна.

6) Нажмите кнопку **OK**.

7) В открывшемся диалоговом окне ***Идентификатор нового спектра*** (Рис. 6-10) в поле **Идентификатор образца** введите новый идентификатор, если это необходимо.

8) Нажмите кнопку **OK**. В противном случае нажмите **Отмена** (идентификатор образца не будет изменен).

9) Для изменения идентификатора спектра в диалоговом окне ***Изменение параметров спектра*** (Рис. 6-35) в секции **Спектр** установите галочку в окне **Изменить идентификатор спектра**. При этом строка **Идентификатор образца** становится доступной для ввода. Введите новый идентификатор и нажмите **OK**. Откроется главное окно программы. Сохраните спектр с новым идентификатором, если это необходимо.

10) Для выхода из диалогового окна ***Изменение параметров спектра*** без каких-либо изменений нажмите кнопку **Отмена**.

11) Для вызова справки данного окна нажмите кнопку **Справка**.

7 Анализ спектров

В программе «СпектраЛЮМ» реализован ряд возможностей по обработке спектральных данных, направленных на решение ряда специальных задач:

- идентификация образцов по зарегистрированным спектрам путем их сопоставления со спектрами из спектральных библиотек;
- сравнение спектров по Евклидовому расстоянию;

Обработка спектральных данных по некоторым методикам:

- определение массовой концентрации НП в воде по DIN 38409 H18;
- определение массовой концентрации нефтепродуктов (далее - НП) в воде по методике М 01-39-2010;
- определение массовой доли НП в твердых образцах по DIN 38409 H18;
- определение массовой доли НП в твердых образцах по инструкции ООО «ЛММ»;
- идентификация НП по приказу 241 Минприроды;
- определение транс-изомеров жирных кислот по ГОСТ 31754-2012;
- определение концентрации СБС в битуме.

Проведение количественного анализа состава веществ по созданным градуировочным зависимостям.

7.1 Поиск спектра в библиотеке

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет идентифицировать образцы по спектрам, которые сравниваются по определенным алгоритмам со спектрами известных веществ, сгруппированных по библиотекам.

Для реализации данной функции необходима дополнительная инсталляция программы: «Модуль библиотечного поиска».

При установленной программе «Модуль библиотечного поиска» для идентификации интересующего образца по зарегистрированному спектру сделайте следующее:

1) Нажмите на иконку **Поиск спектров в библиотеке**  на панели инструментов или в главном меню программы выберите пункт **Анализ/Поиск в библиотеке**.

2) Откроется главное окно программы «Модуль библиотечного поиска».

3) Для дальнейшей работы воспользуйтесь справкой данной программы и (или) *Руководством пользователя библиотечного модуля*.

7.2 Сравнение спектров по Евклидовому расстоянию

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет сравнивать два спектра друг с другом в указанном оператором спектральном диапазоне. В качестве оценки подобия используется Евклидово расстояние, вычисляемое по формуле:

$$ED = \sqrt{2}\sqrt{1 - \frac{\sum AY_i * AU_i}{\sqrt{\sum (AY_i)^2}\sqrt{\sum (AU_i)^2}}} \qquad (7.2\text{-}1)\ ,$$

где *AY* и *AU*- спектры 1 и 2.

Вычисляемое значение Евклидова расстояния может изменяться от 0 до 1,41. Чем меньше отличаются спектры друг от друга, тем ближе к нулю значение Евклидова расстояния.

Евклидово расстояние вычисляется для двух выбранных спектров, которые отображены на экране.

Программа «СпектраЛЮМ» так же отображает значения Евклидова расстояния пересчитанные в проценты соответствия. При изменении Евклидова расстояния от 0 до 1,41 процент соответствия изменяется от 100 до 0 процентов. Чем больше отличаются спектры друг от друга, тем ближе к нулю процент соответствия.

Евклидово расстояние и процент соответствия вычисляется для всех типов спектров, кроме фонового и интерферограмм.

Для выполнения операции сравнения спектров сделайте следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Анализ/Сравнение спектров**. Откроется диалоговое окно ***Сравнение спектров по Евклидовому расстоянию*** (Рис. 7-1).

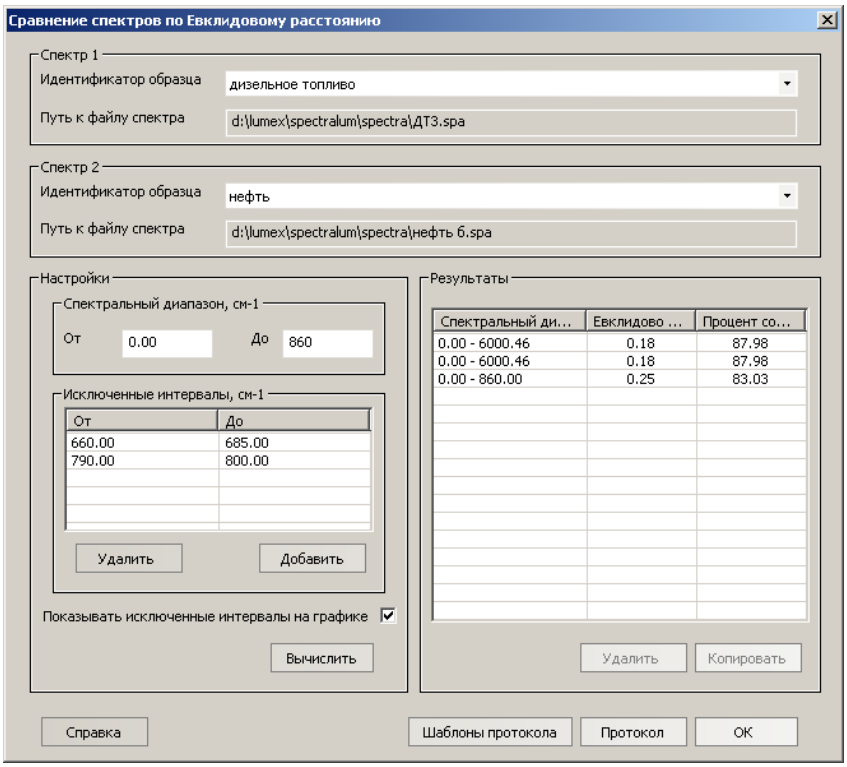


Рис. 7-1 Диалоговое окно «Сравнение спектров по Евклидовому расстоянию»

2) В открывшемся диалоговом окне в секции **Спектр 1** из выпадающего списка **Идентификатор образца** выберите необходимый спектр.

3) В секции **Спектр 2** из выпадающего списка **Идентификатор образца** выберите необходимый спектр для сравнения.

4) В секции **Настройки** в подсекции **Спектральный диапазон** в полях **От** и **До** введите границы диапазона, в котором спектры будут сравниваться. По умолчанию спектральный диапазон, имеющий общие точки для обоих сравниваемых спектров. Если у сравниваемых спектров нет общих точек пересечения спектрального диапазона, то в данной подсекции поля **От** и **До** остаются пустыми.

5) Нажмите кнопку **Вычислить**. В диалоговом окне ***Сравнение спектров по Евклидовому расстоянию*** (Рис. 7-1) будет заполнена таблица результатов: спектральный диапазон, Евклидово расстояние и процент соответствия. При выделении в таблице какого-либо результата, слева обновятся поля спектрального диапазона и таблицы исключенных диапазонов, если они были заданы для данного результата.

6) Для удаления найденных значений, выделите необходимые строки в таблице результатов и нажмите кнопку **Удалить**.

7) Для того чтобы скопировать данные из таблицы результатов (например, в Word), нажмите кнопку **Копировать**.

8) Для того чтобы добавить исключенные диапазоны **От** и **До**, которые не будут учитываться при вычислении Евклидова расстояния, нажмите кнопку **Добавить** в подсекции **Исключенные интервалы**. Откроется диалоговое окно ***Исключаемый интервал*** (Рис. 7-2).

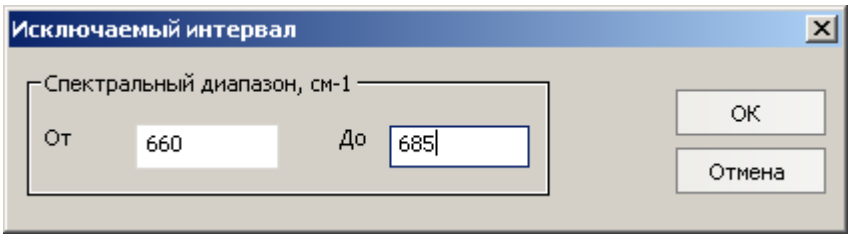


Рис. 7-2 Диалоговое окно «Исключаемый интервал»

9) В открывшемся диалоговом окне задайте необходимые границы диапазона.

10) Нажмите кнопку **OK**. Откроется диалоговое окно ***Сравнение спектров по Евклидовому расстояния*** с заполненной строкой в таблице **Исключённые интервалы** (Рис. 7-1).

11) Если добавление диапазона не требуется, нажмите кнопку **Отмена** (Рис. 7-2).

12) Для того, чтобы удалить исключенные диапазоны **От** и **До** в подсекции **Исключенные интервалы** выделите необходимый диапазон и нажмите кнопку **Удалить** (Рис. 7-1).

13) Для того чтобы исключенные интервалы, если они заданы, для данного результата отображались на графике, установите галочку в окне **Показать исключенные интервалы на графике** (Рис. 7-1). Все диапазоны, указанные в подсекции **Исключенные интервалы**

и диапазоны, выходящие за пределы заданного в подсекции **Спектральный диапазон**, будут заштрихованы (Рис. 7-3). Если не задано ни одного исключенного диапазона для соответствующего результата, то будут заштрихованы диапазоны, выходящие за пределы заданного в подсекции **Спектральный диапазон**.



Рис. 7-3 Сравнение спектров по Евклидовому расстоянию. Указаны исключенные интервалы на графике

14) Для просмотра протокола вычисления Евклидова расстояния нажмите кнопку **Протокол**.

15) Для настройки шаблона протокола нажмите кнопку **Шаблоны протокола**.

16) Для просмотра справки по данному диалоговому окну нажмите кнопку **Справка**.

17) Для выхода из данного диалогового окна нажмите кнопку **OK**.

7.3 Определение массовой концентрации нефтепродуктов в воде по DIN 38409 H18

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет проводить анализ проб и вычислять массовую концентрацию НП в пробах вод согласно методу DIN 38409 H18.

В соответствии с данной методикой спектр для анализа нефтепродуктов в воде должен быть зарегистрирован в диапазоне 2450-3300 $см^{-1}$. Вычисление концентрации осуществляется по формулам:

$$X = \frac{130 \times V_{ext.} \times f \times (1{,}1 \times A1 + 0{,}12 \times A2 + 0{,}19 \times A3)}{V_s \times d \times R} \quad (7.3\text{-}1),$$

$$X = \frac{140 \times V_{ext.} \times f \times (0{,}12 \times A2 + 0{,}19 \times A3)}{V_s \times d \times R} \quad (7.3\text{-}2),$$

где X-концентрация нефтепродуктов, $мг/дм^3$;

Vext. - объем экстрагента, $см^3$;

f - коэффициент разбавления;

A1 - максимум оптической плотности в диапазоне волновых чисел (3030±25) $см^{-1}$;

A2 - максимум оптической плотности в диапазоне волновых чисел (2960±15) $см^{-1}$;

A3 - максимум оптической плотности в диапазоне волновых чисел (2925±15) $см^{-1}$;

Vs - объем пробы, $дм^3$;

d - оптическая длина кюветы, см;

R - полнота экстракции, %.

Формула (7.3-1) используется, когда A1≠0. Формула (7.3-2) применяется в том случае, когда A1=0.

Вычисления производятся для спектров, отображаемых в пропускании или поглощении.

Для осуществления анализа нефтепродуктов в воде по DIN 38409 H18 выполните следующее:

1) Подготовьте пробу согласно методике определения нефтепродуктов в воде по DIN 38409 H18;

2) Зарегистрируйте спектр пропускания с параметрами, изложенными в методике определения нефтепродуктов в воде по DIN 38409 H18 (Рис. 7-4);

3) В главном меню программы выберите пункт **Анализ/По методикам/Нефтепродукты в воде по DIN 38409 H18**. Откроется диалоговое окно ***Нефтепродукты в воде по DIN 38409 H18*** (Рис. 7-5);

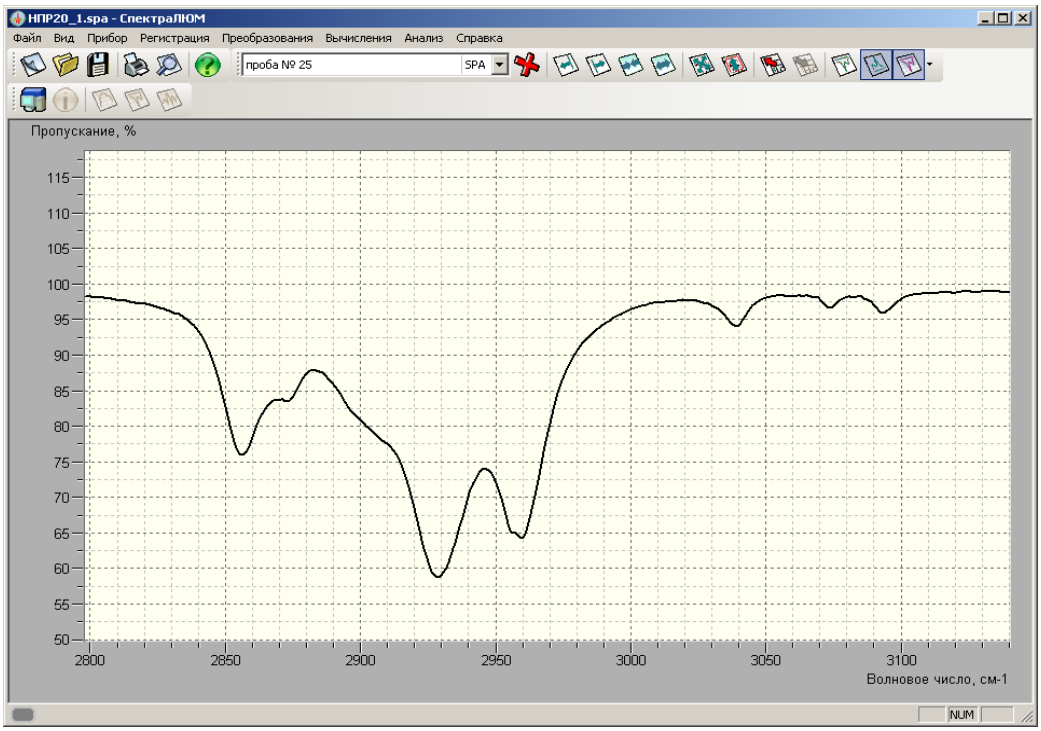


Рис. 7-4 Зарегистрированный спектр нефтепродуктов в воде

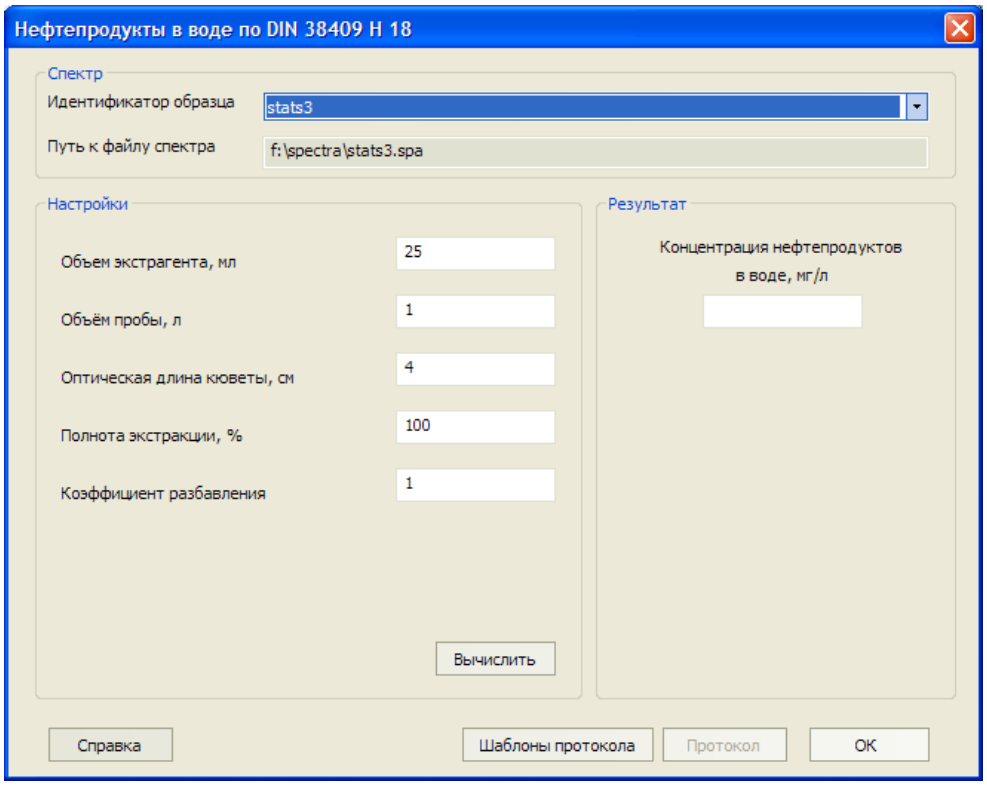


Рис. 7-5 Диалоговое окно «Нефтепродукты в воде по DIN 38409 H18»

4) В открывшемся диалоговом окне в секции **Спектр** из выпадающего списка **Идентификатор образца** выберите спектр.

5) В секции **Настройки** ведите следующие параметры: объём экстрагента, мл; объём пробы, л; оптическая длина кюветы, см; полнота экстракции, %; коэффициент разбавления;

6) Нажмите кнопку **Вычислить**;

7) В строке **Концентрация нефтепродуктов в воде, мг/л** (Рис. 7-5) будет выдан результат;

8) Для просмотра протокола вычисления нефтепродуктов в воде нажмите кнопку **Протокол**;

9) Для настройки шаблона протокола нажмите кнопку **Шаблоны протокола**;

10) Для просмотра справки по данному диалоговому окну нажмите кнопку **Справка**;

11) Для выхода из данного диалогового окна нажмите кнопку **OK**.

7.4 Определение массовой концентрации нефтепродуктов в воде по методике М 01-39-2010

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет проводить анализ проб и вычислять массовую концентрацию НП в пробах вод согласно методике М 01-39-2010.

В соответствии с данной методикой спектр для анализа нефтепродуктов в воде должен быть зарегистрирован в диапазоне 2450-3300 $см^{-1}$. Вычисление концентрации осуществляется по формуле:

$$X = \frac{100 \times V_{ext} \times f \times (1{,}1 \times A1 + 0{,}12 \times A2 + 0{,}19 \times A3)}{V_s \times d \times R}, \qquad (7.4\text{-}1)$$

где X - концентрация нефтепродуктов, $мг/дм^3$;

V_{ext} - объем экстрагента, $см^3$;

f - коэффициент разбавления;

$A1$ - максимум оптической плотности в диапазоне волновых чисел (3030±25) $см^{-1}$;

$A2$ - максимум оптической плотности в диапазоне волновых чисел (2960±15) $см^{-1}$;

$A3$ - максимум оптической плотности в диапазоне волновых чисел (2925±15) $см^{-1}$;

V_s - объем пробы, $дм^3$;

d - оптическая длина кюветы, см;

R - полнота экстракции, %.

Вычисления производятся для спектров, отображаемых в пропускании и поглощении.

Для осуществления анализа нефтепродуктов в воде по М 01-39-2010 выполните следующее:

1) Подготовьте пробу согласно методике определения нефтепродуктов в воде по М 01-39-2010;

2) Зарегистрируйте спектр пропускания с параметрами, изложенными в методике определения нефтепродуктов в воде по М 01-39-2010;

3) В главном меню программы выберите пункт **Анализ/По методикам/Нефтепродукты в воде по М 01-39-2010**. Откроется диалоговое окно ***Нефтепродукты в воде по М 01-39-2010*** аналогичное диалоговому окну (Рис. 7-5);

4) В открывшемся диалоговом окне в секции **Спектр** из выпадающего списка **Идентификатор образца** выберите спектр;

5) В секции **Настройки** введите следующие параметры: объём экстрагента, мл; объём пробы, л; оптическая длина кюветы, см; полнота экстракции, %; коэффициент разбавления

6) Нажмите кнопку **Вычислить**;

7) В строке **Концентрация нефтепродуктов в воде, мг/л** будет выдан результат;

8) Для просмотра протокола вычисления нефтепродуктов в воде нажмите кнопку **Протокол**;

9) Для настройки шаблона протокола нажмите кнопку **Шаблоны протокола**;

10) Для просмотра справки по данному диалоговому окну нажмите кнопку **Справка**;

11) Для выхода из данного диалогового окна нажмите кнопку **ОК**.

7.5 Определение массовой концентрации нефтепродуктов в воде по методу IP 426

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет проводить анализ проб и вычислять массовую концентрацию НП в пробах сточных вод согласно методу IP 426.

В соответствии с данной методикой спектр для анализа нефтепродуктов в воде должен быть зарегистрирован в диапазоне 2450-3300 $см^{-1}$. Вычисление концентрации осуществляется по формуле:

$$X_k = \frac{\left[X \cdot A_1 + Y \cdot A_2 + Z \cdot \left(A_3 - \frac{A_1}{F}\right)\right] \cdot L_0 \cdot V \cdot D}{L \cdot V_{\text{пр}}}, \qquad (7.5\text{-}1)$$

где X_k - концентрация нефтепродуктов, мг/л;

X, Y, Z, F – коэффициенты, определенные при выполнении градуировки;

A_1 - максимум оптической плотности в диапазоне волновых чисел (2925±15) $см^{-1}$;

A_2 - максимум оптической плотности в диапазоне волновых чисел (2960±15) $см^{-1}$;

A_3 - максимум оптической плотности в диапазоне волновых чисел (3030±25) $см^{-1}$;

L_o – длина оптического пути градуировочной кюветы, мм;

V - объем экстрагента, мл;

D - коэффициент разбавления;

L - длина оптического пути рабочей кюветы, мм;

$V_{пр}$ - объем пробы, мл.

Вычисления производятся для спектров, отображаемых в пропускании и поглощении.

Для осуществления анализа нефтепродуктов в воде по методу IP 426 выполните следующее:

1) Проведите градуировку, как описано в методе IP 426, и определите значения коэффициентов X, Y, Z, F;

2) Подготовьте пробу как указано в методе IP 426;

3) Зарегистрируйте спектр пропускания с параметрами, изложенными в методе IP 426;

4) В главном меню программы выберите пункт **Анализ/По методикам/Нефтепродукты в воде по IP 426**. Откроется диалоговое окно ***Нефтепродукты в воде по IP 426*** (Рис. 7-6);

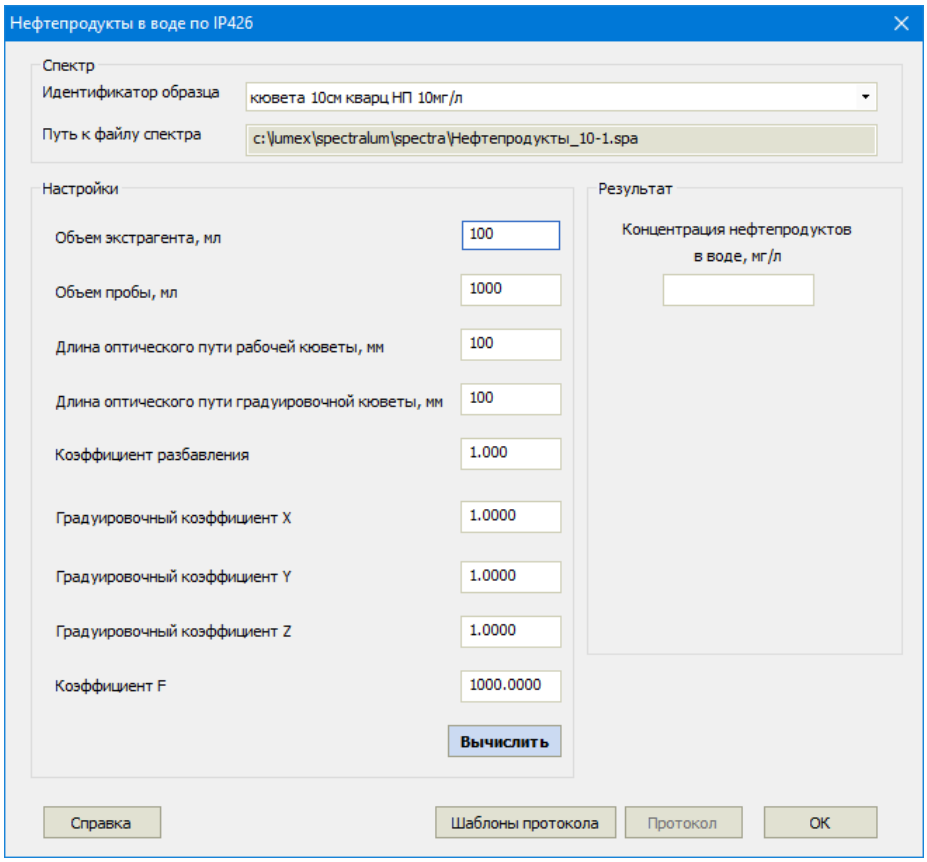


Рис. 7-6 Диалоговое окно «Нефтепродукты в воде по IP 426»

5) В открывшемся диалоговом окне в секции **Спектр** из выпадающего списка **Идентификатор образца** выберите спектр;

6) В секции **Настройки** введите следующие параметры: объём экстрагента, мл; объем пробы, мл; длина оптического пути рабочей кюветы, мм; длина оптического пути градуировочной кюветы, мм; коэффициент разбавления; градуировочный коэффициент X; градуировочный коэффициент Y; градуировочный коэффициент Z; коэффициент F.

7) Нажмите кнопку **Вычислить**;

8) В строке **Концентрация нефтепродуктов в воде, мг/л** будет выдан результат;

9) Для просмотра протокола вычисления нефтепродуктов в воде нажмите кнопку **Протокол**;

10) Для настройки шаблона протокола нажмите кнопку **Шаблоны протокола**;

11) Для просмотра справки по данному диалоговому окну нажмите кнопку **Справка**;

12) Для выхода из данного диалогового окна нажмите кнопку **ОК**.

7.6 Определение массовой доли нефтепродуктов в твердых образцах по DIN 38409 H18

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет проводить анализ проб и вычислять массовую долю НП в твердых образцах по DIN 38409 H18.

В соответствии с данной методикой спектр для анализа нефтепродуктов в твердых образцах должен быть зарегистрирован в диапазоне 2450-3300 см$^{-1}$. Вычисление осуществляется по формулам:

$$X = \frac{13000000 \times V_{ext.} \times f \times (1{,}1 \times A1 + 0{,}12 \times A2 + 0{,}19 \times A3)}{m \times d \times R} \quad (7.6\text{-}1),$$

$$X = \frac{14000000 \times V_{ext.} \times f \times (0{,}12 \times A2 + 0{,}19 \times A3)}{m \times d \times R} \quad (7.6\text{-}2),$$

где X-концентрация нефтепродуктов, мг/кг;

Vext. - объем экстрагента, см^3;

f - коэффициент разбавления;

A1 - максимум оптической плотности в диапазоне волновых чисел (3030±25) см$^{-1}$;

A2 - максимум оптической плотности в диапазоне волновых чисел (2960±15) см$^{-1}$;

A3 - максимум оптической плотности в диапазоне волновых чисел (2925±15) см$^{-1}$;

m – масса пробы, г;

d - оптическая длина кюветы, см;

R - полнота экстракции, %.

Формула (7.5-1) используется, когда A1≠0. Формула (7.5-2) применяется в том случае, когда A1=0.

Вычисления производятся для спектров, отображаемых в пропускании или поглощении.

Для осуществления анализа нефтепродуктов в твердых образцах по DIN 38409 H18 выполните следующее:

1) Подготовьте пробу согласно методике определения нефтепродуктов в твердых образцах по DIN 38409 H18;

2) Зарегистрируйте спектр пропускания с параметрами, изложенными в методике определения нефтепродуктов в твердых образцах по DIN 38409 H18 (Рис. 7-7);

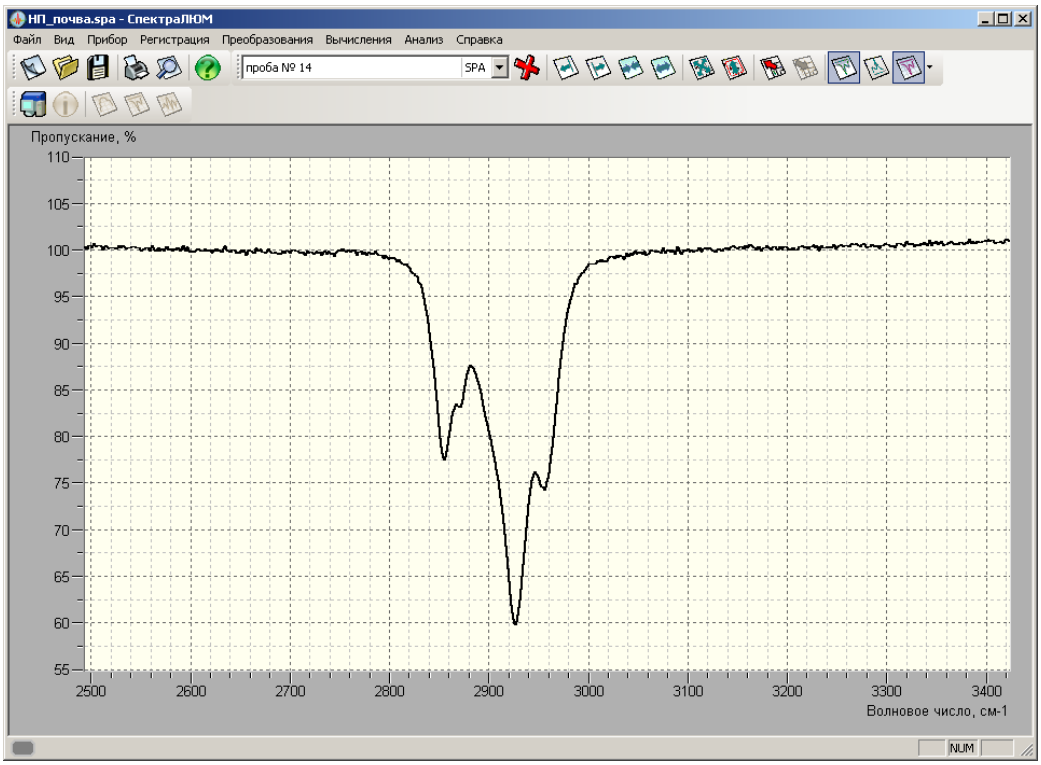


Рис. 7-7 Зарегистрированный спектр нефтепродуктов в экстракте пробы

3) В главном меню программы выберите пункт **Анализ/По методикам/Нефтепродукты в твердых образцах по DIN 38409 H18**. Откроется диалоговое окно ***Нефтепродукты в твердых образцах по DIN 38409 H18*** (Рис. 7-8);

4) В открывшемся диалоговом окне в секции **Спектр** из выпадающего списка **Идентификатор образца** выберите спектр;

5) В секции **Настройки** введите следующие параметры: объём экстрагента, мл; масса пробы, г; оптическая длина кюветы, см; полнота экстракции, %; коэффициент разбавления; доля сухого вещества в пробе, %;

6) Нажмите кнопку **Вычислить**;

7) В строке **Концентрация нефтепродуктов, мг/кг** (Рис. 7-8) будет выдан результат;

8) Для просмотра протокола вычисления нефтепродуктов в воде нажмите кнопку **Протокол**;

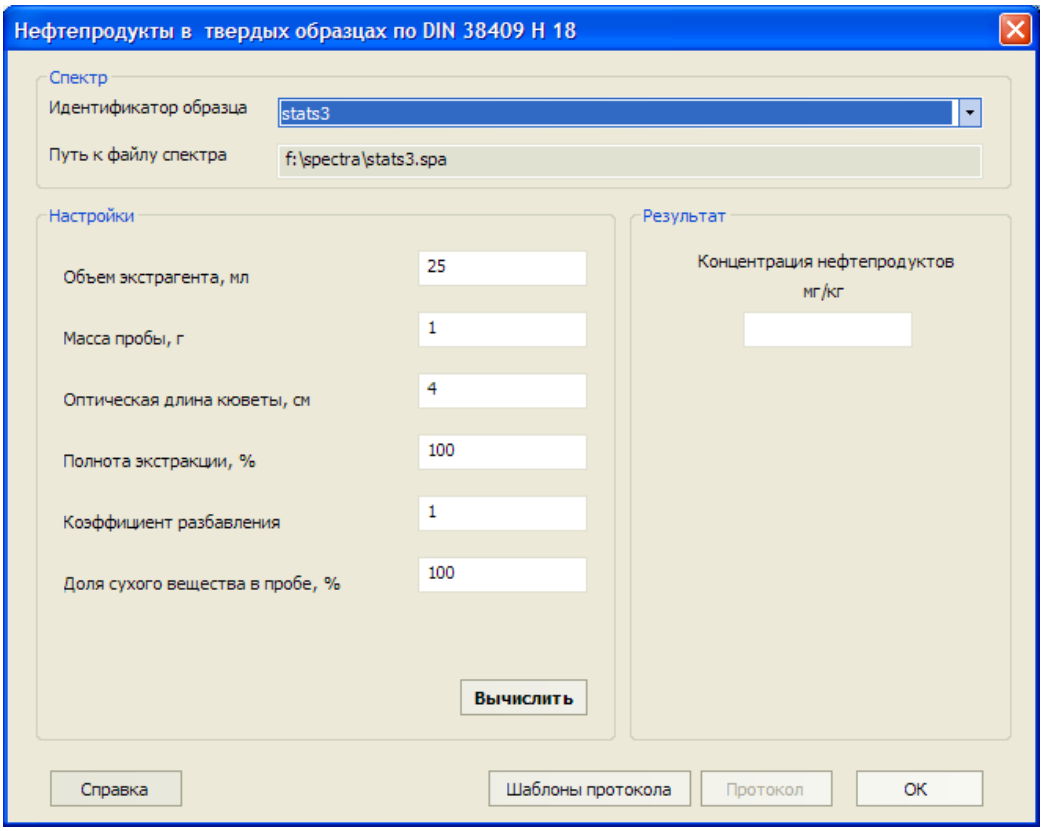


Рис. 7-8 Диалоговое окно «Нефтепродукты в твердых образцах по DIN 38409 H18»

9) Для настройки шаблона протокола нажмите кнопку **Шаблоны протокола**.

10) Для просмотра справки по данному диалоговому окну нажмите кнопку **Справка**.

11) Для выхода из данного диалогового окна нажмите кнопку **OK**.

7.7 Определение массовой доли НП в твердых образцах по инструкции ООО «ЛММ»

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет проводить анализ проб и вычислять массовую долю НП в твердых образцах согласно инструкции, разработанной ООО «ЛММ».

В соответствии с данной методикой спектр для анализа нефтепродуктов в твердых образцах должен быть зарегистрирован в диапазоне 2450-3300 см$^{-1}$. Вычисление концентрации осуществляется по формуле:

$$X = \frac{10000000 \times V_{ext.} \times f \times (1{,}1 \times A1 + 0{,}12 \times A2 + 0{,}19 \times A3)}{m \times d \times R \times S} \quad (7.7\text{-}1),$$

где X- массовая доля нефтепродуктов, мг/кг;

Vext. - объем экстрагента, см^3;

f - коэффициент разбавления;

A1 - максимум оптической плотности в диапазоне волновых чисел (3030±25) см$^{-1}$;

A2 - максимум оптической плотности в диапазоне волновых чисел (2960±15) см$^{-1}$;

A3 - максимум оптической плотности в диапазоне волновых чисел (2925±15) см$^{-1}$;

m – масса пробы, г;

d - оптическая длина кюветы, см;

R - полнота экстракции, %;

S - доля сухого вещества в пробе, %.

Вычисления производятся для спектров, отображаемых в пропускании и поглощении.

Для осуществления анализа нефтепродуктов в твердых образцах по инструкции ООО «ЛММ» выполните следующее:

1) Подготовьте пробу согласно инструкции, разработанной ООО «ЛММ»;

2) Зарегистрируйте спектр пропускания с параметрами, изложенными в инструкции, разработанной ООО «ЛММ»;

3) В главном меню программы выберите пункт **Анализ/По методикам/Нефтепродукты в твердых образцах по Инструкции ООО «ЛММ»**. Откроется диалоговое окно ***Нефтепродукты в твердых образцах*** аналогичное диалоговому окну (Рис. 7-8);

4) В открывшемся диалоговом окне в секции **Спектр** из выпадающего списка **Идентификатор образца** выберите спектр;

5) В секции **Настройки** введите следующие параметры: объём экстрагента, мл; масса пробы, г; оптическая длина кюветы, см; полнота экстракции, %; коэффициент разбавления; доля сухого вещества в пробе, %;

6) Нажмите кнопку **Вычислить**;

7) В строке **Концентрация нефтепродуктов, мг/кг** будет выдан результат;

8) Для просмотра протокола вычисления нефтепродуктов в твердых образцах нажмите кнопку **Протокол**;

9) Для настройки шаблона протокола нажмите кнопку **Шаблоны протокола**;

10) Для просмотра справки по данному диалоговому окну нажмите кнопку **Справка**;

11) Для выхода из данного диалогового окна нажмите кнопку **OK**.

7.8 Идентификация нефтепродуктов по приказу 241 Минприроды

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет осуществлять идентификацию нефтепродуктов путем сравнения спектра анализируемой пробы со спектром базовой пробы по методике, изложенной в приказе 241 Минприроды.

В соответствии с данной методикой осуществляется сопоставление спектров на наличие у них характерных пиков поглощения с последую-

щим сравнением значений их оптических плотностей. Поиск характерных пиков осуществляется в следующих диапазонах:

- Пик 1 – в диапазоне 1600 ± 10 см$^{-1}$;
- Пик 2 – в диапазоне 1375 ± 5 см$^{-1}$;
- Пик 3 – в диапазоне 1310 ± 5 см$^{-1}$;
- Пик 4 – в диапазоне 1170 ± 10 см$^{-1}$;
- Пик 5 – в диапазоне 1030 ± 10 см$^{-1}$;
- Пик 6 – в диапазоне 970 ± 5 см$^{-1}$;
- Пик 7 – в диапазоне 870 ± 5 см$^{-1}$;
- Пик 8 – в диапазоне 810 ± 5 см$^{-1}$;
- Пик 9 – в диапазоне 770 ± 5 см$^{-1}$;
- Пик 10 – в диапазоне 750 ± 5 см$^{-1}$;
- Пик 11 – в диапазоне 720 ± 5 см$^{-1}$;
- Пик 12 – в диапазоне 695 ± 5 см$^{-1}$.

Критерием идентификации является значения параметров A_i, рассчитываемых по формуле:

$$A_i = \frac{200 * (K_{i1} - K_{i2})}{K_{i1} + K_{i2}}, \qquad (7.8\text{-}1),$$

где K_{i1} и K_{i2} - значения спектральных коэффициентов базовой пробы и анализируемой пробы для сравниваемой полосы, вычисляемые по формуле:

$$K_i = \frac{D_i}{D_0} \qquad (7.8\text{-}2),$$

где D_i – значения оптических плотностей i- го пика (i=1-12);

D_0 – оптическая плотность пика 2.

Анализируемая проба будет считаться идентичной базовой пробе, когда параметр A_i меньше заданного порога для всех характерных полос поглощения. Порог (критерий идентификации) задается оператором.

Для идентификации нефтепродуктов по методике, изложенной в приказе 241 Минприроды, сделайте следующее:

1) Подготовьте пробы согласно методике, изложенной в приказе 241 Минприроды;

2) Зарегистрируйте спектры базовой и сравнительной пробы с параметрами регистрации изложенными в приказе 241 Минприроды (Рис. 7-9);

3) В главном меню программы выберите пункт **Анализ/По методикам/Идентификация нефтепродуктов/По приказу 241 Минприроды**. Откроется диалоговое окно ***Идентификация нефтепродуктов*** (Рис. 7-10);

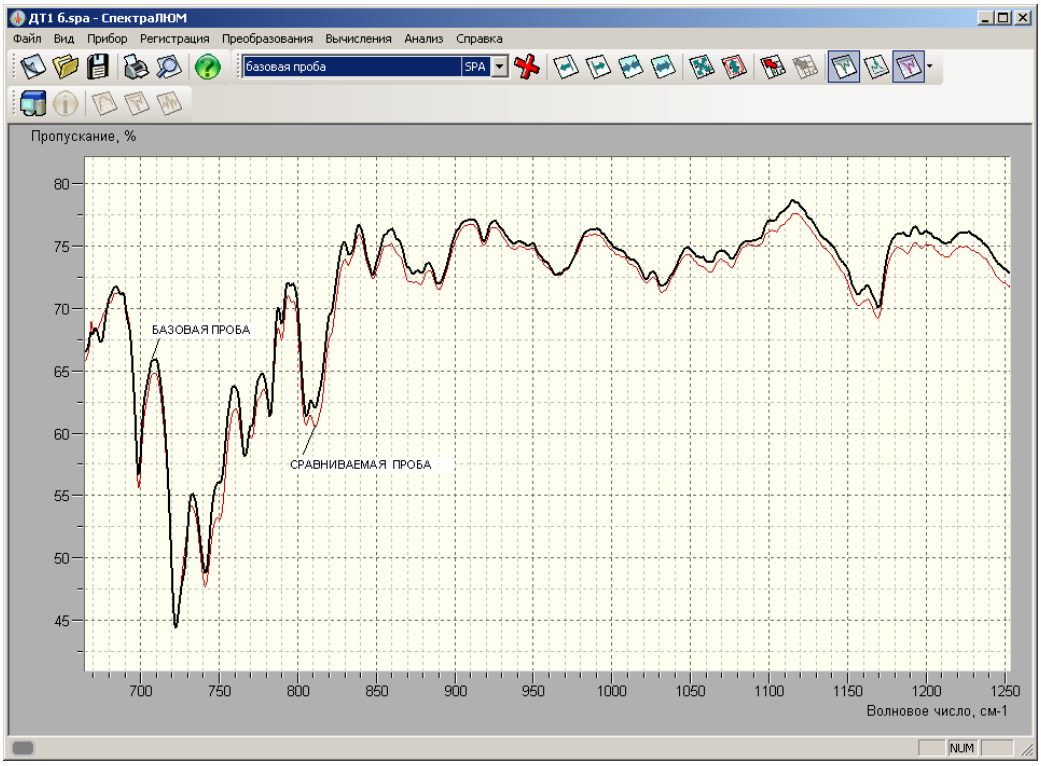
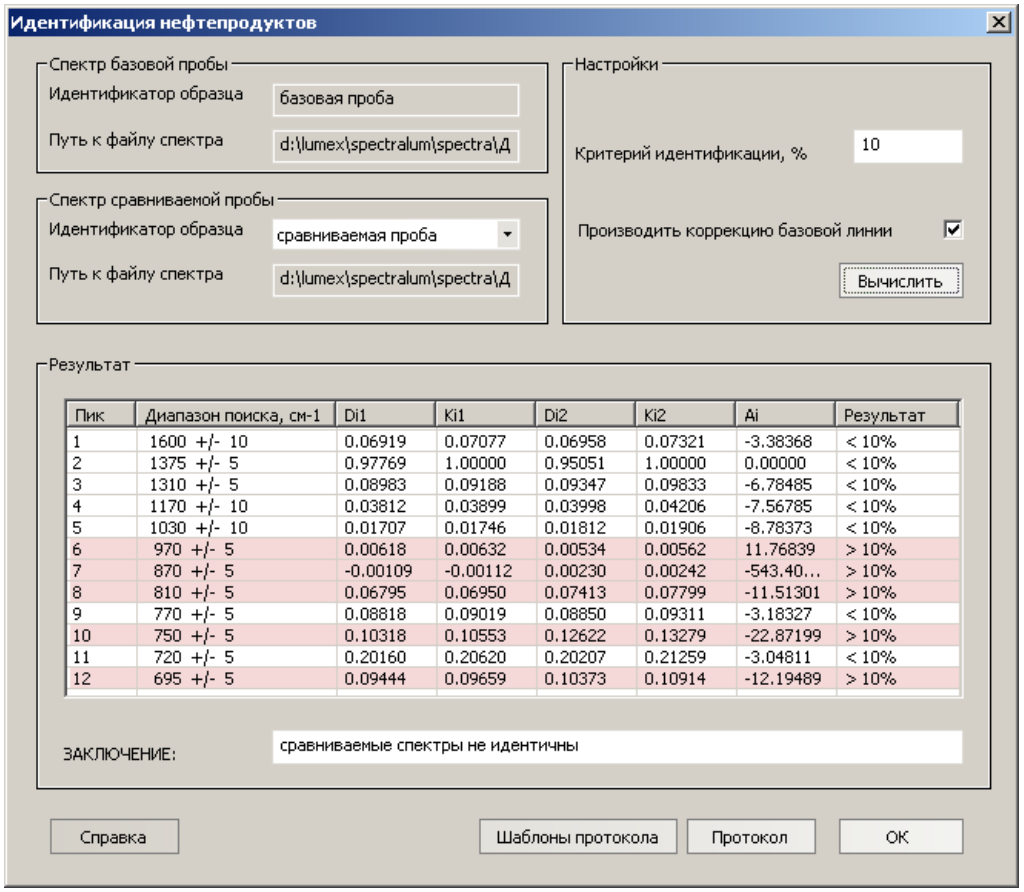


Рис. 7-9 Идентификация. Зарегистрированные спектры нефтепродуктов



Пик	Диапазон поиска, см-1	Di1	Ki1	Di2	Ki2	Ai	Результат
1	1600 +/- 10	0.06919	0.07077	0.06958	0.07321	-3.38368	< 10%
2	1375 +/- 5	0.97769	1.00000	0.95051	1.00000	0.00000	< 10%
3	1310 +/- 5	0.08983	0.09188	0.09347	0.09833	-6.78485	< 10%
4	1170 +/- 10	0.03812	0.03899	0.03998	0.04206	-7.56785	< 10%
5	1030 +/- 10	0.01707	0.01746	0.01812	0.01906	-8.78373	< 10%
6	970 +/- 5	0.00618	0.00632	0.00534	0.00562	11.76839	> 10%
7	870 +/- 5	-0.00109	-0.00112	0.00230	0.00242	-543.40...	> 10%
8	810 +/- 5	0.06795	0.06950	0.07413	0.07799	-11.51301	> 10%
9	770 +/- 5	0.08818	0.09019	0.08850	0.09311	-3.18327	< 10%
10	750 +/- 5	0.10318	0.10553	0.12622	0.13279	-22.87199	> 10%
11	720 +/- 5	0.20160	0.20620	0.20207	0.21259	-3.04811	< 10%
12	695 +/- 5	0.09444	0.09659	0.10373	0.10914	-12.19489	> 10%

Рис. 7-10 Диалоговое окно «Идентификация нефтепродуктов»

4) В открывшемся диалоговом окне из выпадающего списка **Идентификатор образца** в секции **Спектр сравниваемой пробы** выберите сравнительный спектр;

5) Установите **Критерий идентификации**, который выдается по умолчанию равным 10%;

6) Если необходимо, чтобы сравнение происходило по спектрам с корректированной базовой линией, то установите галочку в окне **Производить коррекцию базовой линии**. Коррекция базовой линии проводится по двум точкам 690 и 1640 $см^{-1}$ полиномом первой степени;

7) Нажмите кнопку **Вычислить**;

8) Появится окно с результатами (Рис. 7-10), в котором приводятся: значения оптических плотностей (*Di*) базовой и сравниваемой пробы для конкретной полосы, значения спектральных коэффициентов (*Ki*) базовой и сравниваемой пробы для конкретной полосы, значение величины A_i, результат сравнения отдельных пиков (Результат), заключение об идентичности спектров;

9) Для просмотра протокола идентификации нефтепродуктов нажмите кнопку **Протокол**;

10) Для настройки шаблона протокола нажмите кнопку **Шаблоны протокола**;

11) Для просмотра справки по данному диалоговому окну нажмите кнопку **Справка**;

12) Для выхода из данного диалогового окна нажмите кнопку **ОК**.

7.9 Определение трансизомеров жирных кислот по ГОСТ 31754-2012

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет определять массовую долю трансизомеров олеиновой кислоты в жире, выделенном из спреда или топленой смеси, в пересчете на метилэлаидат согласно ГОСТ 31754-2012.

В соответствии с данной методикой вычисление массовой доли трансизомеров X, % осуществляется по формуле:

$$X = \frac{(D - \frac{D_1 + D_2}{2}) \times V}{m \times d \times k} \times 100 \quad (7.9\text{-}1),$$

где D – оптическая плотность в точке, соотв. максимуму пика в диапазоне 930-1000см$^{-1}$;

D_1,D_2- оптические плотности, в точках, соответствующие волновым числам 930 см$^{-1}$ и 1000см$^{-1}$, соответственно;

m-масса пробы, г;

V-объем пикнометра, дм^3;

d-толщина кюветы, см;

k- коэффициент поглощения метилового эфира транс-олеиновой кислоты, равный 0,43 дм^3/г*см.

Вычисления производятся для спектров, отображаемых в поглощении или в пропускании. Для определения транс-изомеров жирных кислот согласно ГОСТ 31754-2012 выполните следующее:

1) Подготовьте пробу согласно методике, изложенной в ГОСТ 31754-2012;

2) Зарегистрируйте спектр пропускания с параметрами, изложенными в ГОСТ 31754-2012 (Рис. 7-11);

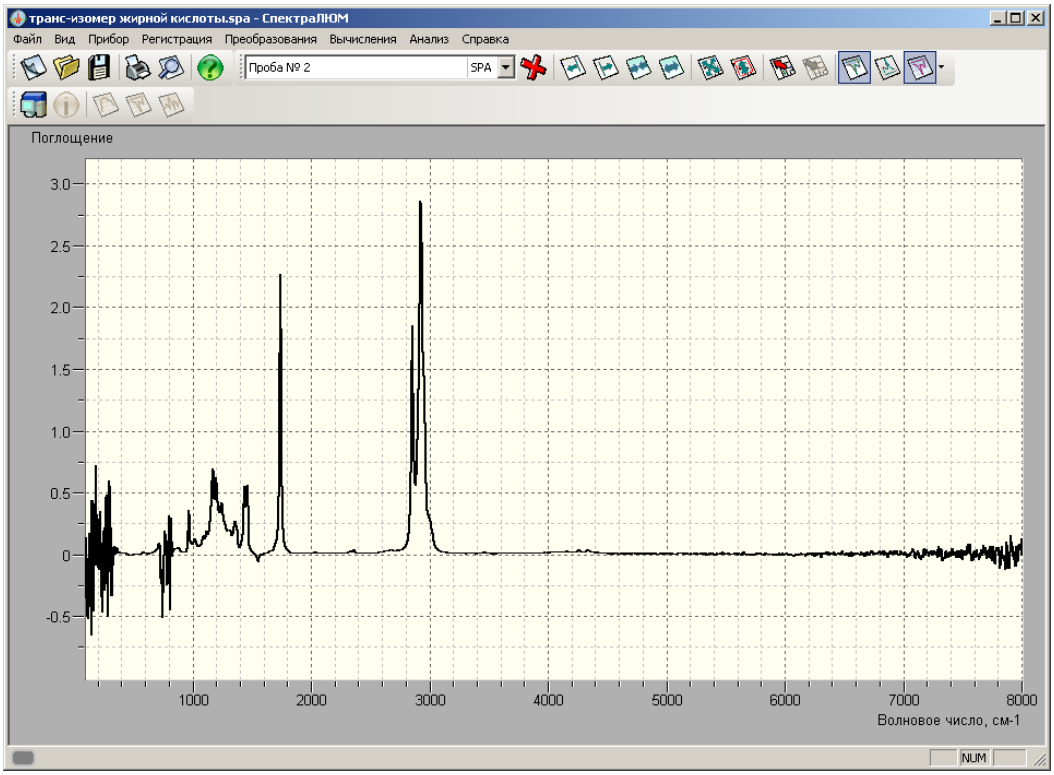


Рис. 7-11 Определение транс-изомеров жирных кислот. Зарегистрированный спектр

3) В главном меню программы выберите пункт **Анализ/По методикам/Определение транс-изомеров жирных кислот/По ГОСТ 31754-2012**. Откроется диалоговое окно ***Определение транс-изомеров жирных кислот*** (Рис. 7-12);

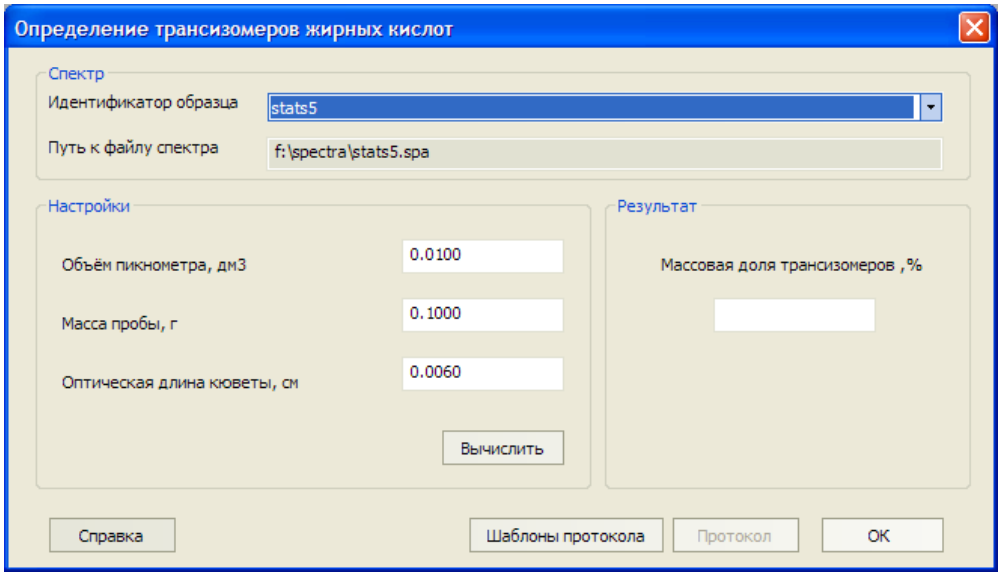


Рис. 7-12 Диалоговое окно «Определение транс-изомеров жирных кислот»

4) В открывшемся окне в секции **Спектр** из выпадающего списка **Идентификатор образца** выберите спектр;

5) В секции **Настройки** введите следующие параметры: объём пикнометра, дм^3; масса пробы, г; оптическая длина кюветы, см;

6) Нажмите кнопку **Вычислить**;

7) В строке **Массовая доля трансизомеров, %** (Рис. 7-12) появится результат вычислений;

8) Для просмотра протокола идентификации нефтепродуктов нажмите кнопку **Протокол**;

9) Для настройки шаблона протокола нажмите кнопку **Шаблоны протокола**;

10) Для просмотра справки по данному диалоговому окну нажмите кнопку **Справка**;

11) Для выхода из данного диалогового окна нажмите кнопку **OK**.

7.10 Определение концентрации СБС в битуме

ВНИМАНИЕ!

Данное окно может быть активировано по специальному запросу поставщику Фурье-спектрометра инфракрасного «ИнфраЛЮМ ФТ».

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет определять концентрацию СБС (стирол-бутадиен-стирол) в битуме. Все вычисления, а том числе разметка пиков, происходят в автоматическом режиме по зарегистрированному спектру.

Вычисление концентрации СБС в битуме, % осуществляется по формуле:

$$C = x \times \frac{(A1 + y \times A2)}{A3} \quad (7.10\text{-}1),$$

где А1 – высота пика поглощения вблизи волнового числа 700 $см^{-1}$ относительно базовой линии;

А2 – высота пика поглощения вблизи волнового числа 970 $см^{-1}$ относительно базовой линии;

А3 – высота пика поглощения вблизи волнового числа 1380 $см^{-1}$ относительно базовой линии;

x, y – коэффициенты пропорциональности. По умолчанию x = 5.25, y = 2.00.

Вычисления производятся для спектров поглощения или Lg(1/R). При открытии данного окна с открытым спектром пропускания, открытый спектр автоматически преобразовывается в спектр поглощения.

Для определения концентрации СБС выполните следующее:

1) Зарегистрируйте спектр пропускания или поглощения в диапазоне не менее 620 - 1420 $см^{-1}$. Если спектр был получен с помощью приставки НПВО, проведите коррекцию НПВО (см.п.6.14).

2) В главном меню программы выберите пункт **Анализ/По методикам/Определение концентрации СБС в битуме**. Откроется диалоговое окно ***Определение концентрации СБС в битуме*** (Рис. 7-13);

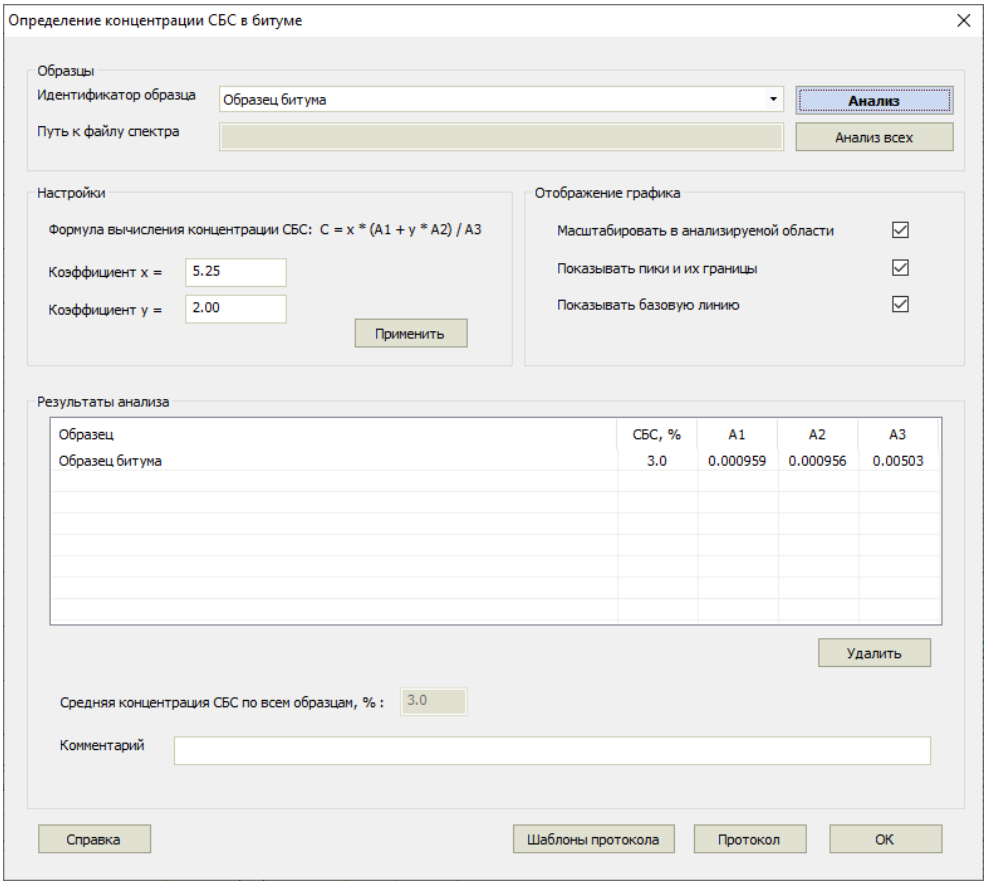


Рис. 7-13 Диалоговое окно «Определение концентрации СБС в битуме»

3) Настройте вид спектра в главном окне программы. Для этого установите соответствующие галочки в секции **Отображение графика**. При установленной галочке **«Масштабировать в анализируемой области»** масштаб окна отображения графика изменится на 620-1420 $см^{-1}$ по оси X, чтобы показать все три анализируемых пика. Если галочка не установлена, то останется выбранный пользователем в главном окне программы масштаб. При установленной галочке **«Показывать пики и их границы»** на выбранном в поле **Идентификатор спектра** графике будут отмечены волновые числа максимума каждого пика и волновые числа границ базовой линии каждого пика. При уставленной галочке **«Показывать базовую линию»** на выбранном в поле **Идентификатор спектра** графике будут проведены базовые линии для каждого пика и отрезки прямых, соединяющих их.

4) В секции **Образцы** в выпадающем списке **Идентификатор образца** выберите интересующий спектр для анализа;

5) Для анализа выбранного спектра нажмите кнопку **Анализ** или просто выберете нужный спектр из выпадающего списка. Для одновременного анализа всех спектров, открытых в главном окне, нажмите кнопку **Анализ всех**. Если на спектре не был найден хотя бы один из трех пиков, то появится соответствующее сообщения и анализ данного спектра не будет произведен;

6) В таблице **Результаты анализа** отобразятся результаты вычисления концентрации СБС в битуме. Таблица содержит следующую информацию: идентификатор проанализированного спектра (столбец **«Образец»**), вычисленная концентрация СБС в процентах с точностью до одного знака после запятой (столбец **«СБС, %»**), значения высот пиков A1, A2 и A3 относительно своих базовых линий, с точностью до трех значащих цифр (столбцы **«A1»**, **«A2»** и **«A3»**);

7) Лишние результаты можно удалить из таблицы **Результаты анализа**, выделив соответствующую строку левой кнопкой мыши и нажав кнопку **Удалить** под таблицей;

8) По полученным значениям концентрации СБС для каждого образца вычисляется средняя концентрация, которая отображается в поле **Средняя концентрация СБС по всем образцам, %:** под таблицей;

9) При необходимости измените коэффициенты x и y, применяемые для вычисления концентрации. Для этого в секции **Настройки** введите новые значения и нажмите кнопку **Применить**. Полученные в таблице **Результаты анализа** данные будут пересчитаны в соответствии с новыми коэффициентами. Последующие вычисления будут также проводиться с учетом новых коэффициентов. Если новые значения коэффициентов были введены, но не применены, то при попытке нового анализа появится сообщение с просьбой подтвердить изменения;

10) Введите текст в поле **Комментарий**. Данный текст будет добавлен в отчет;

11) Для просмотра протокола определения концентрации СБС в битуме нажмите кнопку **Протокол**;

12) Для настройки шаблона протокола нажмите кнопку **Шаблоны протокола**;

13) Для просмотра справки по данному диалоговому окну нажмите кнопку **Справка**;

14) Для выхода из данного диалогового окна нажмите кнопку **OK** или крестик в правом верхнем углу.

7.11 Количественный анализ

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет проводить количественный анализ состава веществ по созданным градуировочным зависимостям.

В главном меню программы по пункту **Анализ/Количественный анализ** доступны следующие функции:

Анализ (см.п. 7.11.1) – количественный анализ спектров по созданным градуировочным зависимостям;

Градуировка (см.п. 7.11.2) – вычисление градуировочных зависимостей по спектрам;

Журнал количественного анализа (см.п. 7.11.3) – просмотр сохраненных результатов количественного анализа.

7.11.1 Анализ по созданным градуировочным зависимостям

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет проводить количественный анализ спектров по созданным градуировочным зависимостям. Каждый спектр может анализироваться по набору градуировок, созданных для разных компонентов.

В качестве доступных для анализа градуировочных зависимостей используются градуировочные зависимости, сохраненные в папке QantAnalysis. (файлы с расширением *.qcdb).

Для проведения количественного анализа сделайте следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Анализ/Количественный анализ/Анализ**. Откроется диалоговое окно ***Количественный анализ*** (Рис. 7-14);

2) В секции **Градуировочные зависимости** в таблице **Доступные градуировочные зависимости** выделите необходимую градуировочную зависимость и нажмите кнопку **Добавить**;

3) В таблицу **Градуировочные зависимости для анализа** добавится выбранная градуировочная зависимость;

4) Для добавления нескольких градуировочных зависимостей повторите п.2 и п.3;

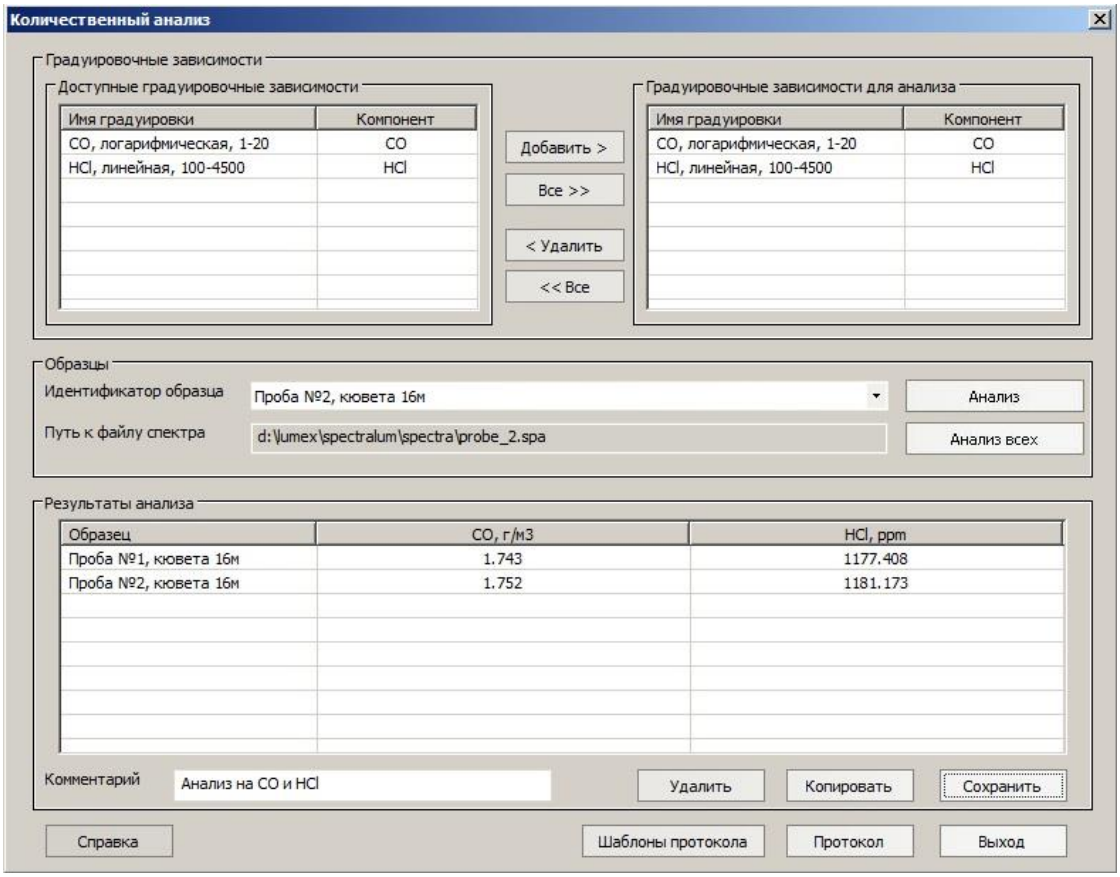


Рис. 7-14 Диалоговое окно «Количественный анализ»

5) Для добавления всех доступных градуировочных зависимостей в таблицу **Градуировочные зависимости для анализа** нажмите кнопку **Все>>**;

6) Для удаления градуировочных зависимостей из таблицы **Градуировочные зависимости для анализа** выделите необходимую строку и нажмите кнопку **Удалить**;

7) Для удаления из таблицы всех градуировочных зависимостей нажмите кнопку **<<Все**;

8) В секции **Образцы** в выпадающем списке **Идентификатор образца** выберите интересующий спектр для анализа;

9) Для анализа выбранного спектра нажмите кнопку **Анализ.** Для одновременного анализа всех спектров, открытых в главном окне, нажмите кнопку **Анализ всех;**

10) В таблице **Результаты анализа** отобразятся результаты вычисления содержания интересующих компонентов по выбранным градуировочным зависимостям. Если результаты вычисления выходят за пределы диапазона анализа (диапазон анализа задается на этапе создания градуировки (см. 7.11.2 п.13)), в таблице отображается, что результат меньше нижней границы диапазона анализа или больше верхней границы диапазона анализа в зависимости от полученного результата (Рис. 7-15);

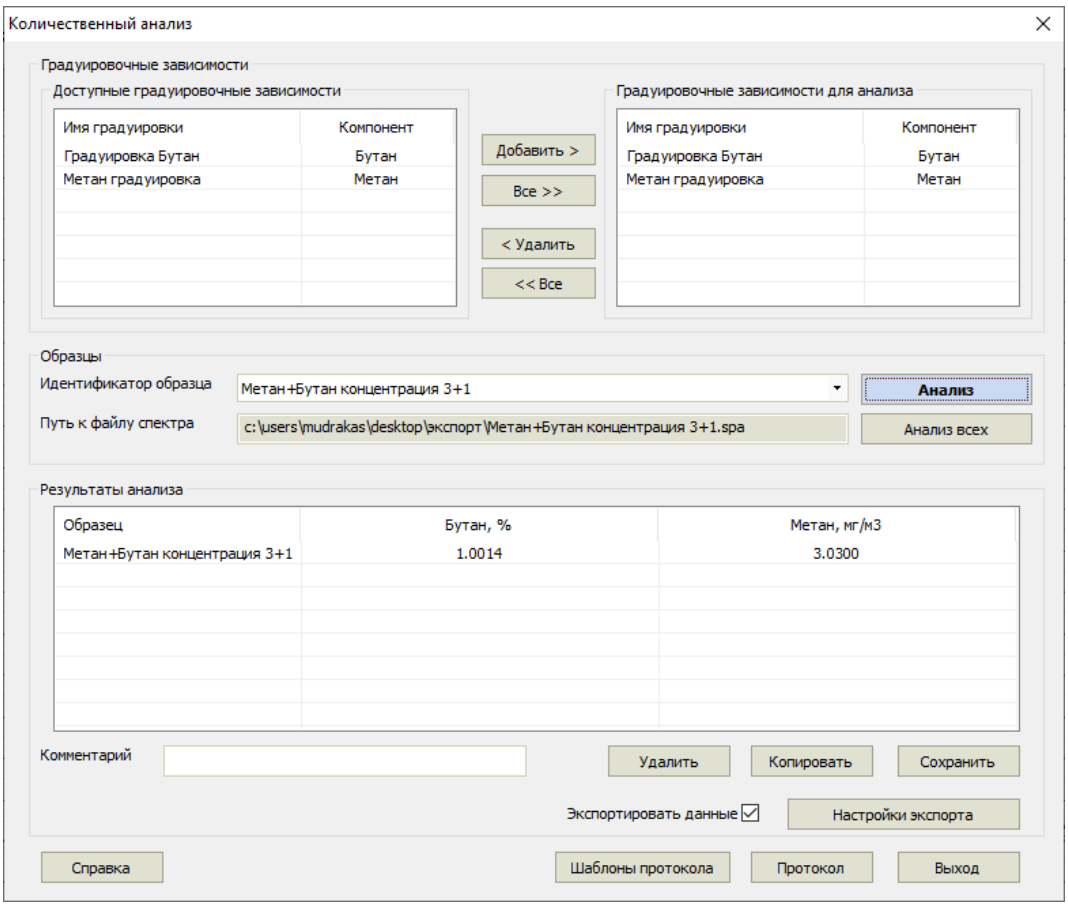


Рис. 7-15 Диалоговое окно «Количественный анализ» - недостоверные результаты анализа

11) Для анализа следующего спектра повторите п.8 и п.9;

12) В текстовое поле **Комментарий** введите комментарий, который содержит информацию о наборе исследуемых образцов, результаты анализа которых представлены в данной таблице;

13) Для экспорта данных поставьте галочку в поле **Экспорт данных**. Подробнее о работе экспорта данных в разделе 7.11.4.

14) Для сохранения результатов анализа в **Журнал количественного анализа** нажмите кнопку **Сохранить**. Результатом сохранения является весь массив данных, представленный в таблице результатов анализа;

15) Для копирования данных из таблицы результатов анализа в другие редакторы нажмите кнопку **Копировать**;

16) Для удаления результатов анализа, выделите необходимые строки и нажмите кнопку **Удалить**;

17) Для просмотра протокола количественного анализа нажмите кнопку **Протокол**;

18) Для настройки шаблона протокола нажмите кнопку **Шаблоны протокола**;

19) Для просмотра справки по данному диалоговому окну нажмите кнопку **Справка**;

20) Для выхода из данного диалогового окна нажмите кнопку **Выход**.

7.11.2 Вычисление градуировочных зависимостей

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет вычислять градуировочные зависимости по набору спектров с известными референтными значениями показателя. Для расчета используется площадь или высота выбранного на спектре пика.

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет производить аппроксимацию градуировочных зависимостей следующими видами уравнений: линейное через 0, линейное, квадратичное, кубическое и логарифмическое.

Для линейного уравнения вычисляются коэффициенты a и b. Уравнение имеет вид: $y = a + bx$.

Для линейного через 0 уравнения вычисляется коэффициент b. Уравнение имеет вид: $y = bx$.

Для квадратичного уравнения вычисляются коэффициенты a, b и c. Уравнение имеет вид: $y = a + bx + cx^2$.

Для кубического уравнения вычисляются коэффициенты a, b, c и d. Уравнение имеет вид: $y = a + bx + cx^2 + dx^3$.

Для логарифмического уравнения вычисляются коэффициенты a и b. Уравнение имеет вид: $y = a + b\ln x$.

В полученной градуировочной зависимости переменная y представляет собой значение высоты или площади пика на спектре, переменная x – содержание компонента.

Расчет выражений осуществляется методом наименьших квадратов, при увеличении количества спектров для расчета градуировки точность вычисления увеличивается.

Точность полученной зависимости может быть оценена коэффициентом детерминации (R^2). Чем ближе это значение к 1, тем выше точность аппроксимации выбранным видом уравнения.

Коэффициент детерминации вычисляется по формуле:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \hat{x}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}, \qquad (7.11\text{-}1)$$

где $\hat{x}_i$- предсказанное по градуировочной зависимости значение определяемого компонента для i-го образца градуировочного набора;

x_i - референтное значение определяемого компонента для i-го образца градуировочного набора;

$\bar{x}$ - среднее значение определяемого компонента по всем образцам градуировочного набора;

n – количество образцов градуировочного набора.

Для расчета градуировочной зависимости сделайте следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Анализ/Количественный анализ/Градуировка**. Откроется диалоговое окно ***Количественный анализ (градуировка)*** (Рис. 7-16);

2) В открывшемся диалоговом окне введите в поле **Имя градуировки** необходимое имя градуировочной зависимости;

3) В секции **Компонент** в поле **Имя** введите необходимое имя компонента;

4) В секции **Компонент** в поле **Единицы измерения** введите единицы измерения компонента;

5) В секции **Компонент** установите необходимое при отображении результатов количество знаков после запятой, выбрав нужный формат из выпадающего списка;

6) В секции **Настройки** в поле **Спектральный диапазон** введите спектральный диапазон, в котором будут определяться площадь (или высота) пика выбранных спектров для построения градуировочной зависимости;

7) Если необходимо, чтобы вычисление происходило по спектрам с корректированной базовой линией, то установите галочку в окне **Коррекция базовой линии** в секции **Настройки**;

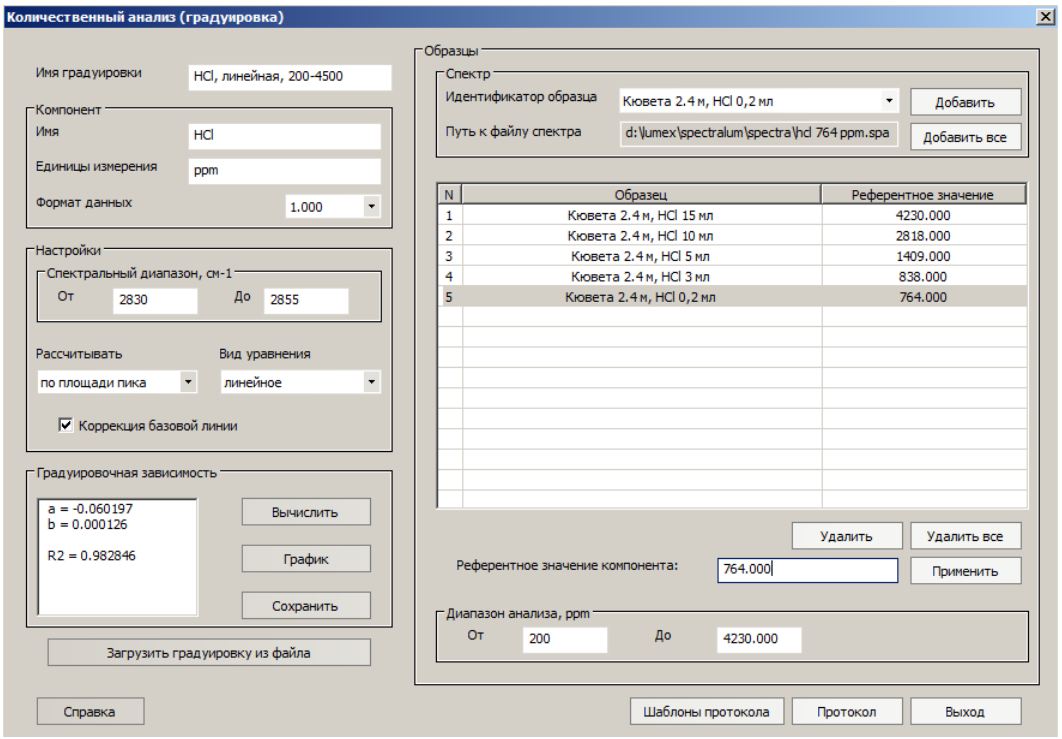


Рис. 7-16 Диалоговое окно «Количественный анализ (градуировка)»

8) В секции **Настройки** выберите из выпадающего списка, как будет производиться расчет градуировочной зависимости – по площади или по высоте пика;

9) В секции **Настройки** выберите из выпадающего списка необходимый вид уравнения;

10) В секции **Образцы** выберите из выпадающего списка спектры для вычисления градуировочной зависимости (В списке отражаются спектры, открытые в главном окне программы). Кнопка **Добавить** добавляет в таблицу выделенный спектр. Кнопка **Добавить все** добавляет в таблицу все спектры из списка;

11) Для удаления образца выделите его название и нажмите кнопку **Удалить**. Кнопка **Удалить все** удаляет все образцы из таблицы;

12) Для того чтобы ввести или изменить референтные значения, выделите в таблице образец, под таблицей появится поле **Референтное значение компонента**. Введите в окне референтное значение и нажмите кнопку **Применить**. Значение отобразится в таблице (Рис. 7-16);

13) В секции **Диапазон анализа** введите в поля нижнюю и верхнюю границы диапазона измерений, в котором будет производиться анализ необходимого компонента. Если значения не введены, то в качестве граничных устанавливаются минимальное и максимальное из референтных значений;

14) Нажмите кнопку **Вычислить**;

15) Откроется окно ***График градуировочной зависимости*** с графиком зависимости площади (высоты) выбранного пика от содержания определяемого компонента (Рис. 7-17). После нажатия кнопки **ОК** окно ***График градуировочной зависимости*** закроется;

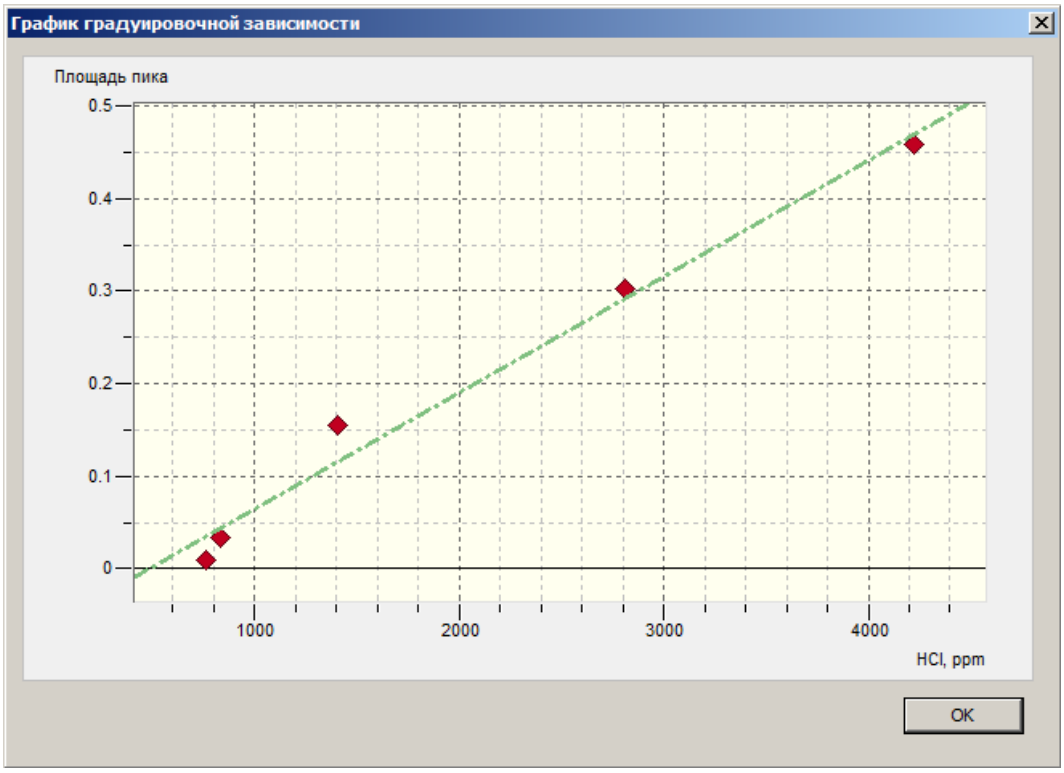


Рис. 7-17 Диалоговое окно «График градуировочной зависимости»

16) В окне ***Количественный анализ (градуировка)*** в секции **Градуировочная зависимость** появятся результаты вычисления коэффициентов градуировочного уравнения и коэффициента детерминации;

17) Для просмотра графика градуировочной зависимости нажмите кнопку **График** в секции **Градуировочная зависимость**;

18) Для сохранения градуировочной зависимости нажмите кнопку **Сохранить**;

19) Чтобы открыть для редактирования ранее сохраненную градуировочную зависимость нажмите кнопку **Загрузить градуировку из файла**. При загрузке градуировки из файла для редактирования доступны все поля, кроме спектрального диапазона. Редактирование градуировки может осуществляться при любых спектрах, открытых в главном окне программы, без необходимости открытия спектров, по которым строилась вызванная для редактированиия-градуировка. При добавлении нового спектра к таблице спектров, по которым будет вычисляться градуировочная зависимость, этот спектр должен быть открыт в главном окне программы;

20) Для просмотра протокола вычисления градуировочной зависимости нажмите кнопку **Протокол**;

21) Для настройки шаблона протокола нажмите кнопку **Шаблоны протокола**;

22) Для просмотра справки по данному диалоговому окну нажмите кнопку **Справка**;

23) Для выхода из данного диалогового окна нажмите кнопку **Выход**.

7.11.3 Просмотр сохраненных результатов количественного анализа

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет просматривать результаты количественного анализа, сохраненные в Журнале количественного анализа.

Для просмотра Журнала количественного анализа сделайте следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт **Анализ/Количественный анализ/Журнал количественного анализа**. Откроется диалоговое окно ***Журнал количественного анализа*** (Рис. 7-18);

2) В секции **Сохраненные результаты** выделите необходимую строку и нажмите кнопку **Просмотр**;

3) Секция **Подробности** будет заполнена результатами количественного анализа;

4) Для удаления записей из таблицы **Сохраненные результаты** выделите необходимую строку и нажмите кнопку **Удалить**;

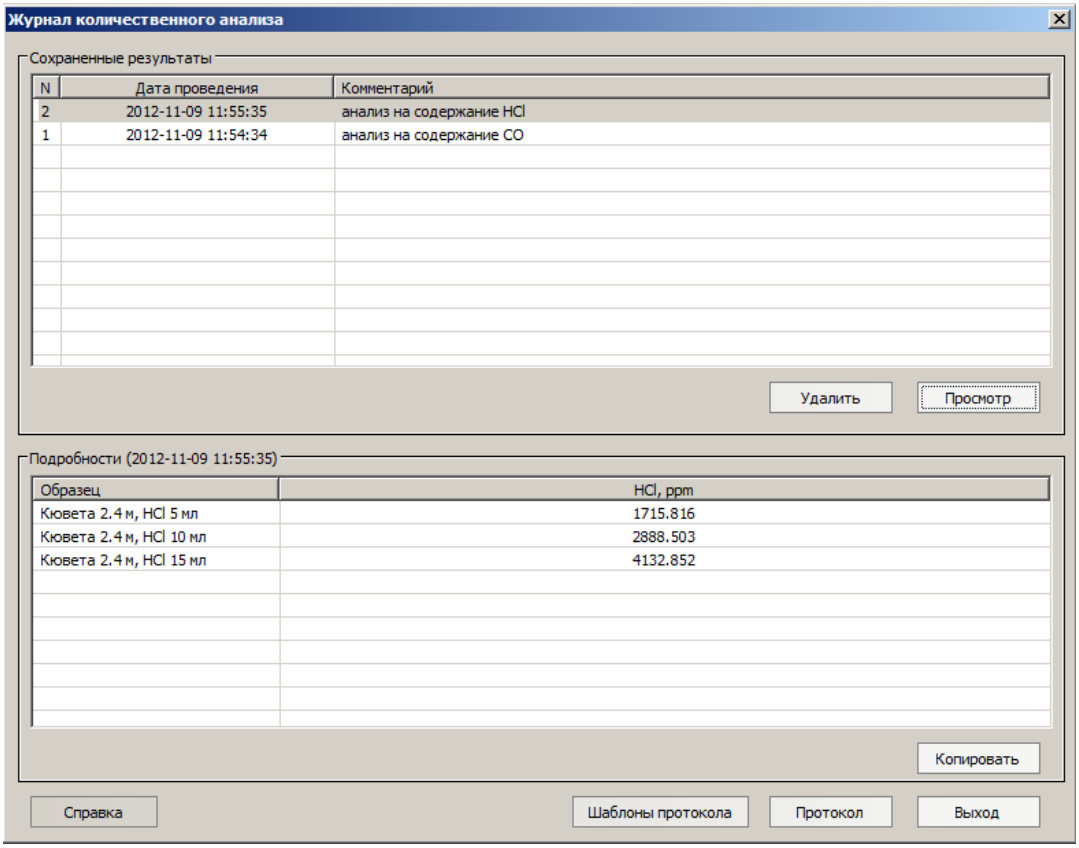


Рис. 7-18 Диалоговое окно «Журнал количественного анализа»

5) Для копирования результатов количественного анализа из таблицы **Подробности** в другие редакторы нажмите кнопку **Копировать**;

6) Для просмотра протокола количественного анализа нажмите кнопку **Протокол**;

7) Для настройки шаблона протокола нажмите кнопку **Шаблоны протокола**;

8) Для просмотра справки по данному диалоговому окну нажмите кнопку **Справка**;

9) Для выхода из данного диалогового окна нажмите кнопку **Выход**.

7.11.4 Экспорт результатов количественного анализа

Для включения экспорта данных необходимо поставить галочку напротив положения **Экспортировать данные** в окне «Количественный анализ»

(Рис. 7-15). Затем нажать на кнопку **Настройки экспорта** и выбрать папку для экспорта результатов количественного анализа в появившемся диалоговом окне выбора папки (Рис. 7-19). Выбранная папка будет установлена как папка для сохранения данных по умолчанию при следующем анализе.

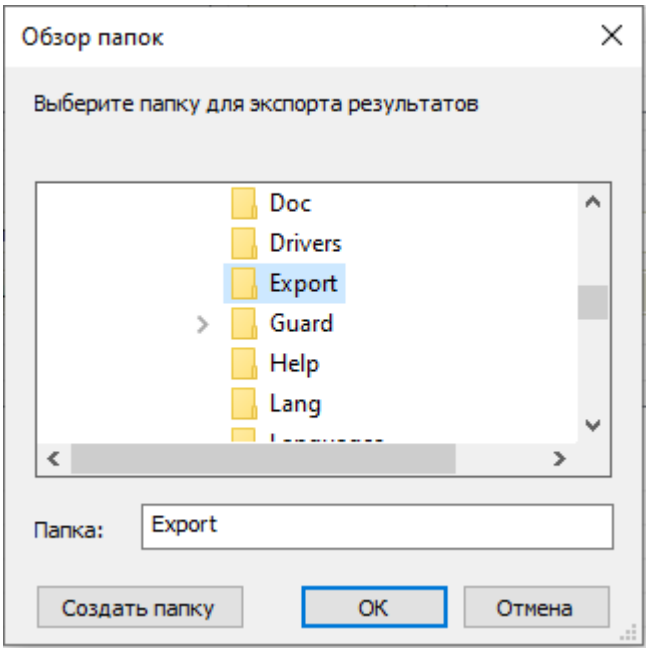


Рис. 7-19 Диалоговое окно выбора папки

В режиме установленной галочки результаты анализа всех образцов экспортируются автоматически после нажатия кнопки **Сохранить**. В выбранную папку сохраняются файлы заданного формата с результатами для каждого из проанализированных образцов с названием, соответствующим дате и времени проведения анализа, а также указанным в скобках номером образца.

Информацию из созданного файла можно использовать в специальных автоматических системах учета результатов измерений на некоторых зерноперерабатывающих предприятиях.

8 Базовые операции со спектрами

Программа «СпектраЛЮМ» осуществляет базовые операции со спектрами и интерферограммами, которые реализованы командами в пункте меню **Файл**:

- Открыть - открытие спектра или интерферограммы из выбранного оператором файла. Дублирует кнопку  на панели инструментов «Стандартная»;
- Сохранить как - сохранение спектра или интерферограммы в файла. Дублирует кнопку  на панели инструментов «Стандартная»;
- Закрыть все спектры - закрытие всех спектров в окне просмотра;
- Закрыть активный спектр - закрытие активного спектра в окне просмотра. Дублирует кнопку  на панели инструментов «Просмотр»;
- Печать протокола - печать протокола из главного окна программы (см.п.10.3). Дублирует кнопку  на панели инструментов «Стандартная»;
- Протокол – открытие окна ***Просмотра протокола*** (Рис. 10-1);
- Шаблоны протокола – открытие окна ***Настройка шаблона протокола*** (Рис. 10-4);
- Выход – выход из программы.

8.1 Сохранение спектров и интерферограмм

По окончании регистрации спектра или проведения математической операции для сохранения полученного спектра необходимо выполнить следующее:

1) В главном меню программы выберите пункт меню **Файл/Сохранить как** или нажмите кнопку  на панели инстру-

ментов. Откроется стандартное для Windows диалоговое окно ***Сохранить как…*** (Рис. 8-1).

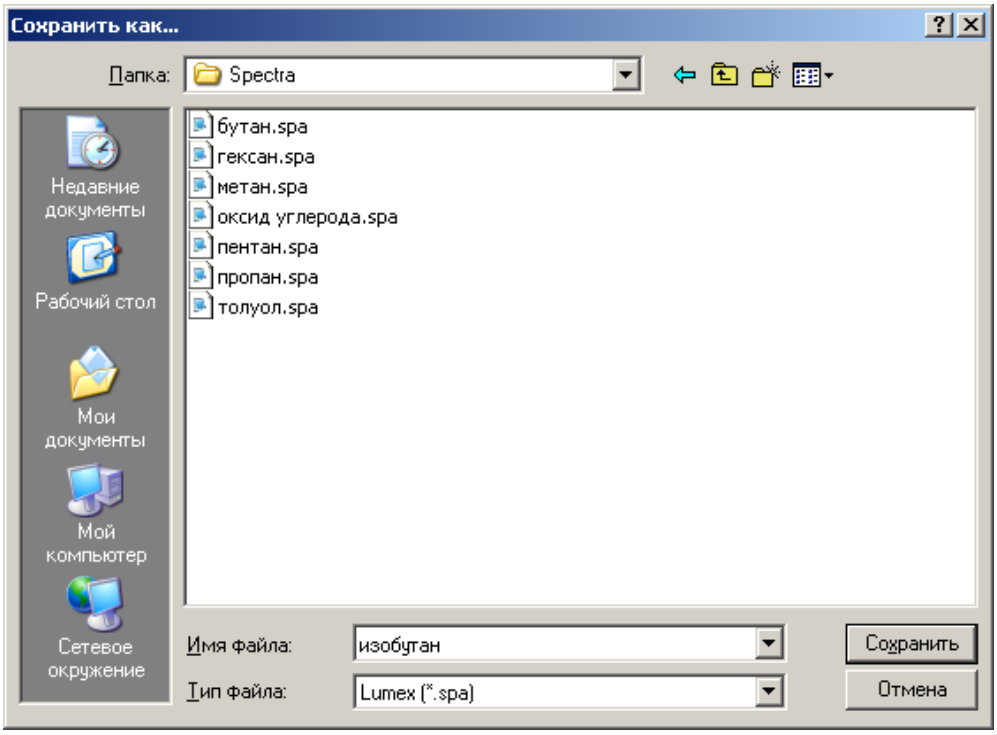


Рис. 8-1 Диалоговое окно «Сохранение файла»

2) В текстовом окне **Папка** выберите нужную папку. По умолчанию файл сохраняется в папку, из которой в последний раз был открыт спектр или в которую проводилось последнее сохранение.

3) В текстовом окне **Имя файла** введите имя файла спектра.

4) В текстовом окне **Тип файла** выберите необходимое расширение. Программа позволяет сохранять:

- Спектры - в форматах: *.spa; *.spc (Galactic); *.jcp (JCAMP); *.emf (метафайл);
- Фоновые спектры - в формате: *.rfa; *.emf (метафайл);
- Интерферограммы: *.ifa.

5) Нажмите кнопку **Сохранить**. Спектр будет сохранен в выбранную папку с соответствующим расширением.

6) Для выхода из данного диалогового окна без сохранения нажмите кнопку **Отмена**.

8.2 Открытие спектров и интерферограмм

Открытие спектров и интерферограмм осуществляется с помощью команды **Файл/Открыть** в главном меню программы или кнопки  на панели инструментов.

Программа позволяет открывать для просмотра и обработки файлы следующих форматов:

*.spa – спектры, зарегистрированные ПО «СпектраЛюм»

*.rfa – фоновые спектры, зарегистрированные ПО «СпектраЛюм»

*.ifa – интерферограммы, зарегистрированные ПО «СпектраЛюм»

*.spc – спектры формата Galactic

*.jcp – спектры формата JCAMP

*.jdx – спектры формата JCAMP

*.dx – спектры формата JCAMP

8.3 Закрытие спектров и интерферограмм

8.3.1 Закрытие активного спектра

В главном меню программы выберите пункт меню **Файл/Закрыть активный спектр** или нажмите  на панели инструментов.

8.3.2 Закрытие всех спектров

В главном меню программы выберите пункт меню **Файл/Закрыть все спектры** или нажмите кнопку  на панели инструментов.

9 Проверка спектрометра

Программа СпектраЛЮМ позволяет проводить проверку работоспособности приборов ИнфраЛЮМ ФТ-02, ИнфраЛЮМ ФТ-08 и ИнфраЛЮМ ФТ-08М. Проверка заключается в выполнении серии автоматических тестов по заданным алгоритмам.

Итогом проверки является получение результата соответствия (либо не соответствия) значений проверяемых параметров прибора заданным критериям.

Результат проверки считается положительным, если все тесты, входящие в состав проверки, дали положительный результат.

Результат теста считается положительным, если вычисляемый параметр (по данному тесту) не выходит за пределы установленных норм.

Все итоговые результаты проверок, а также результаты по каждому тесту, входящему в проверку, автоматически сохраняются, с возможностью их последующего просмотра.

Программа СпектраЛЮМ позволяет создать разные виды проверок, которые могут содержать различное количество тестов. Для приборов ИнфраЛЮМ ФТ-02, ИнфраЛЮМ ФТ-08 и ИнфраЛЮМ ФТ-08М вместе с программой СпектраЛЮМ поставляются два вида ранее созданных проверок:

- ***Поверка***, включающая все тесты в соответствии с *Методикой поверки анализатора*.
- ***OQ***, предназначенная для проведения операционной квалификации (OQ тестирования) и включающая тесты по основным рабочим характеристикам прибора. Данная проверка поставляется по заказу.

Процедура выполнения проверки анализатора подробно описана в разделе 9.1.

9.1 Выполнение проверки

Выполнение проверки возможно только при подключенном к программе приборе. Для проведения проверки выполните следующие действия:

1. В главном меню программы выберите пункт **Прибор/Проверка**;
2. Откроется диалоговое окно ***Проверка*** (Рис. 9-1).

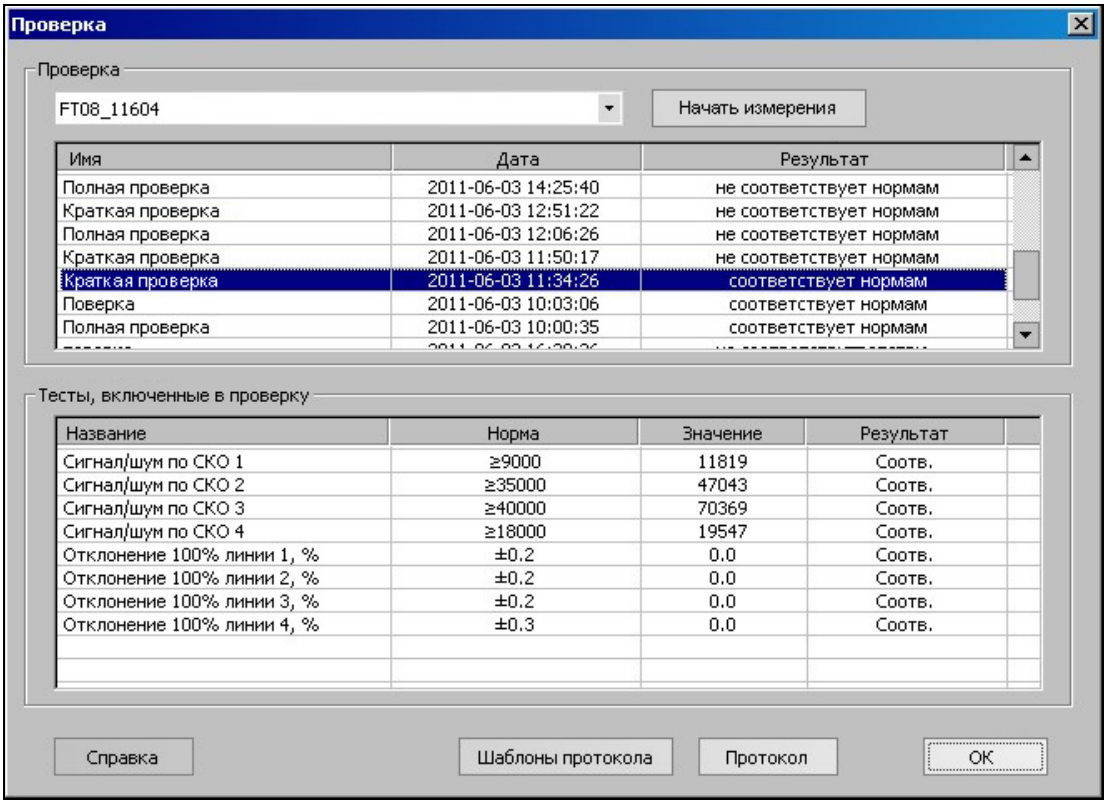


Рис. 9-1 Диалоговое окно «Проверка»

Выпадающий список в секции **Проверка** содержит перечень всех созданных проверок для подключенного в данный момент прибора (подробнее см. раздел 9.2).

3. В выпадающем списке выделите левой клавишей мыши нужную проверку и нажмите кнопку **Начать измерения**;

Во время проведения проверки анализатора в бегущей строке отображается ориентировочное значение отношения времени, пройденного с начала процедуры, ко времени, оставшемуся до конца проверки.

4. Для того, чтобы остановить проверку, следует нажать кнопку **Остановить проверку**;

По окончании проверки анализатора результаты тестов будут показаны в таблице в секции **Тесты, включенные в проверку**: название теста, норма, значение, полученное в результате прохождения теста, и результат теста (соответствует нормам/не соответствует нормам).

В таблице в секции **Проверка** отображаются результаты предыдущих проверок: имя проверки, дата проведения проверки и результат.

Выбор тестов, участвующих в проверке, а также настройка параметров и критериев оценки результата каждого теста, производится в окне ***Настройка тестов*** (см. раздел 9.2):

- Кнопка **Справка** открывает раздел справки, посвященный описанию работы данного окна;
- Кнопка **Протокол** открывает окно создания протокола измерения (см. раздел 10.2;
- Кнопка **Шаблон протокола** открывает окно настройки шаблона протокола (см. раздел 10.4);
- Кнопка **ОК** возвращает в основное окно программы.

9.2 Настройка проверок

Выполнение настройки проверок возможно только при подключенном к программе приборе.

Проверка анализатора представляет собой набор тестов, по которым проверяется работоспособность прибора. Все тесты, которые могут быть проведены автоматически в программе СпектраЛЮМ, объединены по группам. Принадлежность к конкретной группе определяется параметрами регистрации спектров.

Для каждой группы можно установить требуемые параметры регистрации.

Для каждого теста в группе можно задать параметры, использующиеся при вычислениях данного теста, и критерии его оценки. Программа Спек-

траЛЮМ позволяет устанавливать по умолчанию значения параметров регистрации для каждой группы, а также параметры и критерии по умолчанию для каждого теста. Значения по умолчанию – значения параметров, рекомендованные разработчиками компании ООО «ЛММ».

Для настройки тестов необходимо выполнить следующие действия:

1. Войти в пункт меню **Прибор/Настройка тестов**. Откроется окно ***Настройка тестов***. В секции **Настройка тестов для проверки** перечислены все группы тестов, доступные для подключенного к программе прибора, а также тесты, входящие в каждую группу;

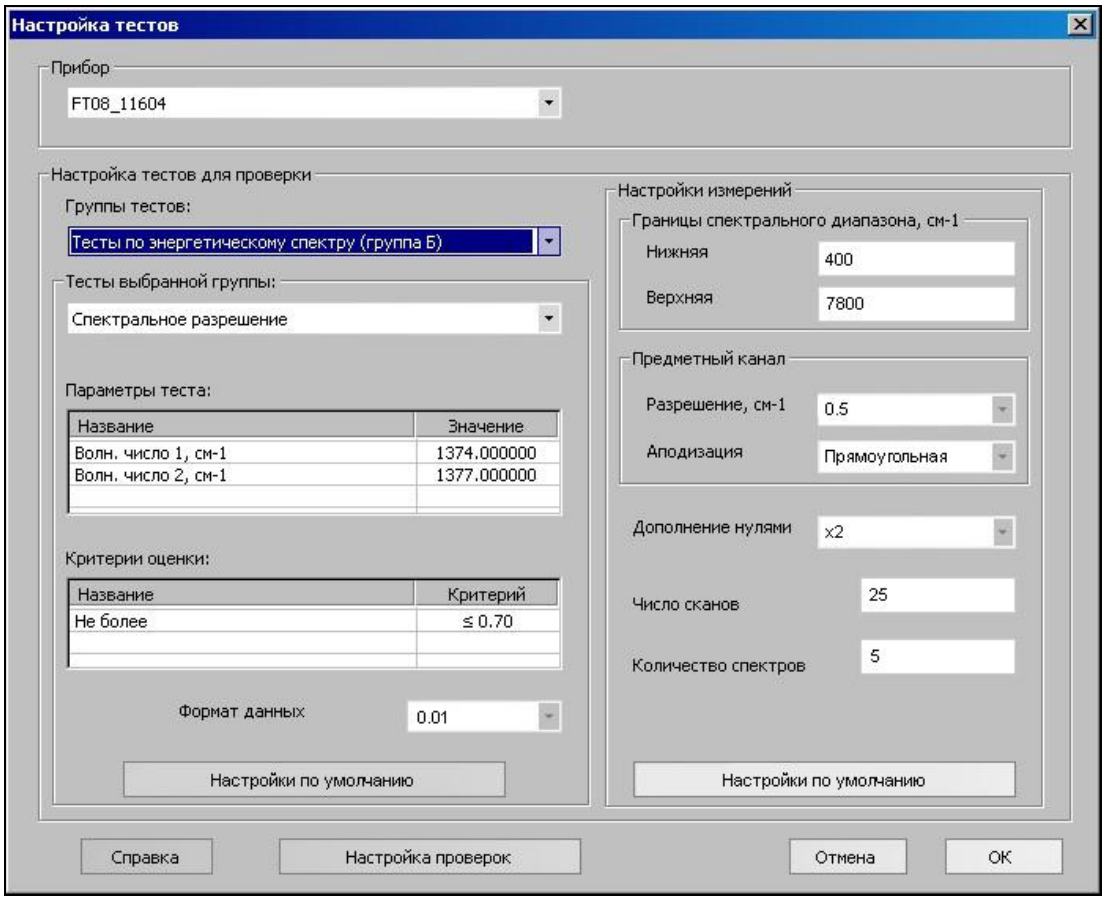


Рис. 9-2 Диалоговое окно «Настройка тестов»

2. В выпадающем списке **Группы тестов**: выбрать требуемую группу тестов;

3. В секции **Тесты выбранной группы** выбрать необходимый тест;

4. В полях **Параметры теста; Критерии оценки; Настройка измерений** внести необходимые изменения. Для введения значений дважды щелкните на нужный критерий и нажмите кнопку **Применить**;

5. Для установки значения формата данных выберите нужный формат из выпадающего списка.

Для создания новой проверки необходимо сделать следующее:

1. В окне ***Настройка тестов*** нажать кнопку **Настройка проверок**;
2. В открывшемся окне нажать кнопку **Создать**;

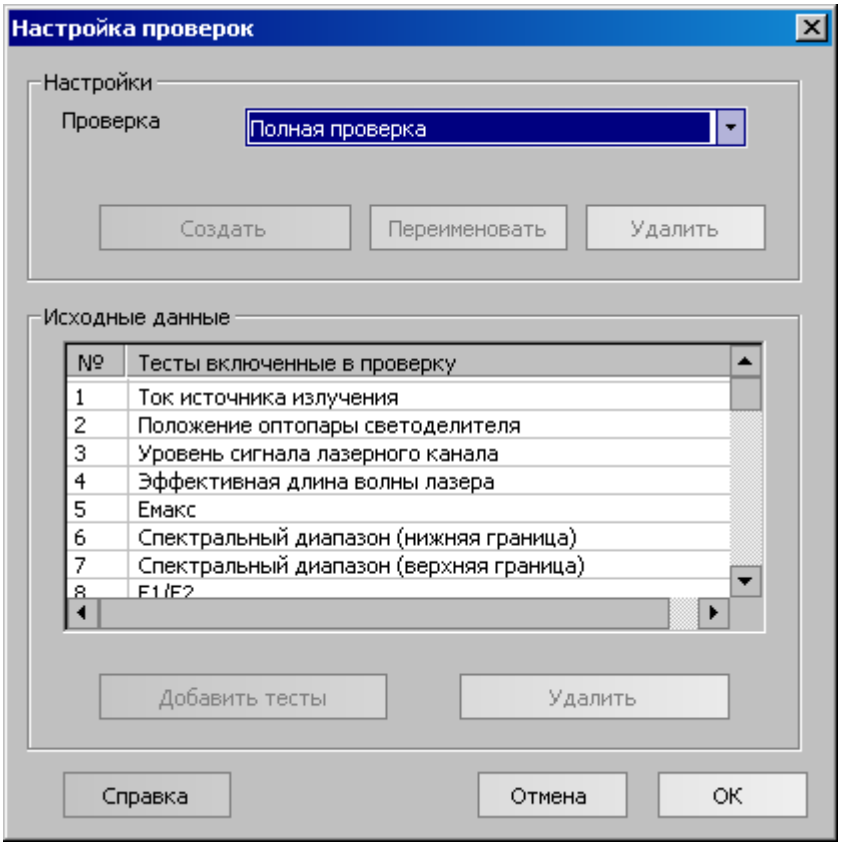


Рис. 9-3 Диалоговое окно «Настройка проверок»

3. В открывшемся окне ***Проверка*** ввести имя проверки, далее нажать **ОК**;

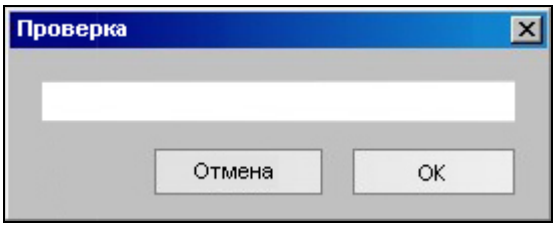


Рис. 9-4 Диалоговое окно «Проверка». Ввод названия новой проверки

4. Для добавления тестов в проверку в окне ***Настройка проверок*** в поле **Исходные данные** нажать кнопку **Добавить тесты**. Из открывшегося списка выбрать необходимые тесты и нажать **ОК**;

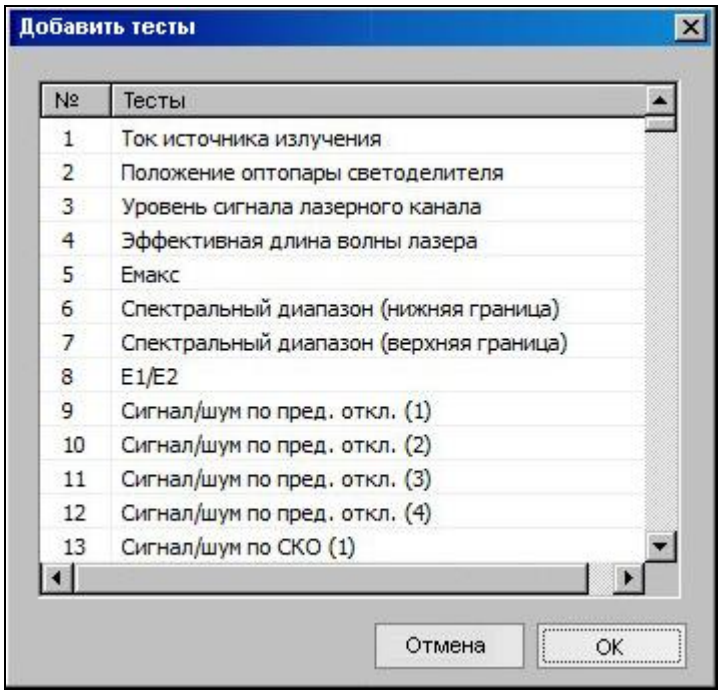


Рис. 9-5 Диалоговое окно «Добавить тесты»

5. Для удаления тестов из проверки в поле **Исходные данные** выбрать тест для удаления и нажать кнопку **Удалить**;

6. Для переименования проверки нажать кнопку **Переименовать**. В открывшемся окне изменить имя проверки и нажать **ОК**.

9.3 Просмотр результатов проверок

Результаты текущей проверки появляются в диалоговом окне ***Проверка*** (см. Рис. 9-6) автоматически по окончании процедуры проверки.

В окне ***Проверка*** содержатся следующие таблицы:

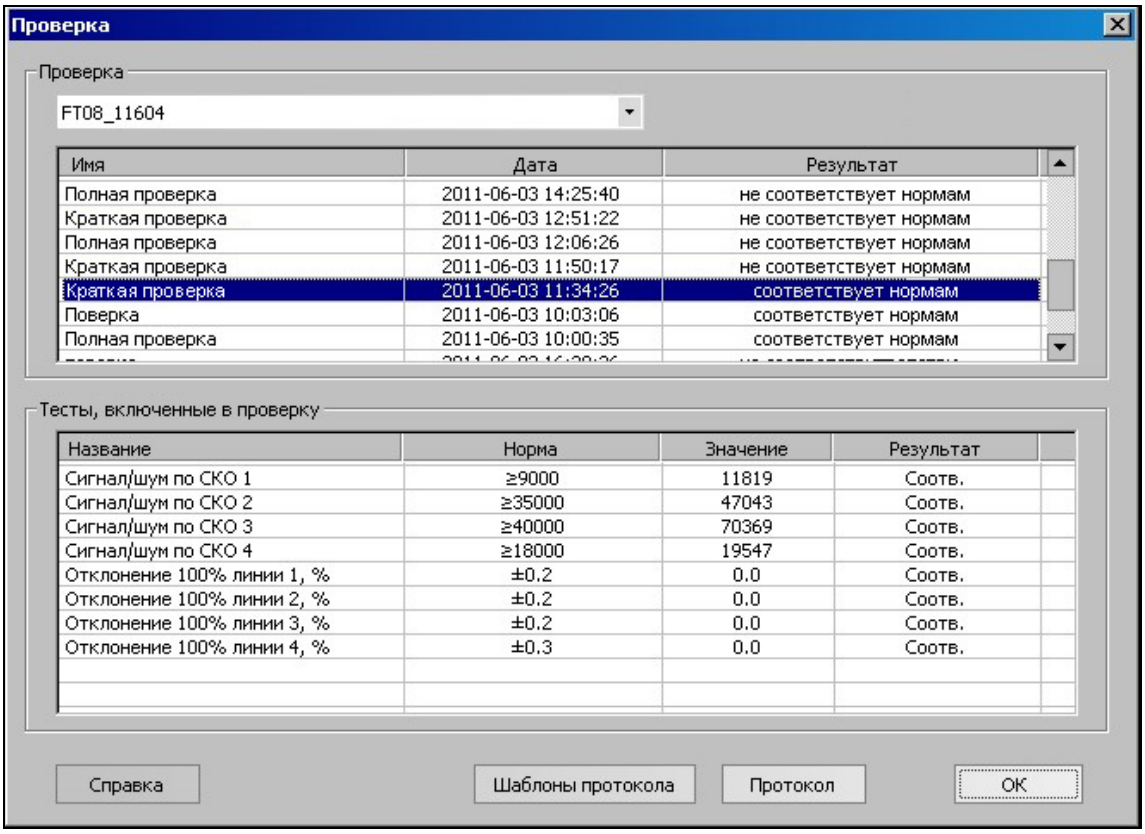


Рис. 9-6 Диалоговое окно «Проверка». Результаты текущей проверки.

- Таблица верхней секции **Проверка**. Представляет собой список, каждая строка которого соответствует одной проведённой проверке. В столбцах отображаются: имя проверки, дата и время проведения проверки, общий результат проверки (соответствует нормам/не соответствует нормам);

- Таблица нижней секции **Тесты, включенные в проверку**. Представляет собой список, каждая строка которого соответствует одному тесту, входящему в состав проверки, выбранной в верхней таблице. В столбцах располагаются: название теста, предельные значения контролируемых параметров (норма), измеренное значение и результат. По умолчанию в нижней таблице будут представлены тесты последней проведенной проверки;

- Промежуточные результаты тестов, вычисляемые по многократным измерениям, можно просмотреть, дважды щелкнув левой клавишей мыши по названию соответствующего теста. Откроется таблица результатов, каждая строка которой соответствует одному измерению. Количество измерений задается в окне ***Настройка тестов*** (см. раздел 9.2);

По окончании проверки столбцы таблицы в секции **Тесты, включенные в проверку** диалогового окна ***Проверка*** заполняются подробной информацией. В случае соответствия значений проверяемых параметров заданным критериям, в столбце **Результат** выводится сообщение «Соотв.» Если же значения проверяемых параметров не соответствуют заданным критериям, по окончании проверки в столбце **Результат** выводится сообщение «Не соотв.»

В таблице секции **Проверка** добавляется новая строка с информацией об итоговом результате последней проверки. Если все тесты, входящие в состав проверки, дали положительный результат, в столбце **Результат** выводится сообщение «соответствует нормам» Если хотя бы один тест, входящий в состав проверки, дал отрицательный результат, в столбце **Результат** выводится сообщение «не соответствует нормам».

Если к программе СпектраЛЮМ не подключен анализатор, есть возможность просматривать результаты пройденных проверок. Для этого необходимо сделать следующее:

1. Войти в меню **Прибор/Проверка**. Откроется окно ***Проверка***;
2. В данном окне в строке с номером прибора необходимо выбрать номер интересующего прибора;

В поле **Проверка** в верхней части окна будут перечислены проверки, которые прошел данный прибор;

В поле **Тесты, включенные в проверку**, будут представлены подробные результаты каждой из проверок.

- Кнопка **Начать измерения** запускает проверку, выбранную в выпадающем списке слева от кнопки.
- Кнопка **Справка** открывает раздел справки, посвященный описанию работы данного окна.
- Кнопка **Протокол** открывает окно создания протокола измерения.
- Кнопка **Шаблон протокола** открывает окно настройки шаблона протокола.
- Кнопка **ОК** возвращает в основное окно.

10 Протокол

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет выполнять следующие операции:

1) Создание и печать протокола из главного окна программы, см.п.10.1; см.п.10.3;

2) Создание и печать протокола из диалоговых окон: ***Площадь Пика***, ***Интенсивность***, ***Поиск экстремумов***, ***Атрибуты***, ***Сравнение спектров по Евклидовому расстоянию***, ***Статистика***, ***Нефтепродукты в воде по …***, ***Нефтепродукты в твердых образцах по…***, ***Определение трансизомеров жирных кислот***, ***Определение концентрации СБС в битуме, Идентификация нефтепродуктов, Проверка, Количественный анализ, Количественный анализ (Градуировка), Журнал количественного анализа*** см.п.10.2;

3) Настройка шаблонов протоколов, см.п.10.4.

10.1 Протокол из главного окна программы

Для создания протокола из главного окна программы необходимо в главном меню программы выбрать пункт меню **Файл/Протокол**. На экране появится окно ***ReportViewer*** (Рис. 10-1), на котором будет изображён созданный протокол по ранее выбранному шаблону, установленному по умолчанию (см.п.10.4).

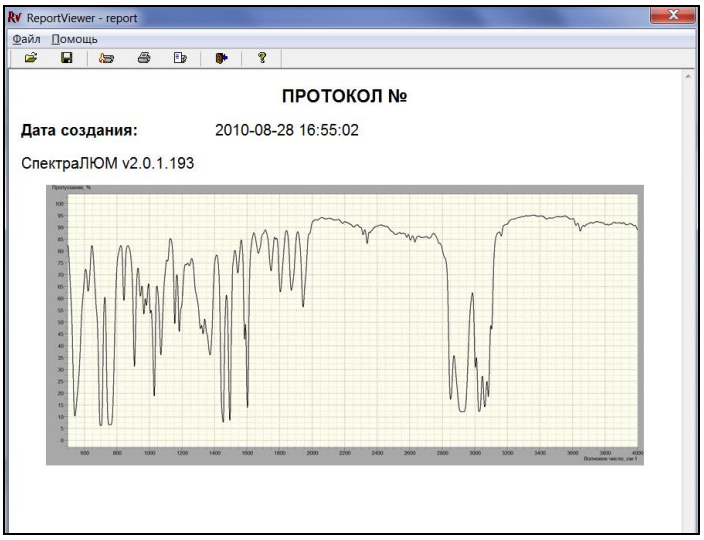


Рис. 10-1 Диалоговое окно «ReportViewer» для просмотра протокола

Для сохранения созданного протокола выберите в данном окне (Рис. 10-1) пункт меню **Файл/Сохранить как** или нажмите кнопку .

Для печати созданного шаблона выберите в данном окне (Рис. 10-1) пункт меню **Файл/Печать** или нажмите кнопку .

Чтобы посмотреть, как данная информация будет размещаться на странице при печати, выберите в данном окне (Рис. 10-1) пункт меню **Предварительный просмотр** или нажмите кнопку . При этом откроется стандартное окно просмотра Windows (Рис. 10-2).

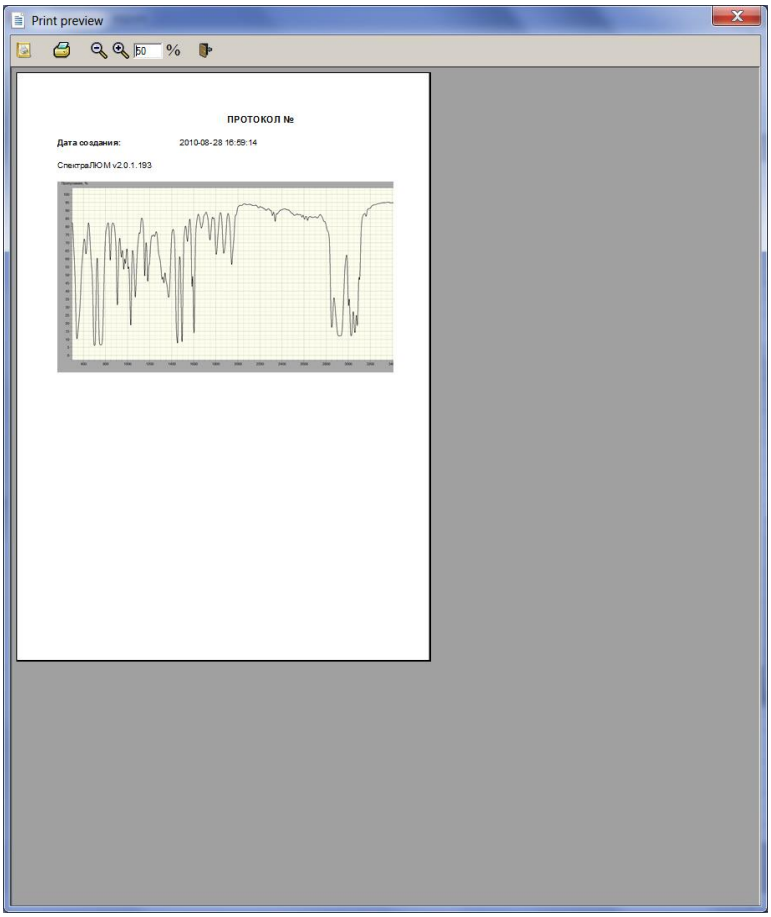


Рис. 10-2 Диалоговое окно «Print Preview»

10.2 Протокол из диалоговых окон

Для создания протокола результатов из диалоговых окон: ***Площадь Пика***, ***Интенсивность***, ***Поиск экстремумов***, ***Атрибуты***, ***Сравнение спектров по Евклидовому расстоянию***, ***Статистика***, ***Нефтепродукты в воде по …***, ***Нефтепродукты в твердых образцах по…***, ***Определение трансизомеров жирных кислот***, ***Определение концентрации СБС в битуме, Идентификация нефтепродуктов, Проверка, Количественный анализ, Количественный анализ (Градуировка), Журнал количественного анализа***, необходимо выполнить следующее:

1) В главном меню программы выберите необходимый пункт меню (Например, **Вычисления/Атрибуты**);

2) В открывшемся диалоговом окне выполните необходимые действия или операции;

3) Нажмите кнопку **Протокол**, при этом откроется окно ***ReportViewer*** (Рис. 10-3), на котором будет изображён созданный протокол по ранее выбранному шаблону по умолчанию (см.п.10.4);



№	Волновое число, см-1	Пропускание, %
130	497.695	82.49120
131	501.553	79.93060
132	505.411	75.54170
133	509.269	69.99680
134	513.127	64.65130
135	516.986	59.20070
136	520.844	52.83770
137	524.702	44.24070
138	528.560	31.97940
139	532.418	20.47560
140	536.276	12.88790
141	540.134	10.39460
142	543.992	11.41210

Рис. 10-3 Диалоговое окно «Report Viewer». Протокол из диалогового окна «Атрибуты спектра»

4) Для сохранения созданного протокола выберите в данном окне (Рис. 10-3) пункт меню **Файл/Сохранить как** или нажмите кнопку ;

5) Для печати созданного шаблона выберите в данном окне (Рис. 10-3)пункт меню **Файл/Печать** или нажмите кнопку ;

6) Чтобы посмотреть, как данная информация будет размещаться на странице при печати, выберите в данном окне (ReportViewer) пункт меню **Предварительный просмотр** или нажмите кнопку . При этом откроется стандартное окно просмотра Windows (Рис. 10-2).

10.3 Печать протокола из главного окна программы

Для распечатки протокола из главного окна программы предусмотрена команда в главном меню **Файл/Печать протокола…** и кнопка  на стандартной панели инструментов. Печать осуществляется по ранее созданному и выбранному шаблону по умолчанию в диалоговом окне ***Настройка шаблона протокола*** (см.п.10.4).

1) В главном меню программы выберите пункт **Файл/Печать протокола…**;
2) В открывшемся окне введите параметры для печати. Выберите нужный принтер;
3) При необходимости изменения настроек печати нажмите кнопку **Настройка**;
4) При необходимости добавить принтер нажмите кнопку **Найти принтер…;**
5) Укажите диапазон страниц и количество копий;
6) Нажмите **OK** для запуска процесса печати;
7) Для просмотра протокола перед печатью в главном меню программы выберите пункт **Файл/Протокол**;
8) Для настройки шаблонов протоколов в главном меню программы выберите пункт **Файл/Шаблоны протокола**;

10.4 Настройка шаблона протокола

Программа «СпектраЛЮМ» позволяет выбрать требуемый шаблон, по которому будет печататься протокол.

Для выбора шаблона необходимо войти в окно ***Настройка шаблона протокола*** (Рис. 10-4).

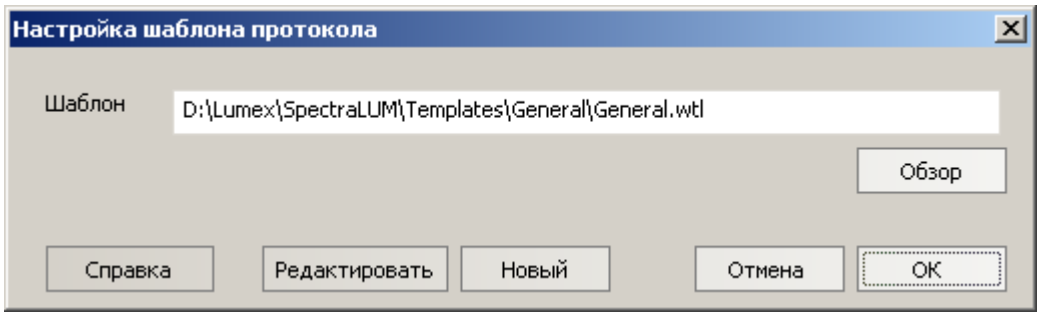


Рис. 10-4 Диалоговое окно «Настройка шаблона протокола»

Вход в данное окно (Рис. 10-4) возможен:

- из пункта меню **Файл/Настройка шаблонов печати**;
- из окна ***Площадь пика*** (Рис. 6-7) по кнопке **Шаблоны протокола**;
- из окна ***Интенсивность*** (Рис. 6-5) по кнопке **Шаблоны протокола**;
- из окна ***Поиск экстремумов*** (Рис. 6-3) по кнопке **Шаблоны протокола**;
- из окна ***Атрибуты*** (Рис. 6-2) по кнопке **Шаблоны протокола**;
- из окна ***Сравнение спектров по Евклидовому расстоянию*** (Рис. 7-1) по кнопке **Шаблоны протокола**;
- из окна ***Статистика*** (Рис. 6-1) по кнопке **Шаблоны протокола**;
- из окна ***Нефтепродукты в воде по …*** (Рис. 7-5) по кнопке **Шаблоны протокола**;
- из окна ***Нефтепродукты в твердых образцах по…*** (Рис. 7-8) по кнопке **Шаблоны протокола**;
- из окна ***Определение трансизомеров жирных кислот*** (Рис. 7-12) по кнопке **Шаблоны протокола**;
- из окна ***Определение концентрации СБС в битуме*** (Рис. 7-13) по кнопке **Шаблоны протокола**;
- из окна ***Идентификация нефтепродуктов*** (Рис. 7-10) по кнопке **Шаблоны протокола**;
- из окна ***Количественный анализ*** (Рис. 7-14) по кнопке **Шаблоны протокола**;

- из окна ***Количественный анализ (Градуировка)*** (Рис. 7-16) по кнопке **Шаблоны протокола**;

- из окна ***Журнал количественного анализа*** (Рис. 7-18) по кнопке **Шаблоны протокола**.

В окне ***Настройка шаблона протокола*** в поле **Шаблон** указан выбранный по умолчанию шаблон, по которому и будет производиться создание протокола.

По кнопке **Обзор** можно выбрать любой другой шаблон для данного типа анализа, который станет шаблоном по умолчанию.

Программа «СпектраЛЮМ» создана так, что в зависимости от того из какого окна открыто диалоговое окно ***Настройка шаблона протокола***, по кнопке **Обзор** будет предлагаться будут предлагаться шаблоны только для решения конкретной задачи. Например, если зайти в окно ***Настройка шаблона протокола*** из окна ***Статистика***, то по кнопке **Обзор** можно будет выбрать только шаблон (шаблоны) по выводу результатов статистических вычислений (Рис. 10-5).

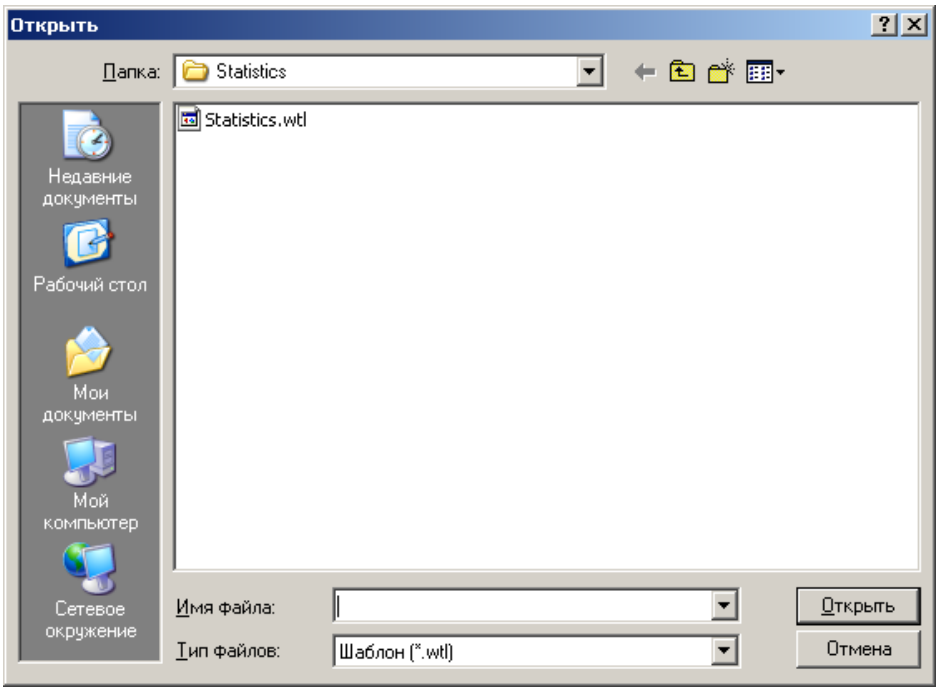


Рис. 10-5 Диалоговое окно «Открытие файла шаблона протокола»

В диалоговом окне ***Настройка шаблона протокола*** доступны следующие кнопки:

- Кнопка **Обзор** открывает диалог выбора шаблона по умолчанию;

- Кнопка **Редактировать** открывает ***Редактор шаблонов*** (см.п.10.5) для редактирования выбранного шаблона;
- **Новый** открывает ***Редактор шаблонов*** (см.п.10.5) для создания нового шаблона;
- Кнопка **Справка** открывает данную справку;
- Кнопка **OK** закрывает окно настроек с сохранением выбранного шаблона по умолчанию;
- Кнопка **Отмена** закрывает окно настроек без сохранения изменений.

10.5 Редактор шаблонов

В окне редактора шаблонов слева представлена палитра виджетов, с помощью которых можно создать различные шаблоны протоколов (Рис. 10-6). Перечень виджетов будет отличаться в зависимости от типа создаваемого шаблона протокола.

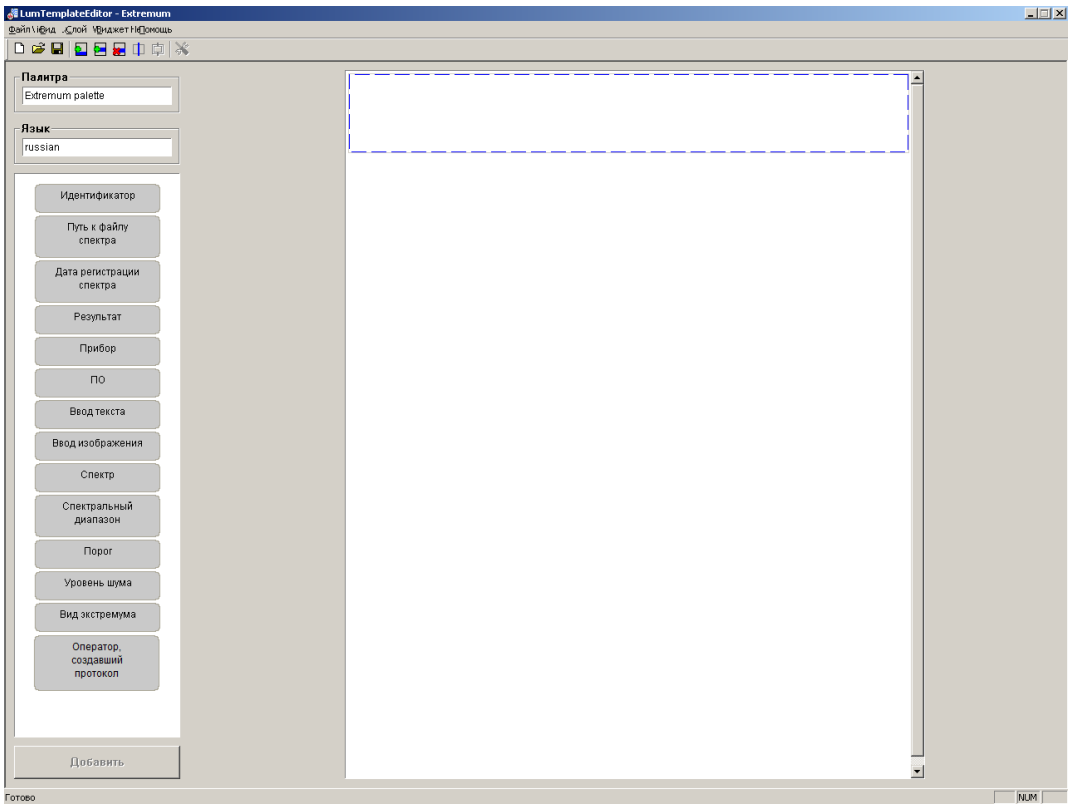


Рис. 10-6 Создание шаблона протокола «Поиск экстремумов»

Для того чтобы протокол содержал необходимую информацию, сначала нужно создать слой. Для этого в меню **Слой** выберите команду **Добавить** или на панели инструментов нажмите кнопку . При этом в правой части окна появится рамка синего цвета, при наличии нескольких слоёв, рамкой синего цвета выделяется активный слой (Рис. 10-7).

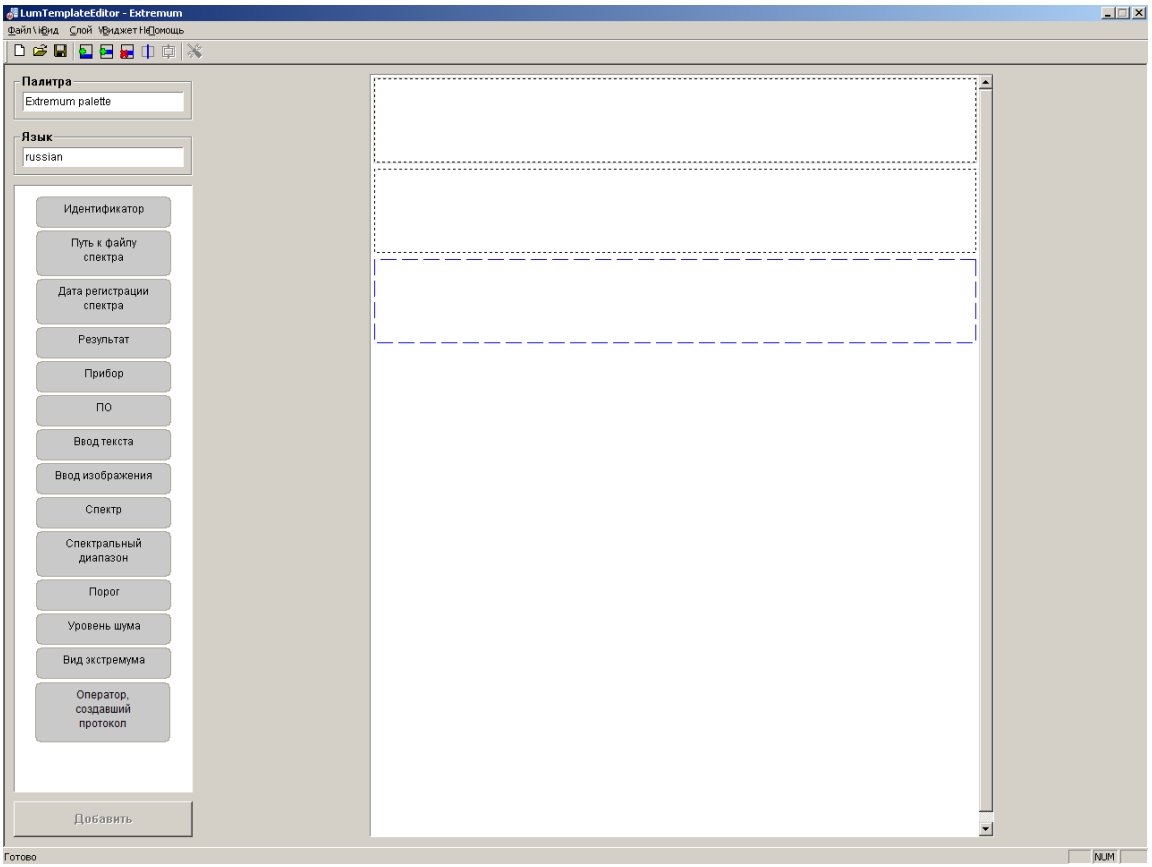


Рис. 10-7 Создание шаблона протокола. Добавление слоя. Активный слой

Для того, чтобы вставить слой между уже существующими слоями нужно левой клавишей мыши или стилусом выделить слой, перед которым будет вставлен новый слой, а затем в меню **Слой** выбрать команду **Вставить** или на панели инструментов нажать кнопку .

Слой можно разделить на части (максимум четыре), используя команду **Разделить** из меню **Слой** или кнопку  на панели инструментов (Рис. 10-8). Команда **Объединить** из меню **Слой** или кнопка  на панели инструментов позволяет объединить слой, который был разделён на части.

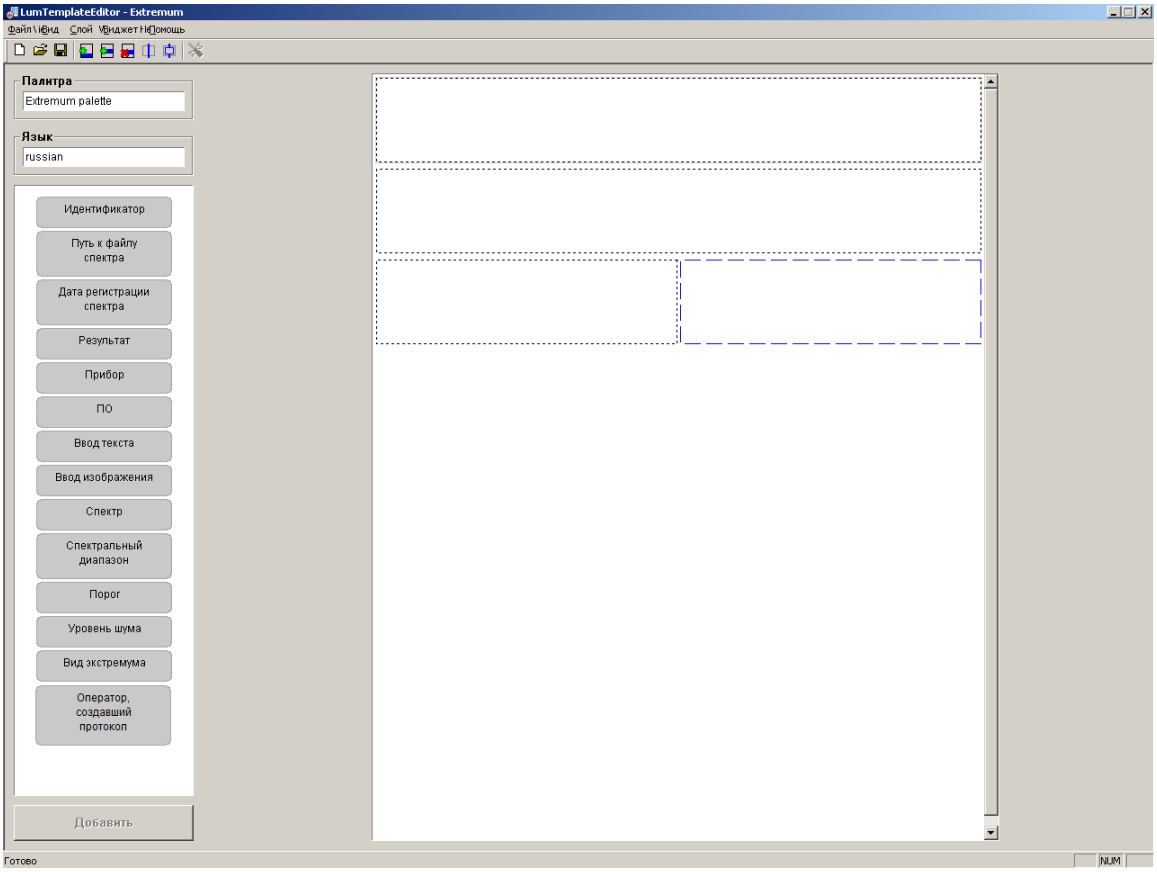


Рис. 10-8 Создание шаблона протокола. Разделение слоя на части

Для удаления слоя нужно выбрать команду **Удалить** в меню **Слой** или на панели инструментов нажать кнопку .

Чтобы вставить в слой виджет необходимо навести указатель мыши на нужный виджет и перетащить его в выделенный синей рамкой слой или выбрать нужный виджет левой клавишей мыши или стилусом и нажать кнопку **Добавить**, расположенную под палитрой виджетов (Рис. 10-9).

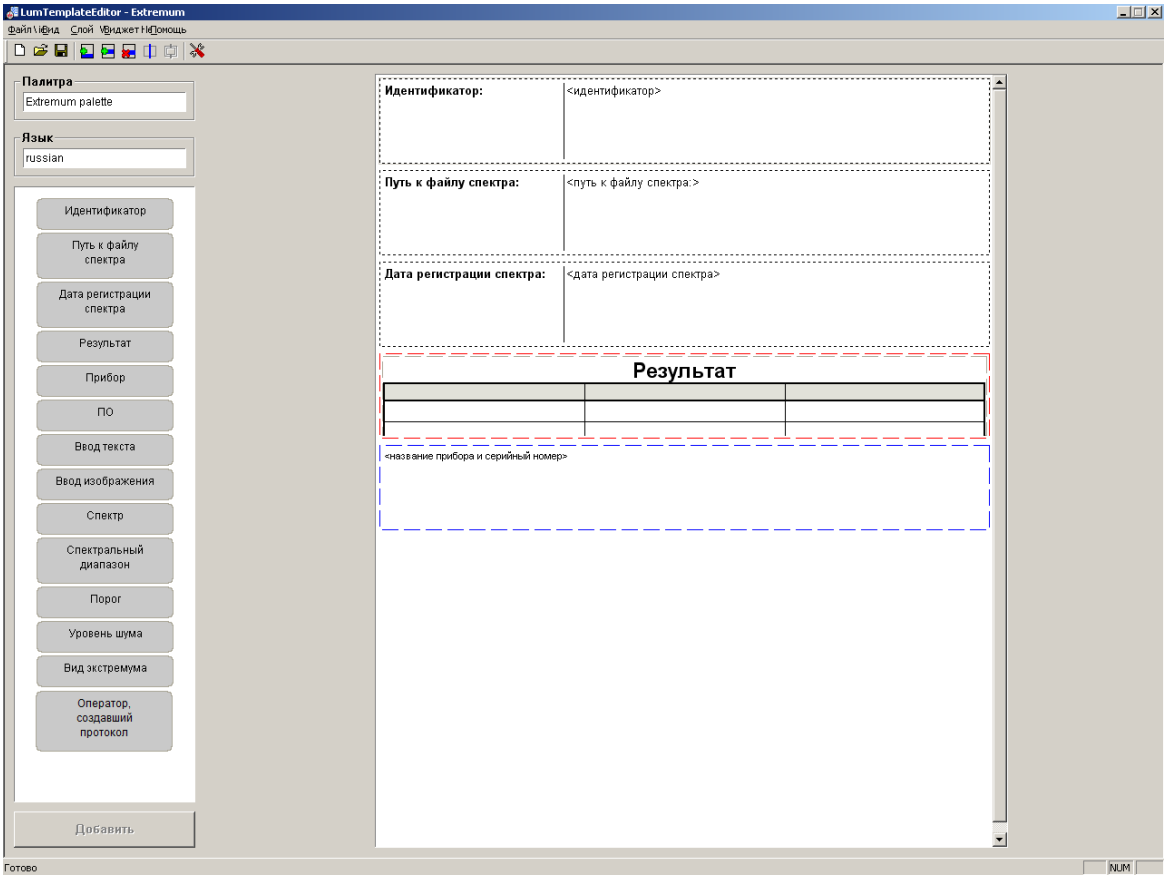


Рис. 10-9 Создание шаблона протокола. Добавление виджетов

Виджеты в шаблоне можно располагать в любом удобном порядке. В один слой можно вставить только один виджет.

Если содержимое виджета не помещается в отведённый размер слоя, то рамка будет иметь красный цвет (Рис. 10-9), для полного отображения информации нужно изменить границы рамки левой кнопкой мыши или стилусом (Рис. 10-10).

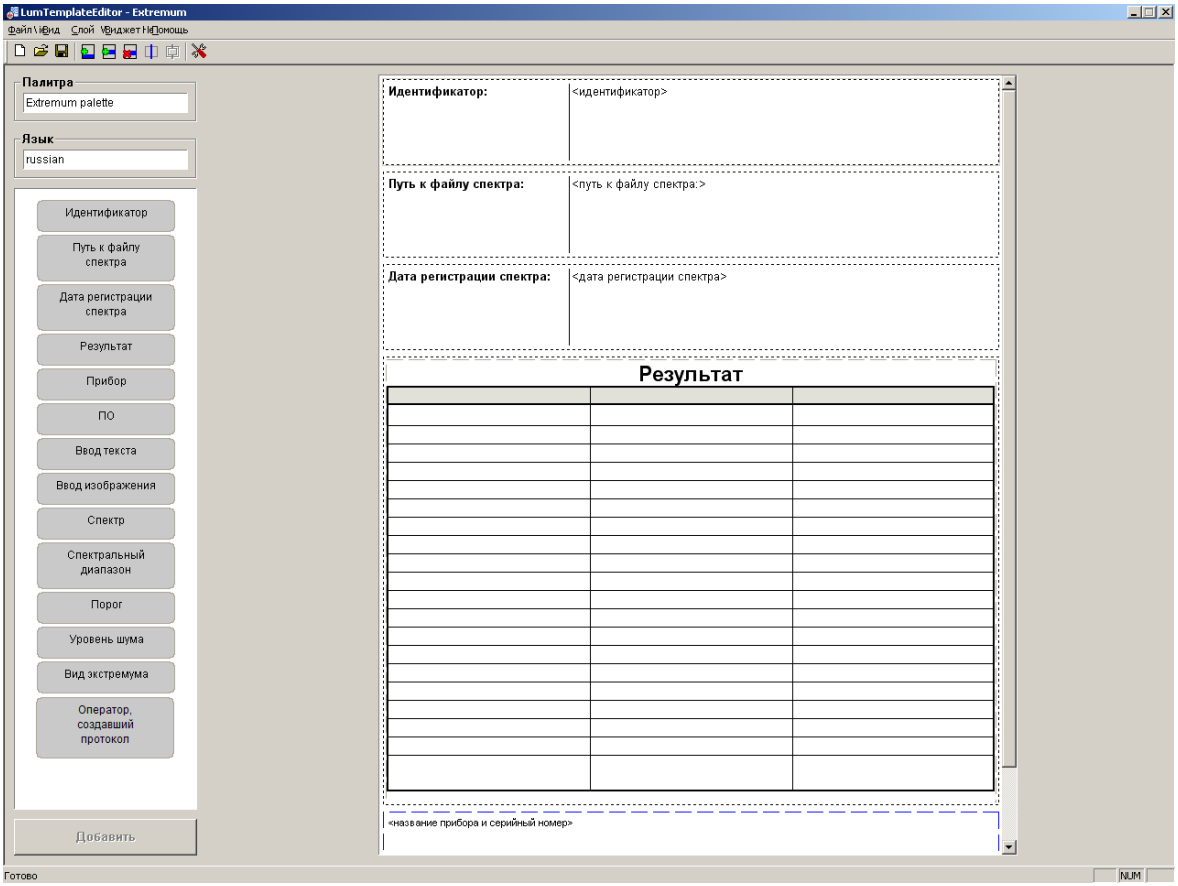


Рис. 10-10 Создание шаблона протокола. Полное отображение информации

Если виджет содержит текстовую информацию, в редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения его ориентации, размера шрифта и цвета фона с помощью команды **Настройка** в меню **Виджет** (Рис. 10-11). Кроме того, для большинства виджетов с текстовой информацией допускается редактирование текста.

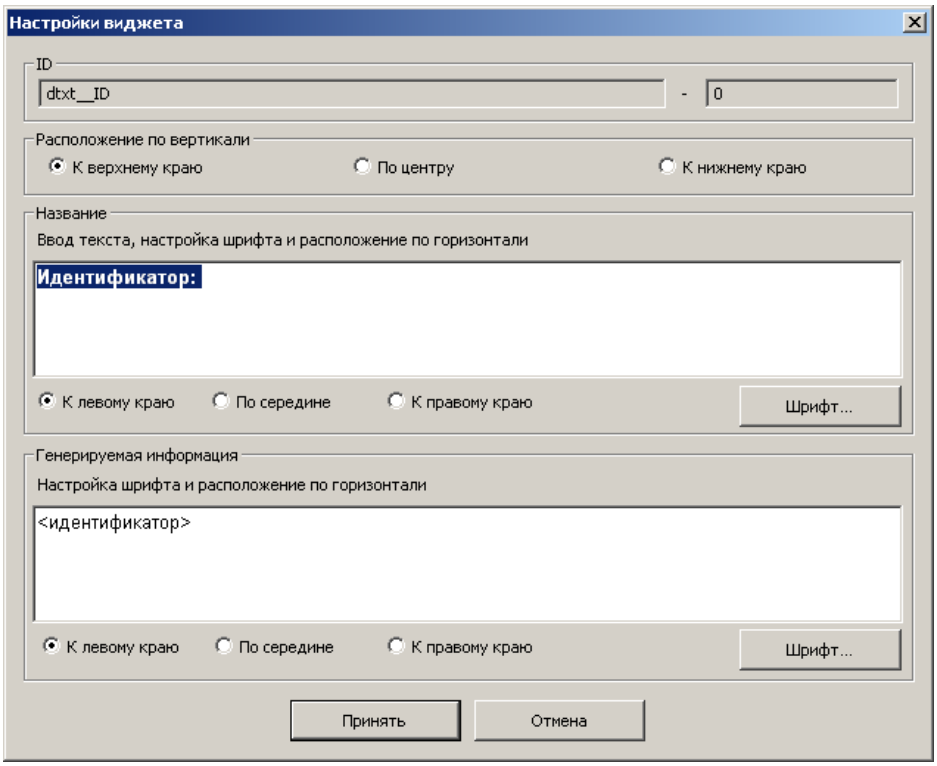


Рис. 10-11 Создание шаблона протокола. Настройки виджета

После создания шаблона протокола сохраните его, для этого выберите в меню **Файл** опцию **Сохранить как** или нажмите кнопку  панели инструментов, при этом откроется стандартное окно сохранения файла. Присвойте имя созданному Вами шаблону протокола анализа и нажмите кнопку **Сохранить**.

Для выхода из окна ***Редактора шаблонов*** нажмите крестик в правом верхнем углу.

10.6 Создание шаблона «Общего протокола»

Под шаблоном «Общего протокола» подразумевается шаблон, по которому будет выводиться на печать информация по команде **Файл/Печать протокола**. Для входа в режим создания шаблона «общего протокола» нужно сделать следующее:

1) Войти в пункт меню **Файл/Настройка шаблонов печати**. Откроется окно ***Настройка шаблона протокола*** (Рис. 10-4).

2) В данном окне нажать кнопку **Новый**. Откроется редактор шаблонов с перечнем виджетов для создания общего протокола.

Доступные виджеты, которые можно вставить в шаблон:

При выборе виджета **Спектр** в соответствующем слое шаблона появится **<Окно просмотра спектров>**. Это означает, что при создании протокола в **Окне просмотра спектров** будут отображаться все спектры, выведенные на экран в главном окне программы с соблюдением масштаба и соотношения осей. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Ввод текста** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Введите текст>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Введите текст>** можно ввести любой текст, который всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения размера шрифта вводимого текста и его ориентации по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Ввод изображения** появится стандартное окно открытия файла, для выбора изображения, которое появится в соответствующем слое, и всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения ориентации изображения по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Дата создания** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Дата создания: [ДД.ММ.ГГГГ. чч:мм:сс].** Это означает, что при создании протокола на месте **[ДД.ММ.ГГГГ. чч:мм:сс]** будет отображаться время создания ротокола. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **ПО** в соответствующем слое шаблона появится метка –**<программное обеспечение>.** Это означает, что при создании общего протокола на месте метки **<программное обеспечение>** будет отображаться название и номер версии программного обеспечения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Оператор, создавший протокол** в соответствующем слое шаблона появится метка – <Оператор, создавший протокол>. Это означает, что при создании протокола на этом месте появится имя оператора, открывшего протокол. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

10.7 Создание шаблона протокола «Проверка»

Под шаблоном протокола «Проверка» подразумевается шаблон, по которому будут выводиться на печать результаты из данного окна. Для входа в режим создания шаблона «Проверка» нужно сделать следующее:

1) Войти в пункт меню **Прибор/Проверка**. Откроется окно ***Проверка***.
2) В данном окне выбрать нужную проверку.
3) Нажать кнопку **Шаблоны протокола**. Откроется окно ***Настройка шаблона протокола*** (Рис. 10-4).
4) В данном окне нажать кнопку **Новый**. Откроется редактор шаблонов с перечнем виджетов для создания данного протокола.

Доступные виджеты, которые можно вставить в шаблон:

При выборе виджета **Текст** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Ввод текста>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Ввод текста>** можно ввести любой текст, который всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения размера шрифта вводимого текста и его ориентации по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Изображение** появится стандартное окно открытия файла, для выбора изображения, которое появится в соответствующем слое, и всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения ориентации изображения по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Версия ПО** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Версия ПО>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Версия ПО>** будет отображаться название и номер версии программного обеспечения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Дата проведения проверки** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата проведения проверки: [гг:мм:дд;чч:мм:сс]**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **Дата проведения проверки: [гг:мм:дд;чч:мм:сс]** будет отобра-

жаться дата проведения проверки. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Номер прибора** в соответствующем слое шаблона появится метка - **<Номер прибора>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Номер прибора>** будет отображаться тип и серийный номер прибора из файла активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Общий результат** в соответствующем слое шаблона появится метка - **<Общий результат>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Общий результат>** будет отображаться общий результат проверки. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Дата создания отчета** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата создания отчета: [гг:мм:дд;чч:мм:сс]**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **Дата создания отчета: [гг:мм:дд;чч:мм:сс]** будет отображаться дата создания отчета. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Тесты, не требующие регистрации спектров** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Тесты, не требующие регистрации спектров>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Тесты, не требующие регистрации спектров>** появится таблица результатов вычисления **Тестов, не требующие регистрации спектров**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Тесты по энергетическому спектру группы А** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Тесты по энергетическому спектру группы А>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Тесты по энергетическому спектру группы А>** появится таблица результатов таблица результатов вычисления **Тестов по энергетическому спектру группы А**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Погрешность волнового числа** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Погрешность волнового числа >** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Погрешность волнового числа>** появится таблица результатов вычисления теста **Погрешности волнового числа**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола три раза.

При выборе виджета **Тесты по 100% линии** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Тесты по спектрам пропускания 100% линии>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Тесты по спектрам пропускания 100% линии>** появится таблица результатов вычисления **Тестов по спектрам пропускания 100% линии**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Результаты тестов по псевдорассеянному свету** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Результаты тестов по псевдорассеянному свету>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Результаты тестов по псевдорассеянному свету>** появится таблица **Результаты тестов по псевдорассеянному свету**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Погрешность пика** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Погрешность пика>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Погрешность пика>** появится таблица результатов вычисления теста **Погрешность пика**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Стабильность пика** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Определение стабильности пиков по пленке полистирола>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Определение стабильности пиков по пленке полистирола>** появится таблица результатов вычисления теста **Стабильность пика**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Спектральное разрешение** в соответствующем слое шаблона появится метка – <**Спектральное разрешение>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Спектральное разрешение>** появится таблица результатов вычисления теста **Спектральное разрешение**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Оператор, создавший протокол** в соответствующем слое шаблона появится метка – <Оператор, создавший протокол>. Это означает, что при создании протокола на этом месте появится имя оператора, открывшего протокол. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Спектральный диапазон измерений** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Спектральный диапазон измерений>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Спектральный диапазон измерений>** появится таблица

результатов вычисления теста **Спектральный диапазон измерений**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Абсолютная погрешность измерений** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Абсолютная погрешность измерений>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Абсолютная погрешность измерений>** появится таблица результатов вычисления теста **Абсолютная погрешность измерений**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **СКО положения линии паров воды** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<СКО положения линии паров воды>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<СКО положения линии паров воды>** появится таблица результатов вычисления теста **СКО положения линии паров воды**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

10.8 Создание шаблона протокола «Статистика»

Под шаблоном протокола «Статистика» подразумевается шаблон, по которому будут выводиться на печать результаты из данного окна. Для входа в режим создания шаблона «Статистика» нужно сделать следующее:

1) Войти в пункт меню **Вычисления/Статистика**. Откроется окно ***Статистика*** (Рис. 6-1).

2) Нажать кнопку **Шаблоны протокола**. Откроется окно ***Настройка шаблона протокола*** (Рис. 10-4).

3) В данном окне нажать кнопку **Новый**. Откроется редактор шаблонов с перечнем виджетов для создания данного протокола.

Доступные виджеты, которые можно вставить в шаблон:

При выборе виджета **Ввод текста** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Введите текст>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Введите текст>** можно ввести любой текст, который всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения размера шрифта вводимого текста и его ориентации по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Идентификатор** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Идентификатор: <Идентификатор>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Идентификатор>** будет отображаться идентификатор спектра, к которому применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Путь к файлу спектра** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Путь к файлу спектра: <Путь к файлу спектра>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Путь к файлу спектра>** будет отображаться путь к файлу активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Дата регистрации спектра** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата регистрации спектра: <Дата регистрации спектра>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Дата регистрации спектра>** будет отображаться дата регистрации спектра из файла данного спектра. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Ввод изображения** появится стандартное окно открытия файла, для выбора изображения, которое появится в соответствующем слое и всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения ориентации изображения по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Спектр** в соответствующем слое шаблона появится **<Окно просмотра спектров>**. Это означает, что при создании протокола в **Окне просмотра спектров** будет отображаться активный спектр, выведенный на экран в главном окне программы с соблюдением масштаба и соотношения осей. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Прибор** в соответствующем слое шаблона появится метка - **<название прибора и серийный номер>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<название прибора и серийный номер>** будет отображаться тип и серийный номер прибора из файла активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Результат** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Результат>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Результат>** появится таблица результатов

вычисления с заголовком **Результат**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **ПО** в соответствующем слое шаблона появится метка –**<программное обеспечение>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<программное обеспечение>** будет отображаться название и номер версии программного обеспечения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Оператор, создавший протокол** в соответствующем слое шаблона появится метка – <Оператор, создавший протокол>. Это означает, что при создании протокола на этом месте появится имя оператора, открывшего протокол. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

10.9 Создание шаблона протокола «Атрибуты спектра»

Под шаблоном протокола «Атрибуты спектра» подразумевается шаблон, по которому будут выводиться на печать результаты из данного окна. Для входа в режим создания шаблона «Атрибуты спектра» нужно сделать следующее:

1) Войти в пункт меню **Вычисления/Атрибуты**. Откроется окно ***Атрибуты спектра*** (Рис. 6-2).

2) В данном окне нажать кнопку **Шаблоны протокола**. Откроется окно ***Настройка шаблона протокола*** (Рис. 10-4).

3) В данном окне нажать кнопку **Новый**. Откроется редактор шаблонов с перечнем виджетов для создания данного протокола.

Доступные виджеты, которые можно вставить в шаблон:

При выборе виджета **Ввод текста** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Введите текст>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Введите текст>** можно ввести любой текст, который всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения размера шрифта вводимого текста и его ориентации по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Идентификатор** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Идентификатор: <Идентификатор>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Идентификатор>** будет отображаться идентификатор спектра, к которому применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Путь к файлу спектра** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Путь к файлу спектра: <Путь к файлу спектра>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Путь к файлу спектра>** будет отображаться путь к файлу активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Дата регистрации спектра** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата регистрации спектра: <Дата регистрации спектра>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Дата регистрации спектра>** будет отображаться дата регистрации спектра из файла данного спектра. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Ввод изображения** появится стандартное окно открытия файла, для выбора изображения, которое появится в соответствующем слое и всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения ориентации изображения по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Спектр** в соответствующем слое шаблона появится **<Окно просмотра спектров>**. Это означает, что при создании протокола в **Окне просмотра спектров** будет отображаться проавтомашстабированный по оси Y активный спектр в диапазоне, заданном для поиска с соблюдением соотношения осей. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Прибор** в соответствующем слое шаблона появится метка - **<название прибора и серийный номер>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<название прибора и серийный номер>** будет отображаться тип и серийный номер прибора из файла активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Результат** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Результат>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Результат>** появится таблица результатов

вычисления с заголовком **Результат**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **ПО** в соответствующем слое шаблона появится метка –**<программное обеспечение>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<программное обеспечение>** будет отображаться название и номер версии программного обеспечения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Разрешение** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Разрешение: <Разрешение>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Разрешение>** будет отображаться значение разрешения, введённое оператором в окне Атрибуты спектра. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Фактор заполнения нулями** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Фактор заполнения нулями: <Фактор заполнения нулями>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Фактор заполнения нулями>** будет отображаться значение фактора заполнения нулями, введённое оператором в окне Атрибуты спектра. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Аподизация** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Аподизация: <Аподизация>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Аподизация>** будет отображаться вид аподизации, введённый оператором в окне Атрибуты спектра. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Длина волны лазера, мкм** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Длина волны лазера, мкм: <Длина волны лазера, мкм>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Длина волны лазера, мкм>** будет отображаться значение длины волны лазера, введённое оператором в окне Атрибуты спектра. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Количество сканов** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Количество сканов: <Количество сканов>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Количество сканов>** будет отображаться количество сканов, введённое оператором в окне Атрибуты спектра. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Оператор, создавший протокол** в соответствующем слое шаблона появится метка – <Оператор, создавший протокол>. Это означает, что при создании протокола на этом месте появится имя

оператора, открывшего протокол. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

10.10 Создание шаблона протокола «Поиск экстремумов»

Под шаблоном протокола «Поиск экстремумов» подразумевается шаблон, по которому будут выводиться на печать результаты из данного окна. Для входа в режим создания шаблона «Поиск экстремумов» нужно сделать следующее:

1) Войти в пункт меню **Вычисления/Поиск экстремумов**. Откроется окно ***Поиск экстремумов*** (Рис. 6-3).

2) Нажать кнопку **Шаблоны протокола**. Откроется окно ***Настройка шаблона протокола*** (Рис. 10-4).

3) В данном окне нажать кнопку **Новый**. Откроется редактор шаблонов с перечнем виджетов для создания данного протокола.

Доступные виджеты, которые можно вставить в шаблон:

При выборе виджета **Ввод текста** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Введите текст>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Введите текст>** можно ввести любой текст, который всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения размера шрифта вводимого текста и его ориентации по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Идентификатор** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Идентификатор: <Идентификатор>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Идентификатор>** будет отображаться идентификатор спектра, к которому применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Путь к файлу спектра** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Путь к файлу спектра: <Путь к файлу спектра>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Путь к файлу спектра>** будет отображаться путь к файлу активного

спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Дата регистрации спектра** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата регистрации спектра: <Дата регистрации спектра>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Дата регистрации спектра>** будет отображаться дата регистрации спектра из файла данного спектра. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Ввод изображения** появится стандартное окно открытия файла, для выбора изображения, которое появится в соответствующем слое, и всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения ориентации изображения по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Спектр** в соответствующем слое шаблона появится **<Окно просмотра спектров>**. Это означает, что при создании протокола в **Окне просмотра спектров** будет отображаться отмасштабированный по оси Y активный спектр в диапазоне, заданном для поиска с соблюдением соотношения осей. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Прибор** в соответствующем слое шаблона появится метка - **<название прибора и серийный номер>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<название прибора и серийный номер>** будет отображаться тип и серийный номер прибора из файла активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Результат** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Результат>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Результат>** появится таблица результатов вычисления с заголовком **Результат**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **ПО** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<программное обеспечение>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<программное обеспечение>** будет отображаться название и номер версии программного обеспечения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Порог** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Порог: <Порог>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Порог>** будет отображаться значение порога, введённое

оператором в окне Поиск экстремумов. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Уровень шума** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Уровень шума: <Уровень шума>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Уровень шума>** будет отображаться значение уровня шума, введённое оператором в окне Поиск экстремумов. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Вид экстремума** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Вид экстремума: <Вид экстремума>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Вид экстремума>** будет отображаться вид экстремума, введённый оператором в окне Поиск экстремумов. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Оператор, создавший протокол** в соответствующем слое шаблона появится метка – <Оператор, создавший протокол>. Это означает, что при создании протокола на этом месте появится имя оператора, открывшего протокол. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

10.11 Создание шаблона протокола «Интенсивность»

Под шаблоном протокола «Интенсивность» подразумевается шаблон, по которому будут выводиться на печать результаты из данного окна. Для входа в режим создания шаблона «Интенсивность» нужно сделать следующее:

1) Войти в пункт меню **Вычисления/Интенсивность**. Откроется окно ***Интенсивность*** (Рис. 6-5).

2) Нажать кнопку **Шаблоны протокола**. Откроется окно ***Настройка шаблона протокола*** (Рис. 10-4).

3) В данном окне нажать кнопку **Новый**. Откроется редактор шаблонов с перечнем виджетов для создания данного протокола.

Доступные виджеты, которые можно вставить в шаблон:

При выборе виджета **Ввод текста** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Введите текст>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Введите текст>** можно ввести любой текст, который всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения размера шрифта вводимого текста и его ориентации по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Идентификатор** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Идентификатор: <Идентификатор>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Идентификатор>** будет отображаться идентификатор спектра, к которому применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Путь к файлу спектра** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Путь к файлу спектра: <Путь к файлу спектра>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Путь к файлу спектра>** будет отображаться путь к файлу активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Дата регистрации спектра** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата регистрации спектра: <Дата регистрации спектра>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Дата регистрации спектра>** будет отображаться дата регистрации спектра из файла данного спектра. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Ввод изображения** появится стандартное окно открытия файла, для выбора изображения, которое появится в соответствующем слое и всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения ориентации изображения по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Спектр** в соответствующем слое шаблона появится **<Окно просмотра спектров>**. Это означает, что при создании протокола в **Окне просмотра спектров** будет отображаться активный спектр, выведенный на экран в главном окне программы с соблюдением масштаба и соотношения осей. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Прибор** в соответствующем слое шаблона появится метка - **<название прибора и серийный номер>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<название прибора и серий-**

ный номер> будет отображаться тип и серийный номер прибора из файла активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Результат** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Результат>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Результат>** появится таблица результатов вычисления с заголовком **Результат**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **ПО** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<программное обеспечение>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<программное обеспечение>** будет отображаться название и номер версии программного обеспечения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Оператор, создавший протокол** в соответствующем слое шаблона появится метка – <Оператор, создавший протокол>. Это означает, что при создании протокола на этом месте появится имя оператора, открывшего протокол. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

10.12 Создание шаблона протокола «Площадь пика»

Под шаблоном протокола «Площадь пика» подразумевается шаблон, по которому будут выводиться на печать результаты из данного окна. Для входа в режим создания шаблона «Площадь пика» нужно сделать следующее:

1) Войти в пункт меню **Вычисления/Площадь пика**. Откроется окно ***Площадь пика*** (Рис. 6-7).

2) Нажать кнопку **Шаблоны протокола**. Откроется окно ***Настройка шаблона протокола*** (Рис. 10-4).

3) В данном окне нажать кнопку **Новый**. Откроется редактор шаблонов с перечнем виджетов для создания данного протокола.

Доступные виджеты, которые можно вставить в шаблон:

При выборе виджета **Ввод текста** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Введите текст>**. Это означает, что при создании шаб-

лона протокола на месте метки **<Введите текст>** можно ввести любой текст, который всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения размера шрифта вводимого текста и его ориентации по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Идентификатор** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Идентификатор: <Идентификатор>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Идентификатор>** будет отображаться идентификатор спектра, к которому применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Путь к файлу спектра** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Путь к файлу спектра: <Путь к файлу спектра>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Путь к файлу спектра>** будет отображаться путь к файлу активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Дата регистрации спектра** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата регистрации спектра: <Дата регистрации спектра>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Дата регистрации спектра>** будет отображаться дата регистрации спектра из файла данного спектра. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Ввод изображения** появится стандартное окно открытия файла, для выбора изображения, которое появится в соответствующем слое, и всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения ориентации изображения по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Спектр** в соответствующем слое шаблона появится **<Окно просмотра спектров>**. Это означает, что при создании протокола в **Окне просмотра спектров** будет отображаться проавтомашстабированный по оси Y активный спектр в диапазоне, заданном для поиска с соблюдением соотношения осей. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Прибор** в соответствующем слое шаблона появится метка - **<название прибора и серийный номер>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<название прибора и серийный номер>** будет отображаться тип и серийный номер прибора из

файла активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Результат** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Результат>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Результат>** появится таблица результатов вычисления с заголовком **Результат**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **ПО** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<программное обеспечение>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<программное обеспечение>** будет отображаться название и номер версии программного обеспечения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Оператор, создавший протокол** в соответствующем слое шаблона появится метка – <Оператор, создавший протокол>. Это означает, что при создании протокола на этом месте появится имя оператора, открывшего протокол. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

10.13 Создание шаблона протокола «Сравнение спектров по Евклидовому расстоянию»

Под шаблоном протокола «Сравнение спектров по Евклидовому расстоянию» подразумевается шаблон, по которому будут выводиться на печать результаты из данного окна. Для входа в режим создания шаблона «Сравнение спектров по Евклидовому расстоянию» нужно сделать следующее:

1) Войти в пункт меню **Анализ/Сравнение спектров**. Откроется окно ***Сравнение спектров по Евклидовому расстоянию*** (Рис. 7-1).

2) Нажать кнопку **Шаблоны протокола**. Откроется окно ***Настройка шаблона протокола*** (Рис. 10-4).

3) В данном окне нажать кнопку **Новый**. Откроется редактор шаблонов с перечнем виджетов для создания данного протокола.

Доступные виджеты, которые можно вставить в шаблон:

При выборе виджета **Ввод текста** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Введите текст>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Введите текст>** можно ввести любой текст, который всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения размера шрифта вводимого текста и его ориентации по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Идентификатор1** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Идентификатор1: <Идентификатор1>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Идентификатор1>** будет отображаться идентификатор спектра 1, к которому применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Путь к файлу спектра1** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Путь к файлу спектра1: <Путь к файлу спектра1>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Путь к файлу спектра1>** будет отображаться путь к файлу спектра 1, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Дата регистрации спектра1** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата регистрации спектра1: <Дата регистрации спектра1>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Дата регистрации спектра1>** будет отображаться дата регистрации спектра 1 из файла данного спектра. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Идентификатор2** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Идентификатор2: <Идентификатор2>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Идентификатор2>** будет отображаться идентификатор спектра 2, к которому применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Путь к файлу спектра2** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Путь к файлу спектра2: <Путь к файлу спектра2>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Путь к файлу спектра2>** будет отображаться путь к файлу спектра 2, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Дата регистрации спектра2** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата регистрации спектра2: <Дата регистрации спектра2>**. Это означает, что при создании шаблона прото-

кола на месте метки **<Дата регистрации спектра2>** будет отображаться дата регистрации спектра 2 из файла данного спектра. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Ввод изображения** появится стандартное окно открытия файла, для выбора изображения, которое появится в соответствующем слое, и всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения ориентации изображения по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Спектр** в соответствующем слое шаблона появится **<Окно просмотра спектров>**. Это означает, что при создании протокола в **Окне просмотра спектров** будут отображаться два сравниваемых спектра: спектр 1 и спектр 2, в диапазоне, заданном для сравнения оператором в окне Сравнение спектров по Евклидовому расстоянию. Если в данном окне установлена галочка в поле Показать исключённые интервалы на графике, то эти интервалы тоже выводятся в протокол в заштрихованном виде. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Прибор** в соответствующем слое шаблона появится метка - **<название прибора и серийный номер>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<название прибора и серийный номер>** будет отображаться тип и серийный номер прибора из файла активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Результат** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Результат>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Результат>** появится таблица результатов вычисления с заголовком **Результат**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **ПО** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<программное обеспечение>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<программное обеспечение>** будет отображаться название и номер версии программного обеспечения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Оператор, создавший протокол** в соответствующем слое шаблона появится метка – <Оператор, создавший протокол>. Это означает, что при создании протокола на этом месте появится имя оператора, открывшего протокол. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

10.14 Создание шаблона протокола «Нефтепродукты в воде»

Под шаблоном протокола «Нефтепродукты в воде» подразумевается шаблон, по которому будут выводиться на печать результаты из данного окна. Для входа в режим создания шаблона «Нефтепродукты в воде» нужно сделать следующее:

1) Войти в пункт меню **Анализ/По методикам/Нефтепродукты в воде/по М 01-39-2010 или по DIN38409H18**. Откроется окно ***Нефтепродукты в воде*** (Рис. 7-5).

2) Нажать кнопку Шаблоны протокола. Откроется окно ***Настройка шаблона протокола*** (Рис. 10-4).

3) В данном окне нажать кнопку **Новый**. Откроется редактор шаблонов с перечнем виджетов для создания данного протокола.

Доступные виджеты, которые можно вставить в шаблон:

При выборе виджета **Ввод текста** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Введите текст>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Введите текст>** можно ввести любой текст, который всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения размера шрифта вводимого текста и его ориентации по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Идентификатор** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Идентификатор: <Идентификатор>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Идентификатор>** будет отображаться идентификатор спектра, к которому применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Путь к файлу спектра** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Путь к файлу спектра: <Путь к файлу спектра>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Путь к файлу спектра>** будет отображаться путь к файлу активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Дата регистрации спектра** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата регистрации спектра: <Дата регистрации спектра>**. Это означает, что при создании шаблона протокола

на месте метки **<Дата регистрации спектра>** будет отображаться дата регистрации спектра из файла данного спектра. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Ввод изображения** появится стандартное окно открытия файла, для выбора изображения, которое появится в соответствующем слое, и всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения ориентации изображения по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Спектр** в соответствующем слое шаблона появится **<Окно просмотра спектров>**. Это означает, что при создании протокола в **Окне просмотра спектров** будет отображаться проавтомашстабированный по оси Y активный спектр в диапазоне 2450-3300 $см^{-1}$ с соблюдением соотношения осей. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Прибор** в соответствующем слое шаблона появится метка - **<название прибора и серийный номер>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<название прибора и серийный номер>** будет отображаться тип и серийный номер прибора из файла активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Объём экстрагента, мл** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Объём экстрагента, мл: <Объём экстрагента, мл>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Объём экстрагента, мл>** будет отображаться значение объёма экстрагента, введённое оператором в окне Нефтепродукты в воде. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Объём пробы,л** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Объём пробы,л: <Объём пробы,л>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Объём пробы,л>** будет отображаться значение объёма пробы, введённое оператором в окне Нефтепродукты в воде. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Оптическая длина кюветы,см** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Оптическая длина кюветы,см: <Оптическая длина кюветы,см>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Оптическая длина кюветы,см>** будет отображаться значение оптической длины кюветы, введённое оператором в окне Нефтепродукты в воде. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Полнота экстракции,%** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Полнота экстракции,%: <Полнота экстракции,%>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Полнота экстракции,%>** будет отображаться значение полноты экстракции, введённое оператором в окне Нефтепродукты в воде. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Коэффициент разбавления** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Коэффициент разбавления: <Коэффициент разбавления>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Коэффициент разбавления>** будет отображаться значение коэффициента разбавления, введённое оператором в окне Нефтепродукты в воде. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Пики** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Пики: <Пики>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Пики>** будут отображаться названия характерных пиков нефтепродуктов в воде, положение этих пиков и величина поглощения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Концентрация Н/П в воде, мг/л** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Концентрация Н/П в воде, мг/л: <Концентрация Н/П в воде, мг/л>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Концентрация Н/П в воде, мг/л>** появится вычисленный результат. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **ПО** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<программное обеспечение>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<программное обеспечение>** будет отображаться название и номер версии программного обеспечения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Оператор, создавший протокол** в соответствующем слое шаблона появится метка – <Оператор, создавший протокол>. Это означает, что при создании протокола на этом месте появится имя оператора, открывшего протокол. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

10.15 Создание шаблона протокола «Нефтепродукты в твёрдых образцах»

Под шаблоном протокола «Нефтепродукты в твёрдых образцах» подразумевается шаблон, по которому будут выводиться на печать результаты из данного окна. Для входа в режим создания шаблона «Нефтепродукты в твёрдых образцах» нужно сделать следующее:

1) Войти в пункт меню **Анализ/По методикам/Нефтепродукты в твёрдых образцах/по инструкции ООО «ЛММ» или по DIN38409H18**. Откроется окно ***Нефтепродукты в твёрдых образцах*** (Рис. 7-8).

2) Нажать кнопку **Шаблоны протокола**. Откроется окно ***Настройка шаблона протокола*** (Рис. 10-4).

3) В данном окне нажать кнопку **Новый**. Откроется редактор шаблонов с перечнем виджетов для создания данного протокола.

Доступные виджеты, которые можно вставить в шаблон:

При выборе виджета **Ввод текста** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Введите текст>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Введите текст>** можно ввести любой текст, который всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения размера шрифта вводимого текста и его ориентации по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Идентификатор** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Идентификатор: <Идентификатор>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Идентификатор>** будет отображаться идентификатор спектра, к которому применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Путь к файлу спектра** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Путь к файлу спектра: <Путь к файлу спектра>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Путь к файлу спектра>** будет отображаться путь к файлу активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Дата регистрации спектра** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата регистрации спектра: <Дата реги-**

страции спектра>. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Дата регистрации спектра>** будет отображаться дата регистрации спектра из файла данного спектра. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Ввод изображения** появится стандартное окно открытия файла, для выбора изображения, которое появится в соответствующем слое и всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения ориентации изображения по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Спектр** в соответствующем слое шаблона появится **<Окно просмотра спектров>**. Это означает, что при создании протокола в **Окне просмотра спектров** будет отображаться отмасштабированный по оси Y активный спектр в диапазоне 2450-3300 $см^{-1}$ с соблюдением соотношения осей. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Прибор** в соответствующем слое шаблона появится метка - **<название прибора и серийный номер>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<название прибора и серийный номер>** будет отображаться тип и серийный номер прибора из файла активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Объём экстрагента, мл** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Объём экстрагента, мл: <Объём экстрагента, мл>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Объём экстрагента, мл>** будет отображаться значение объёма экстрагента, введённое оператором в окне Нефтепродукты в твёрдых образцах. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Масса пробы,г** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Масса пробы,г: <Масса пробы,г>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Масса пробы,г>** будет отображаться значение массы пробы, введённое оператором в окне Нефтепродукты в твёрдых образцах. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Оптическая длина кюветы,см** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Оптическая длина кюветы,см: <Оптическая длина кюветы,см>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Оптическая длина кюветы,см>** будет отображаться значение оптической длины кюветы, введённое оператором в окне

Нефтепродукты в твёрдых образцах. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Полнота экстракции,%** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Полнота экстракции,%: <Полнота экстракции,%>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Полнота экстракции,%>** будет отображаться значение полноты экстракции, введённое оператором в окне Нефтепродукты в твёрдых образцах. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Коэффициент разбавления** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Коэффициент разбавления: <Коэффициент разбавления>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Коэффициент разбавления>** будет отображаться значение коэффициента разбавления, введённое оператором в окне Нефтепродукты в твёрдых образцах. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Доля сухого вещества в пробе, %** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Доля сухого вещества в пробе, %: <Доля сухого вещества в пробе, %>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Доля сухого вещества в пробе, %>** будет отображаться значение доли сухого вещества в пробе, введённое оператором в окне Нефтепродукты в твёрдых образцах. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Пики** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Пики: <Пики>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Пики>** будут отображаться названия характерных пиков нефтепродукты в твёрдых образцах, положение этих пиков и величина поглощения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Концентрация Н/П в воде, мг/кг** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Концентрация Н/П в воде, мг/кг: <Концентрация Н/П в воде, мг/кг>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Концентрация Н/П в воде, мг/кг>** появится вычисленный результат. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **ПО** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<программное обеспечение>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<программное обеспечение>** будет отображаться название и номер версии программного обеспечения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Оператор, создавший протокол** в соответствующем слое шаблона появится метка – <Оператор, создавший протокол>. Это означает, что при создании протокола на этом месте появится имя оператора, открывшего протокол. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

10.16 Создание шаблона протокола «Идентификация нефтепродуктов»

Под шаблоном протокола «Идентификация нефтепродуктов» подразумевается шаблон, по которому будут выводиться на печать результаты из данного окна. Для входа в режим создания шаблона «Идентификация нефтепродуктов» нужно сделать следующее:

1) Войти в пункт меню **Анализ/По методикам/Идентификация нефтепродуктов/По приказу 241 Минприроды**. Откроется окно ***Идентификация нефтепродуктов*** (Рис. 7-10).

2) Нажать кнопку **Шаблоны протокола**. Откроется окно ***Настройка шаблона протокола*** (Рис. 10-4).

3) В данном окне нажать кнопку **Новый**. Откроется редактор шаблонов с перечнем виджетов для создания данного протокола.

Доступные виджеты, которые можно вставить в шаблон:

При выборе виджета **Ввод текста** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Введите текст>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Введите текст>** можно ввести любой текст, который всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения размера шрифта вводимого текста и его ориентации по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Идентификатор1** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Идентификатор1: <Идентификатор1>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Идентификатор1>** будет отображаться идентификатор спектра 1, к которому применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Путь к файлу спектра1** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Путь к файлу спектра1: <Путь к файлу спектра1>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Путь к файлу спектра1>** будет отображаться путь к файлу спектра 1, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Дата регистрации спектра1** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата регистрации спектра1: <Дата регистрации спектра1>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Дата регистрации спектра1>** будет отображаться дата регистрации спектра 1 из файла данного спектра. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Идентификатор2** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Идентификатор2: <Идентификатор2>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Идентификатор2>** будет отображаться идентификатор спектра 2, к которому применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Путь к файлу спектра2** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Путь к файлу спектра2: <Путь к файлу спектра2>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Путь к файлу спектра2>** будет отображаться путь к файлу спектра 2, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Дата регистрации спектра2** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата регистрации спектра2: <Дата регистрации спектра2>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Дата регистрации спектра2>** будет отображаться дата регистрации спектра 2 из файла данного спектра. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Ввод изображения** появится стандартное окно открытия файла, для выбора изображения, которое появится в соответствующем слое и всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения ориентации изображения по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Спектр** в соответствующем слое шаблона появится **<Окно просмотра спектров>**. Это означает, что при создании протокола в **Окне просмотра спектров** будут отображаться два сравниваемых

спектра: спектр 1 и спектр 2, в диапазоне 900-1500 $см^{-1}$. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Прибор** в соответствующем слое шаблона появится метка - **<название прибора и серийный номер>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<название прибора и серийный номер>** будет отображаться тип и серийный номер прибора из файла активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Критерий индентификации, %** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Критерий индентификации, %: <Критерий индентификации, %>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Критерий индентификации, %>** будет отображаться значение критерия, заданное оператором в окне Идентификация нефтепродуктов. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Коррекция базовой линии** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Коррекция базовой линии: <Коррекция базовой линии>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Коррекция базовой линии>** будет отображаться Да или Нет, в зависимости от установки галочки в окне Идентификация нефтепродуктов. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Результат** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Результат>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Результат>** появится таблица результатов вычисления с заголовком **Результат**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Заключение** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Заключение: <Заключение>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Заключение>** будет отображаться общий результат по идентичности спектров. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **ПО** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<программное обеспечение>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<программное обеспечение>** будет отображаться название и номер версии программного обеспечения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Оператор, создавший протокол** в соответствующем слое шаблона появится метка – <Оператор, создавший протокол>. Это означает, что при создании протокола на этом месте появится имя

оператора, открывшего протокол. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

10.17 Создание шаблона протокола «Определение трансизомеров жирных кислот»

Под шаблоном протокола «Определение трансизомеров жирных кислот» подразумевается шаблон, по которому будут выводиться на печать результаты из данного окна. Для входа в режим создания шаблона «Определение трансизомеров жирных кислот» нужно сделать следующее:

1) Войти в пункт меню **Анализ/По методикам/Определение трансизомеров жирных кислот/по ГОСТ 31754-2012**. Откроется окно ***Определение трансизомеров жирных кислот*** (Рис. 7-12).

2) Нажать кнопку **Шаблоны протокола**. Откроется окно ***Настройка шаблона протокола*** (Рис. 10-4).

3) В данном окне нажать кнопку Новый. Откроется редактор шаблонов с перечнем виджетов для создания данного протокола.

Доступные виджеты, которые можно вставить в шаблон:

При выборе виджета **Ввод текста** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Введите текст>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Введите текст>** можно ввести любой текст, который всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения размера шрифта вводимого текста и его ориентации по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Идентификатор** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Идентификатор: <Идентификатор>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Идентификатор>** будет отображаться идентификатор спектра, к которому применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Путь к файлу спектра** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Путь к файлу спектра: <Путь к файлу спектра>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Путь к файлу спектра>** будет отображаться путь к файлу активного

спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Дата регистрации спектра** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата регистрации спектра: <Дата регистрации спектра>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Дата регистрации спектра>** будет отображаться дата регистрации спектра из файла данного спектра. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Ввод изображения** появится стандартное окно открытия файла, для выбора изображения, которое появится в соответствующем слое и всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения ориентации изображения по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Спектр** в соответствующем слое шаблона появится **<Окно просмотра спектров>**. Это означает, что при создании протокола в **Окне просмотра спектров** будет отображаться проавтомашстабированный по оси Y активный спектр в диапазоне 680-1650 $см^{-1}$ с соблюдением соотношения осей. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Прибор** в соответствующем слое шаблона появится метка - **<название прибора и серийный номер>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<название прибора и серийный номер>** будет отображаться тип и серийный номер прибора из файла активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Объём пикнометра, $дм^3$** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Объём пикнометра, $дм^3$: <Объём пикнометра, $дм^3$>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Объём пикнометра, $дм^3$>** будет отображаться значение объёма объём пикнометра, введённое оператором в окне Определение трансизомеров жирных кислот. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Масса пробы,г** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Масса пробы,г: <Масса пробы,г>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Масса пробы,г>** будет отображаться значение массы пробы, введённое оператором в окне Определение трансизомеров жирных кислот. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Оптическая длина кюветы,см** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Оптическая длина кюветы,см: <Оптическая длина кюветы,см>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Оптическая длина кюветы,см>** будет отображаться значение оптической длины кюветы, введённое оператором в окне Определение трансизомеров жирных кислот. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Массовая доля трансизомеров,%** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Массовая доля трансизомеров,%: <Массовая доля трансизомеров,%>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Массовая доля трансизомеров,%>** будет отображаться значение полноты экстракции, введённое оператором в окне Определение трансизомеров жирных кислот. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **ПО** в соответствующем слое шаблона появится метка –**<программное обеспечение>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<программное обеспечение>** будет отображаться название и номер версии программного обеспечения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Оператор, создавший протокол** в соответствующем слое шаблона появится метка – <Оператор, создавший протокол>. Это означает, что при создании протокола на этом месте появится имя оператора, открывшего протокол. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

10.18 Создание шаблона протокола «Определение концентрации СБС в битуме»

Под шаблоном протокола «Определение концентрации СБС в битуме» подразумевается шаблон, по которому будут выводиться на печать результаты из данного окна. Для входа в режим создания шаблона «концентрации СБС в битуме» нужно сделать следующее:

1) Войти в пункт меню **Анализ/По методикам/Определение концентрации СБС в битуме**. Откроется окно ***Определение концентрации СБС в битуме*** (Рис. 7-13).

2) Нажать кнопку **Шаблоны протокола**. Откроется окно ***Настройка шаблона протокола*** (Рис. 10-4).

3) В данном окне нажать кнопку Новый. Откроется редактор шаблонов с перечнем виджетов для создания данного протокола.

Доступные виджеты, которые можно вставить в шаблон:

При выборе виджета **Текст** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Введите текст>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Введите текст>** можно ввести любой текст, который всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения размера шрифта вводимого текста и его ориентации по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **ПО** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Программное обеспечени**е: **<информация о ПО>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<информация о ПО>** будет отображаться название и номер версии программного обеспечения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Тип прибора** в соответствующем слое шаблона появится метка - **<тип прибора>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<тип прибора>** будет отображаться тип прибора из файла спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Серийный номер** в соответствующем слое шаблона появится метка - **<серийный номер прибора>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<серийный номер прибора>** будет отображаться серийный номер прибора из файла спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Коэффициент x** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Коэффициент x**: **<значение коэффициента x>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<значение коэффициента x>** будет отображаться значение коэффициента x, которое было введено в окне и использовалось для расчета концентрации СБС в битуме. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Коэффициент y** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Коэффициент y**: **<значение коэффициента y>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<значение коэффициента y>** будет отображаться значение коэффициента y, которое

было введено в окне и использовалось для расчета концентрации СБС в битуме. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Результаты** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Результаты** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **Результаты** появится таблица результатов вычисления с заголовком **Результаты**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Средняя концентрация** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Средняя концентрация**: **<средняя концентрация>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<средняя концентрация>** будет отображаться вычисленное значение средней концентрации СБС по всем образцам в процентах. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Комментарий** в соответствующем слое шаблона появится метка –Комментарий: **<комментарий из программы>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<комментарий>** будет отображаться введенный в окне в поле **Комментарий** текст. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Спектр** в соответствующем слое шаблона появится картинка с изображением главного окна программы. Это означает, что при создании протокола на месте картинки будут отображаться открытые спектры в том виде, в котором они выведенны на экран в главном окне программы. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Изображение** появится стандартное окно открытия файла, для выбора изображения, которое появится в соответствующем слое, и всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения ориентации изображения по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Оператор** в соответствующем слое шаблона появится метка – Оператор, создавший протокол: <оператор, создавший протокол>. Это означает, что при создании протокола на месте метки <оператор, создавший протокол> появится имя оператора, открывшего протокол. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Дата создания отчета** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата создания отчета: <дата>**. Это означает,

что при создании шаблона протокола на месте метки **<дата>** будет отображаться дата создания протокола. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

10.19 Создание шаблона протокола «Градуировка»

Под шаблоном протокола «Градуировка» подразумевается шаблон, по которому будут выводиться на печать результаты из данного окна. Для входа в режим создания шаблона «Градуировка» нужно сделать следующее:

1) Войти в пункт меню **Анализ/Количественный анализ/Градуировка**. Откроется окно ***Количественный анализ (Градуировка)*** (Рис. 7-16).

2) Нажать кнопку **Шаблоны протокола**. Откроется окно ***Настройка шаблона протокола*** (Рис. 10-4).

3) В данном окне нажать кнопку **Новый**. Откроется редактор шаблонов с перечнем виджетов для создания данного протокола.

Доступные виджеты, которые можно вставить в шаблон:

При выборе виджета **Ввод текста** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Введите текст>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<Введите текст>** можно ввести любой текст, который всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения размера шрифта вводимого текста и его ориентации по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Ввод изображения** появится стандартное окно открытия файла, для выбора изображения, которое появится в соответствующем слое, и всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения ориентации изображения по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Дата создания протокола** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата создания протокола: <дата создания протокола>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<дата создания протокола>** будет отображаться дата

создания протокола. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Дата создания градуировки** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата создания градуировки: <дата создания градуировки>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<дата создания градуировки>** будет отображаться дата создания градуировки из файла данной градуировки. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Прибор** в соответствующем слое шаблона появится метка - **<название прибора и серийный номер>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<название прибора и серийный номер>** будет отображаться тип и серийный номер прибора из файла активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **ПО** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<программное обеспечение>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<программное обеспечение>** будет отображаться название и номер версии программного обеспечения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Имя градуировки** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Имя градуировки: <имя градуировки>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<имя градуировки>** будет отображаться имя данной градуировки. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Компонент** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Компонент: <компонент>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<компонент>** будет отображаться имя компонента и единицы его измерения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Настройки градуировки** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Настройки градуировки: <настройки градуировки>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<настройки градуировки>** будет отображаться спектральный диапазон в котором определялись площади (или высоты) пиков выбранных спектров для построения градуировочной зависимости; по какому параметру производился расчет (по площади или высоте пика); вид градуировочного уравнения; и проводилась ли коррекция базовой линии. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Образцы** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Образцы>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Образцы>** появится таблица образцов, использованных для вычисления градуировочной зависимости, с заголовком **Образцы**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Градуировочная зависимость** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Градуировочная зависимость: <коэффициенты градуировочного уравнения и коэффициент детерминации>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<коэффициенты градуировочного уравнения и коэффициент детерминации>** будут отображаться коэффициенты уравнения и коэффициент детерминации полученной градуировочной зависимости. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **График градуировочной зависимости** в соответствующем слое шаблона появится **<Окно просмотра графика>**. Это означает, что при создании протокола в **Окне просмотра графика** будут отображаться график вычисленной градуировочной зависимости. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Диапазон анализа** в соответствующем слое шаблона появится метка – **Диапазон анализа: <диапазон анализа>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<диапазон анализа>** будет отображаться диапазон анализа вычисленной градуировки. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Оператор, создавший протокол** в соответствующем слое шаблона появится метка – <Оператор, создавший протокол>. Это означает, что при создании протокола на этом месте появится имя оператора, открывшего протокол. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

10.20 Создание шаблона протокола «Количественный анализ»

Под шаблоном протокола «Количественный анализ» подразумевается шаблон, по которому будут выводиться на печать результаты из данного

окна. Для входа в режим создания шаблона «Количественный анализ» нужно сделать следующее:

1) Войти в пункт меню **Анализ/Количественный анализ/Анализ**. Откроется окно ***Количественный анализ.*** (Рис. 7-14).

2) Нажать кнопку **Шаблоны протокола**. Откроется окно ***Настройка шаблона протокола*** (Рис. 10-4).

3) В данном окне нажать кнопку **Новый**. Откроется редактор шаблонов с перечнем виджетов для создания данного протокола.

Доступные виджеты, которые можно вставить в шаблон:

При выборе виджета **Ввод текста** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<введите текст>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<введите текст>** можно ввести любой текст, который всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения размера шрифта вводимого текста и его ориентации по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Ввод изображения** появится стандартное окно открытия файла, для выбора изображения, которое появится в соответствующем слое, и всегда будет отображаться в создаваемом протоколе. В редакторе шаблонов предусмотрена возможность изменения ориентации изображения по слою. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола многократно.

При выборе виджета **Дата создания протокола** в соответствующем слое шаблона появится метка - **Дата создания протокола: <дата создания протокола>**. Это означает, что при создании шаблона протокола на месте метки **<дата создания протокола>** будет отображаться дата создания протокола. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Прибор** в соответствующем слое шаблона появится метка - **<название прибора и серийный номер>**. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<название прибора и серийный номер>** будет отображаться тип и серийный номер прибора из файла активного спектра, для которого применяется данная операция. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **ПО** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<программное обеспечение>.** Это означает, что при создании протокола на месте метки **<программное обеспечение>** будет отобра-

жаться название и номер версии программного обеспечения. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Результат** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<Результат>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<Результат>** появится таблица результатов вычисления с заголовком **Результат**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Использованные градуировки** в соответствующем слое шаблона появится метка – **<использованные градуировки>** с таблицей. Это означает, что при создании протокола на месте метки **<использованные градуировки>** появится таблица использованных для анализа градуировок с заголовком **Использованные градуировки**. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

При выборе виджета **Оператор, создавший протокол** в соответствующем слое шаблона появится метка – <Оператор, создавший протокол>. Это означает, что при создании протокола на этом месте появится имя оператора, открывшего протокол. Этот виджет можно вставить в шаблон протокола только один раз.

11 Настройки безопасности

В окне ***Настройки безопасности*** (Рис. 11-2, Рис. 11-10, Рис. 11-11, Рис. 11-12, Рис. 11-13 и Рис. 11-14) осуществляется управление политикой безопасности при работе с программой СпектраЛЮМ в соответствии с п. 1.3. Вход в это окно возможен только для пользователя, обладающего правами руководителя группы. Руководитель группы может быть создан при инсталляции программы СпектраЛЮМ (см. подробнее п.12), а также может быть назначен сервис-инженером (представителем ООО «ЛММ») с помощью специальной сервисной программы. Пользователю, не имеющему прав руководителя группы, доступ в данное окно закрыт.

В окне ***Настройки безопасности*** реализовано выполнение следующих функций:

- Вкладка **Пользователи**. Управление учетными записями пользователей (см. п. 11.2).
- Вкладка **Общие настройки**. Изменение параметров, являющихся общими для всех пользователей (см. п. 11.2.1).
- Вкладка **Аудит событий**. Просмотр журналов аудита событий (см. п. 11.2.2).
- Вкладка **Архивирование**. Настройка архивирования журналов аудита событий (см. п. 11.2.3).
- Вкладка **Подписывание файлов**. Подписывание в пакетном режиме файлов, созданных вне приложения СпектраЛЮМ (см. п. 11.2.4).
- Вкладка **История**. Просмотр истории модификации любого рабочего файла, имеющего цифровую подпись (см. п. 11.2.5).

Для выхода из диалогового окна ***Настройки безопасности*** нажмите кнопку **Выход,** откроется окно ***Завершить работу*** (Рис. 11-1).

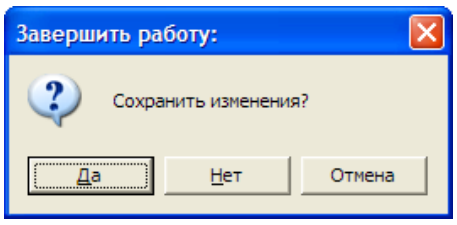


Рис. 11-1 Диалог Завершить работу

В окне ***Завершить работу*** (Рис. 11-1) доступны следующие кнопки:

- Кнопка **Да** позволяет выйти из диалогового окна ***Настройки безопасности***, сохранив изменения.
- Кнопка **Нет** позволяет выйти из диалогового окна ***Настройки безопасности*** без сохранения изменений.
- Кнопка **Отмена** возвращает в диалоговое окно ***Настройки безопасности***.

11.1 Уровни доступа к разделам программы СпектраЛЮМ

В зависимости от роли пользователя, назначенной руководителем группы (см. п. 11.2), открываются различные уровни доступа к разделам программы СпектраЛЮМ.

Уровень доступа для пользователей с ролью Оператор (руководитель группы)

Полный доступ открыт ко всем функциям СпектраЛЮМ. В настройках безопасности открыт доступ к управлению пользователями только своей группы.

Уровень доступа для пользователей с ролью Оператор 1

Полный доступ открыт ко всем функциям СпектраЛЮМ, кроме пункта меню: Файл/Настройки безопасности (см.п. 11).

Уровень доступа для пользователей с ролью Оператор 2

Полный доступ открыт ко всем функциям СпектраЛЮМ, кроме пунктов меню:

- Файл/Настройки безопасности (см. п. 11)
- Прибор/Настройки спектрометра (см.п. 3.5)
- Прибор/Управление приводами (см. п. 3.4)

11.2 Управление учетными записями пользователей

Вкладка **Пользователи** окна ***Настройки безопасности*** (Рис. 11-2) предназначена для управления учетными записями пользователей группы. На вкладке **Пользователи** руководитель группы может создавать или удалять пользователей своей группы, а также управлять их учетными записями (изменять имена, полные имена, состояние активности, пароли, язык интерфейса). Руководитель группы также может управлять собственной учетной записью – изменять некоторые параметры: имя, полное имя, язык интерфейса и пароль.

На вкладке **Пользователи** окна ***Настройки безопасности*** (Рис. 11-2) расположена таблица, в которой отображены все пользователи данной группы, а также секция **Пользователь**, в которой выводится подробная информация о выделенном в таблице пользователе. Эта информация соответствует данным, введенным при инсталляции программы или в окне ***Добавить нового пользователя*** (Рис. 11-3).

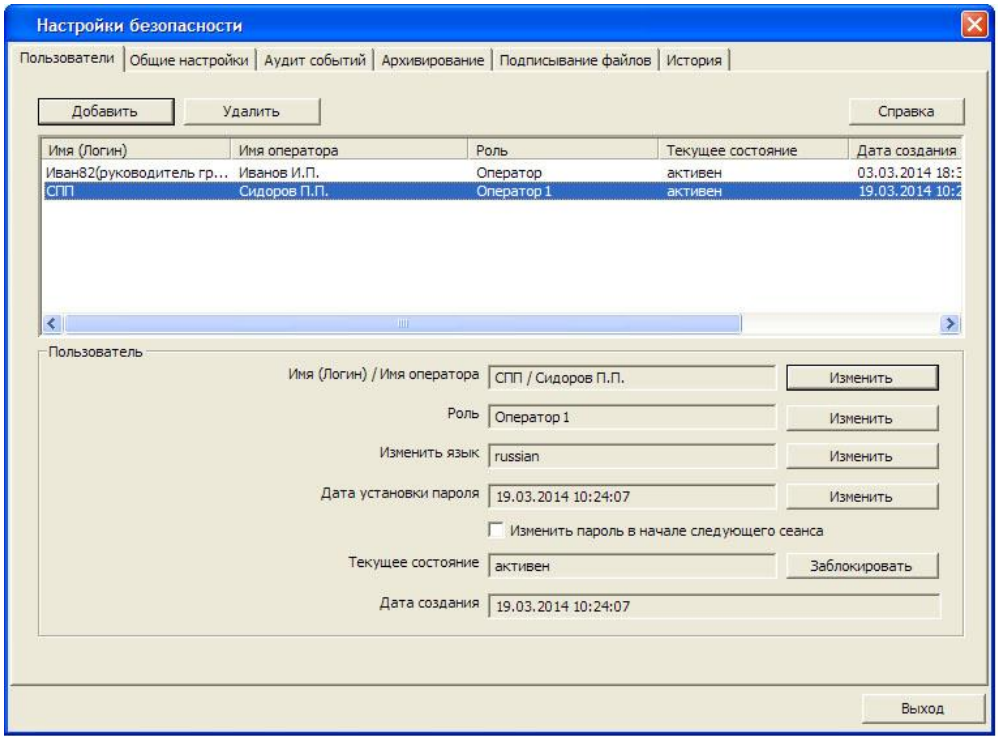


Рис. 11-2 Вкладка Пользователи окна Настройки безопасности

Чтобы добавить нового пользователя нажмите кнопку **Добавить**. В открывшемся окне ***Добавить нового пользователя*** (Рис. 11-3) введите имя (логин) для нового пользователя (отображается в окне ***Авторизация***), имя оператора (отображается в столбце **Оператор** во всех типах

журналов), пароль, выберите роль в соответствии с требуемым уровнем доступа для пользователя (см. п. 11.1), установите язык интерфейса и нажмите кнопку **ОК**. Строка с информацией о новом пользователе появится в таблице на вкладке **Пользователи** в диалоговом окне ***Настройки безопасности*** (Рис. 11-4).

Чтобы при первом входе в программу пользователь, не являющийся руководителем группы, имел возможность изменить свой пароль, установите галочку **Запросить смену пароля при первом входе** в окне ***Добавить нового пользователя*** (Рис. 11-3). При первом входе данного пользователя в программу, после ввода в окне ***Авторизация*** пароля, установленного руководителем группы, появится диалоговое окно ***Изменить пароль*** (Рис. 11-5), в котором пользователь самостоятельно задает свой пароль.

Чтобы отменить добавление нового пользователя в окне ***Добавить нового пользователя*** (Рис. 11-3) нажмите кнопку **Отмена**.

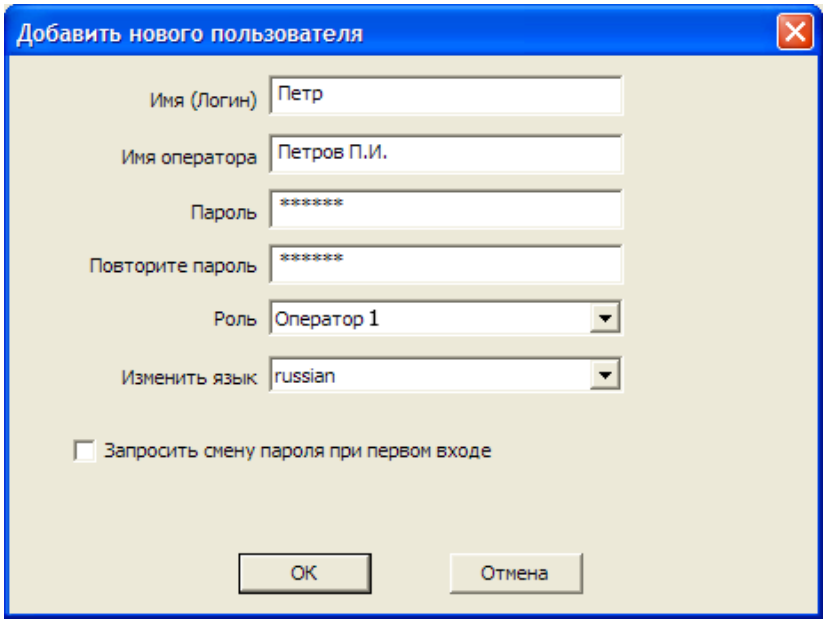


Рис. 11-3 Диалог Добавить нового пользователя

Чтобы удалить пользователя, в таблице на вкладке **Пользователи** окна ***Настройки безопасности*** (Рис. 11-2) выделите строку с данными пользователя и нажмите кнопку **Удалить**. Пользователь будет удалён из группы, и доступ в программу для него будет закрыт.

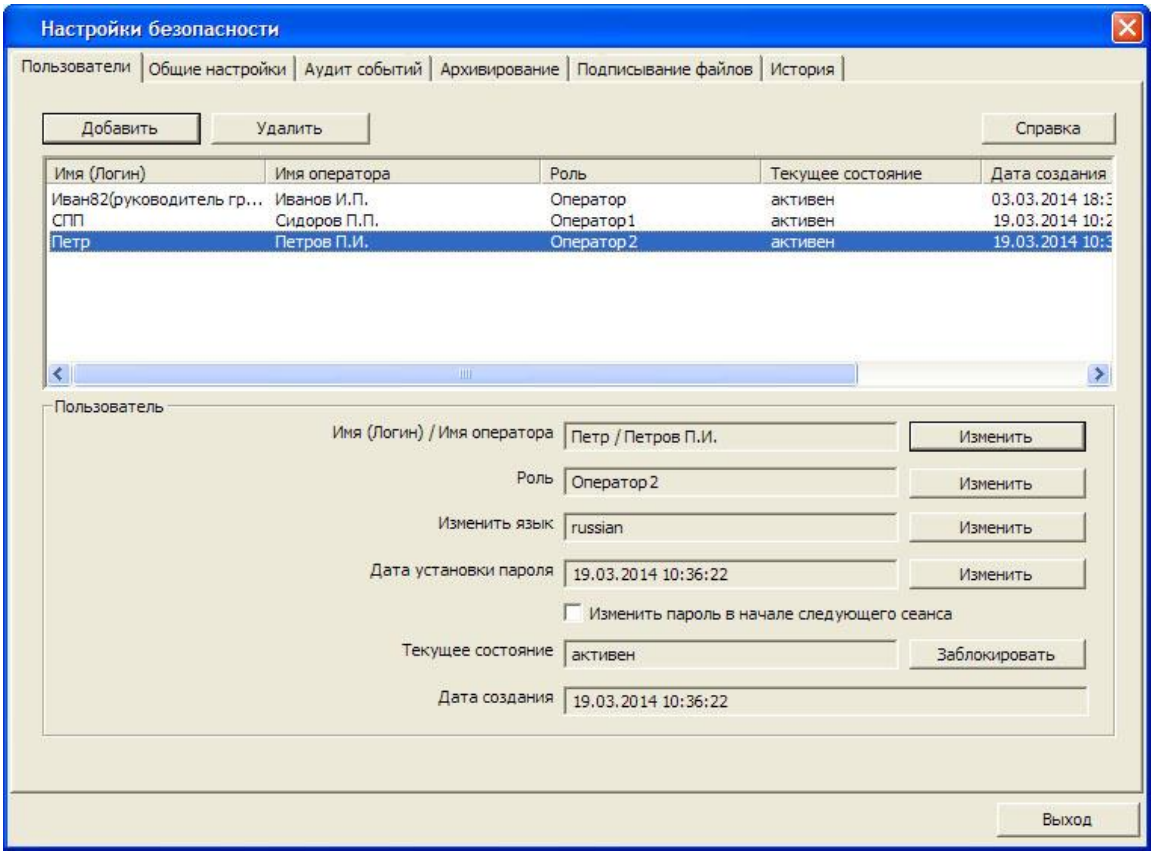


Рис. 11-4 Вкладка Пользователи окна Настройки безопасности: После добавления нового пользователя

Чтобы изменить имя пользователя, выделите строку с его именем в таблице, затем в секции **Пользователь** нажмите кнопку **Изменить**, расположенную справа от текстовой строки **Имя (Логин)/Имя оператора** (Рис. 11-2). Откроется диалоговое окно ***Изменить имя пользователя*** (Рис. 11-6).

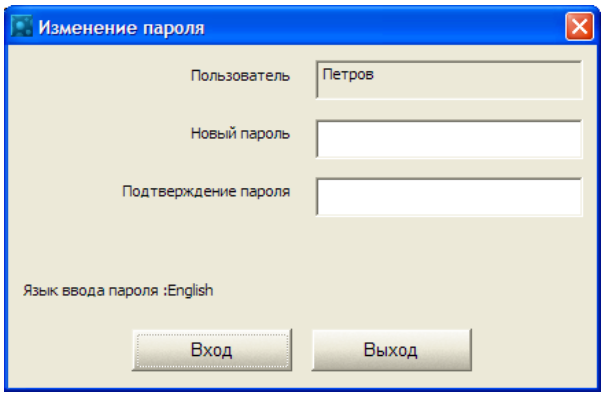


Рис. 11-5 Диалог Изменение пароля

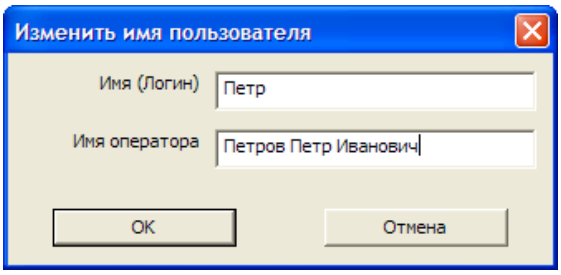


Рис. 11-6 Диалог Изменить имя пользователя

Введите новые имена в текстовые поля Имя (Логин) и Имя оператора и нажмите кнопку **ОК** в диалоговом окне ***Изменить имя пользователя*** (Рис. 11-6). Чтобы отменить изменения и вернуться на вкладку **Пользователи** окна ***Настройки безопасности*** (Рис. 11-2), нажмите кнопку **Отмена**.

Чтобы изменить уровень доступа для данного пользователя руководитель группы должен нажать кнопку **Изменить** (Рис. 11-4), расположенную справа от текстовой строки **Роль**. Откроется диалоговое окно ***Роль*** (Рис. 11-7), в котором можно выбрать уровень доступа, нажав соответствующую строку, после чего нажать кнопку **ОК**, чтобы изменения вступили в силу, или отказаться от изменений, нажав кнопку **Отмена**.

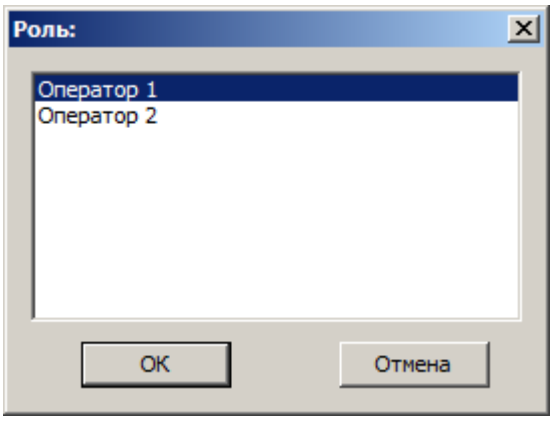


Рис. 11-7 Диалог Изменить роль пользователя

Чтобы изменить язык интерфейса программы для выбранного пользователя, нажмите кнопку **Изменить** (Рис. 11-2), расположенную справа от текстовой строки **Изменить язык**. Откроется диалоговое окно ***Изменить язык*** (Рис. 11-8), выберите язык интерфейса из списка и нажмите кнопку **ОК**. Чтобы отменить изменения и вернуться на вкладку **Пользователи** окна ***Настройки безопасности*** (Рис. 11-2), нажмите кнопку **Отмена**.

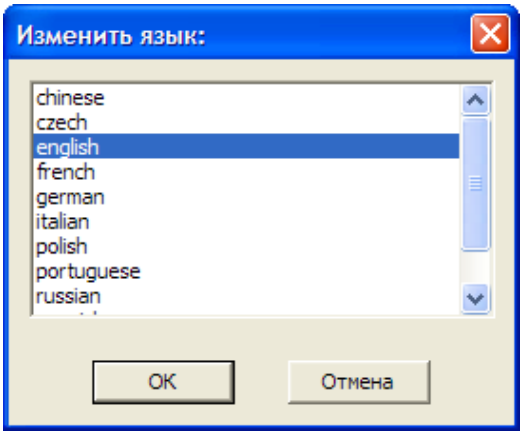


Рис. 11-8 Диалог Язык

Чтобы изменить пароль для выбранного пользователя нажмите кнопку **Изменить** (Рис. 11-2), расположенную справа от текстовой строки **Дата установки пароля.** Откроется диалоговое окно ***Изменить пароль*** (Рис. 11-5). Если для выбранного пользователя установить галочку **Изменить пароль в начале следующего сеанса** на вкладке **Пользователи** окна ***Настройки безопасности*** (Рис. 11-2), то при следующем входе данного пользователя в программу будет выдаваться диалоговое окно ***Изменить пароль*** (Рис. 11-5), в котором пользователь самостоятельно задает свой пароль.

Чтобы заблокировать выбранного пользователя нажмите кнопку **Заблокировать** (Рис. 11-2), расположенную справа от текстовой строки **Текущее состояние.** После ввода данным пользователем пароля в окне ***Авторизация*** (Рис. 2-2) выдается сообщение о блокировке пользователя (Рис. 11-9), при этом доступ в программу для него закрыт. Чтобы заблокированный пользователь мог войти в программу, его необходимо активизировать. Для этого нажмите кнопку **Активизировать**, появляющуюся для заблокированных пользователей справа от текстовой строки **Текущее состояние**.

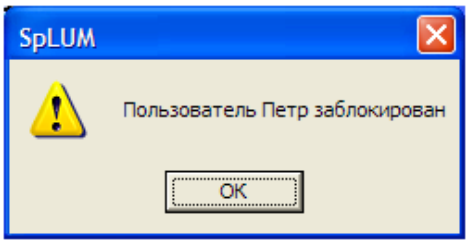


Рис. 11-9 Сообщение: Пользователь заблокирован

Дата и время, когда выбранный пользователь был добавлен в группу, отображаются в текстовом поле **Дата создания** (Рис. 11-2).

11.2.1 Настройка общих параметров модуля безопасности

Вкладка **Общие настройки** окна ***Настройки безопасности*** (Рис. 11-10) предназначена для управления параметрами безопасности, являющимися общими для всех пользователей.

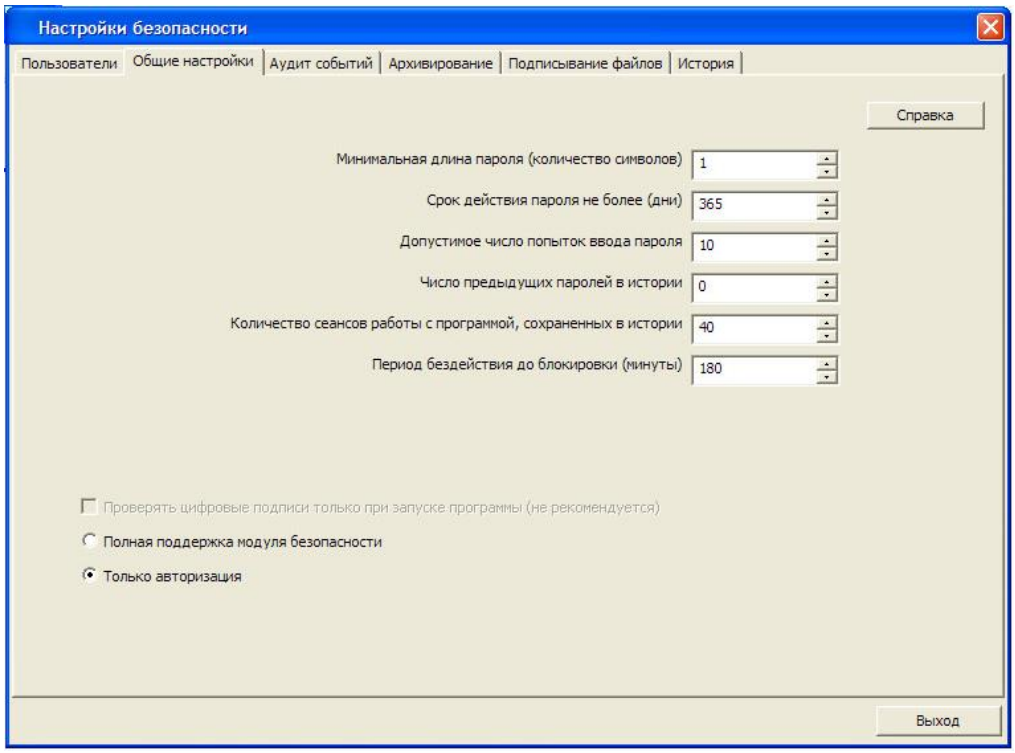


Рис. 11-10 Вкладка Общие настройки окна Настройки безопасности

В поле **Минимальная длина пароля (количество символов)** устанавливается число, меньше которого не допустима длина пароля при новых назначениях.

В поле **Срок действия пароля не более (дни)** задается значение, которое ограничивает использование пароля по времени. По истечении указанного срока с момента назначения пароля пользователь должен изменить свой пароль.

В поле **Допустимое число попыток ввода пароля** задается максимально допустимое число попыток ошибочного ввода пароля. При большем числе попыток ошибочного ввода пароля пользователь блокируется и не допускается к работе.

В поле **Число предыдущих паролей в истории** устанавливается число, которое определяет размер списка старых паролей (истории паролей). После того, как пользователь сменил свой пароль на новый, старый па-

роль заносится в список старых паролей (историю паролей) данного пользователя. Программа запрещает назначать новый пароль, совпадающий с паролем из списка старых паролей. Пользователь может установить себе свой старый пароль в том случае, если после него он пользовался паролями, общее количество которых превышает размер истории паролей.

В поле **Количество сеансов работы с программой, сохраненных в истории** устанавливается число последних записей в истории модификации файлов.

В поле **Период бездействия до блокировки (минуты)** задается время, по истечении которого при бездействии пользователя его сессия будет блокирована. Для продолжения работы пользователю потребуется ввести свой пароль в окне ***Авторизация***.

При установке галочки в текстовой строке **Проверять цифровые подписи только при запуске программы (не рекомендуется)** проверка достоверности цифровых подписей файлов, созданных в программе СпектраЛЮМ производится только при открытии программы СпектраЛЮМ. При снятии галочки, проверка достоверности цифровых подписей файлов производится каждый раз при обращении к данному файлу в программе СпектраЛЮМ.

При установке переключателя **Только авторизация**:

- Включена функция авторизации (вход в программу под индивидуальным паролем пользователя);
- Включена функция установки уровней доступа для различных операторов (сервис-инженер, руководитель группы, оператор 1, оператор 2);
- Включена функция записи всех событий в журнале аудита;
- Включена функция подписывания всех сохраняемых измерений (в столбце **Оператор**).

При установке переключателя **Полная поддержка модуля безопасности** к перечисленным выше функциям переключателя **Только авторизация** добавляются функции создания цифровой подписи файлов и автоматическая проверка на подлинность подписей.

11.2.2 Просмотр журналов аудита

Вкладка **Аудит событий** окна ***Настройки безопасности*** (Рис. 11-11) позволяет просматривать текущий и архивные журналы событий с учетом фильтрации по типу события, пользователям и временным интервалам.

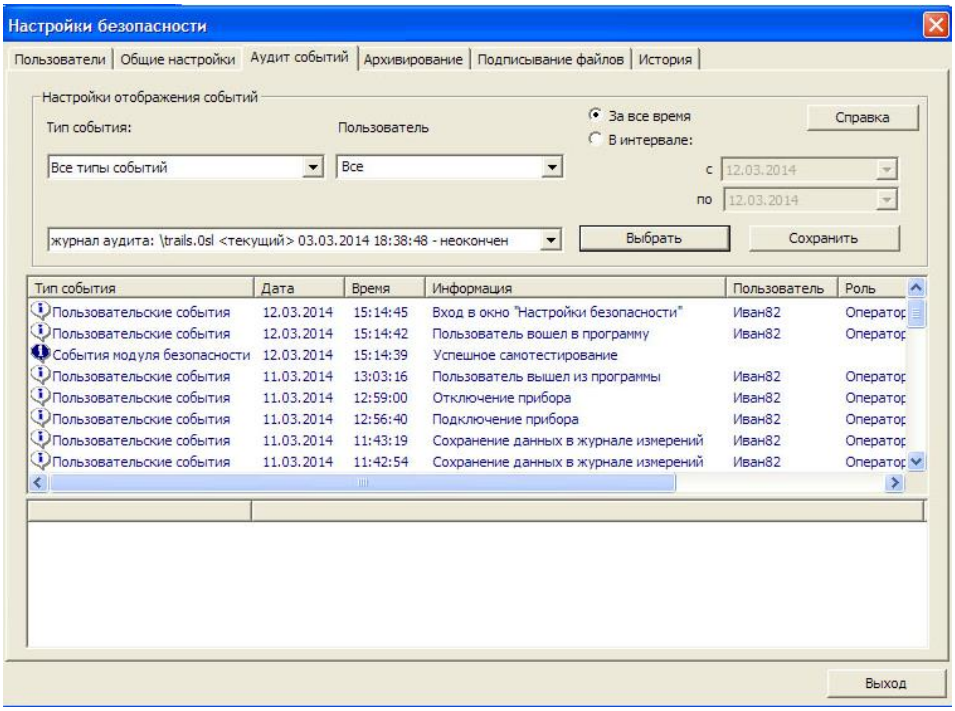


Рис. 11-11 Вкладка Аудит событий окна Настройки безопасности

На вкладке **Аудит событий** окна ***Настройки безопасности*** (Рис. 11-11) представлена таблица с перечнем событий и информацией о них (тип, дата, время, информация, пользователь, роль, компьютер). В нижней секции отображается подробная информация по выделенному в таблице событию.

Чтобы выбрать события из журнала:

1. В секции **Настройки отображения событий** из выпадающего списка архивных журналов выберите интересуемый журнал.
2. Из выпадающего списка **Тип событий** выберите интересуемый тип событий.
3. Из выпадающего списка **Пользователь** выберите интересуемого пользователя.

4. Выберите период времени, за который необходимо отображать события. По умолчанию установлен переключатель **За все время**. Чтобы выбрать другой временной интервал, установите переключатель **В интервале** и задайте начальную и конечную даты интервала в полях **с** и **по** соответственно.

5. Нажмите кнопку **Выбрать.**

Для того, чтобы сохранить отображаемую в таблице информацию журнала аудита в формате .txt или .html, нажмите кнопку **Сохранить**. Откроется стандартное диалоговое окно ***Сохранить как***. Из выпадающего списка **Тип файлов** выберите формат файла (.txt или .html), в поле **Имя файла** задайте имя файла, в секции **Папки** выберите место на компьютере, где будет сохранен файл (по кнопке **Сеть** возможно сохранить файл в сетевую папку), нажмите кнопку **ОК**. Чтобы отменить сохранение файла и вернуться на вкладку **Аудит событий** окна ***Настройки безопасности*** (Рис. 11-11), нажмите кнопку **Отмена**.

11.2.3 Управление архивированием журналов аудита

На вкладке **Архивирование** окна ***Настройки безопасности*** (Рис. 11-12) возможно задавать условия, при которых текущий журнал аудита событий сохраняется в архив: при достижении заданного размера или периодически по истечении заданного срока.

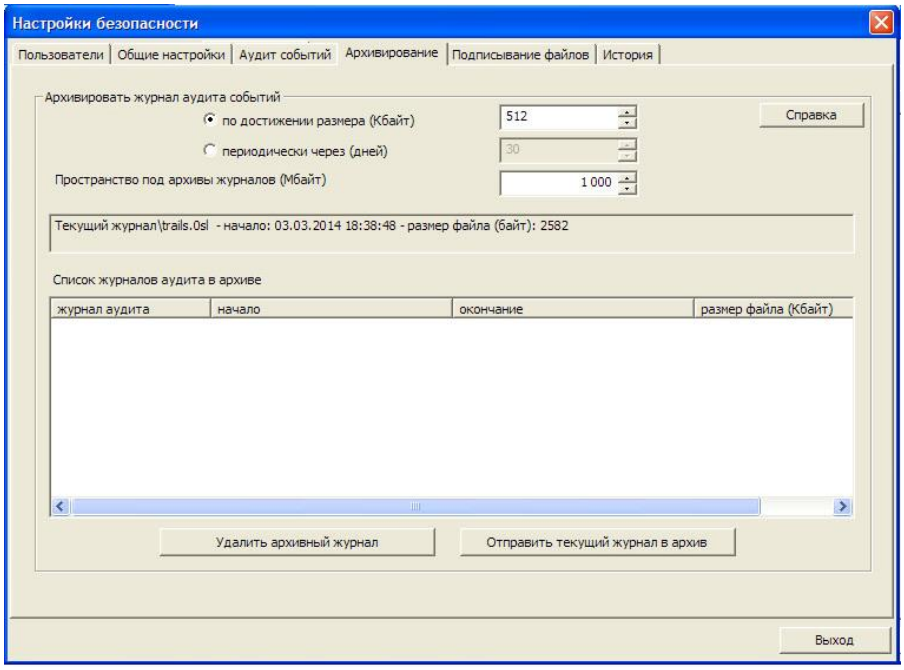


Рис. 11-12 Вкладка Архивирование окна Настройки безопасности

Чтобы текущий журнал помещался в архив автоматически:

- По достижении заданного размера:

  1. Установите переключатель **По достижении размера (Кбайт).**

  2. В поле со счетчиком укажите предельный размер журнала. По достижении указанного размера, журнал автоматически будет помещён в архив.

- Периодически:

  1. Установите переключатель **Периодически через (дней).**

  2. В поле со счетчиком задайте количество дней. По истечению установленного срока, журнал автоматически будет помещён в архив.

В поле **Пространство под архивы журналов (Мбайт)** установите размер архива (папки, в которую сохраняются все архивные журналы). Если объём архива с журналами превысит указанное значение, программа автоматически удаляет архивные журналы, начиная с самого раннего.

Для того, чтобы отправить текущий журнал в архив вручную нажмите кнопку **Отправить текущий журнал в архив**. При этом в таблице **Список журналов аудита в архиве** появится строка с названием журнала аудита, датами его начала и окончания, а также размером файла.

Для того, чтобы удалить журнал из архива, выделите его в таблице **Список журналов аудита в архиве** и нажмите кнопку **Удалить архивный журнал**.

11.2.4 Цифровое подписывание файлов

Данная функция необходима при работе программы в режиме полной поддержки безопасности (на вкладке **Общие настройки** окна ***Настройки безопасности*** (Рис. 11-10) установлен переключатель **Полная поддержка модуля безопасности**).
При работе в режиме полной поддержки безопасности, созданные в программе СпектраЛЮМ файлы автоматически, подписываются.
Если, в программе СпектраЛЮМ (в режиме полной поддержки безопасности), необходимо проводить работу с архивами данных, полученных с помощью программы СпектраЛЮМ, проинсталлированной на другом компьютере, либо полученных с помощью программы СпектраЛЮМ, ра-

ботающей без полной поддержки модуля безопасности, необходимо подписать их электронной подписью. Для этой задачи служит вкладка **Подписывание файлов** окна ***Настройки безопасности*** (Рис. 11-13), которая позволяет подписывать в пакетном режиме требуемые файлы.

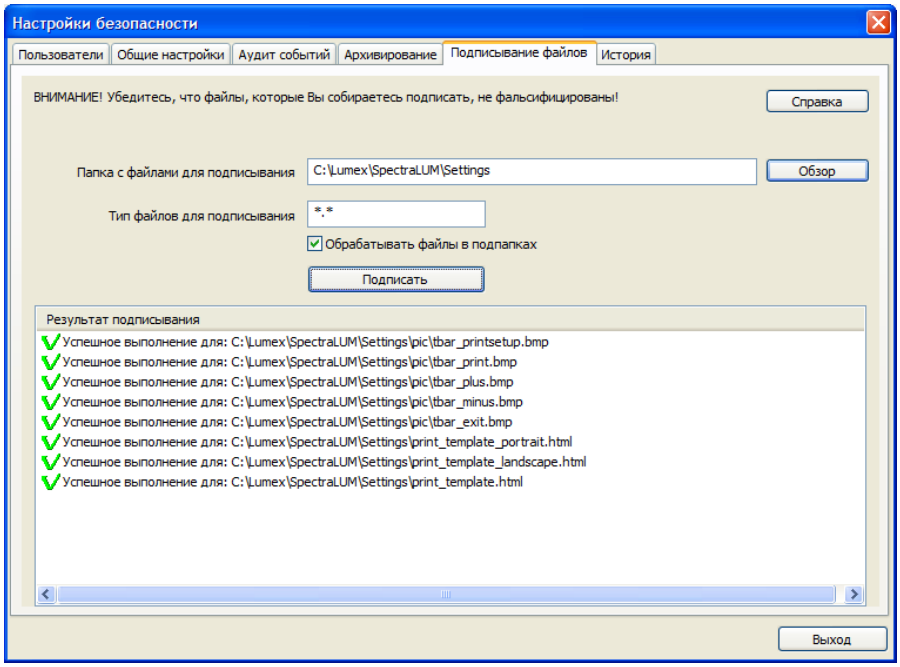


Рис. 11-13 Вкладка Подписывание документов окна Настройки безопасности

Для подписывания файлов сделайте следующее:

1. В поле **Папка с файлами для подписывания** задайте путь к папке с файлами, которые необходимо подписать (по кнопке **Обзор)**.

2. Выберите тип файлов и установите галочку для обработки файлов в поддиректориях (если требуется).

3. Нажмите кнопку **Подписать.**

В таблице **Результат подписывания** отображаются данные об успешном/неуспешном подписывании файлов. По окончании процедуры подписывания появится сообщение о том, сколько файлов обработано и сколько возникло ошибок при обработке.

11.2.5 Просмотр истории подписывания файлов

Вкладка **История** окна ***Настройки безопасности*** (Рис. 11-14) позволяет посмотреть историю подписывания файлов (см. п.11.2.4) при условии работы в режиме полной поддержки модуля безопасности (на вкладке **Общие настройки** окна ***Настройки безопасности*** (Рис. 11-10) установлен переключатель **Полная поддержка модуля безопасности**). На вкладке **История** расположена таблица со столбцами **Имя (Логин)**, **Роль**, **Дата и Время**. Каждой строке в таблице соответствует подписывание файла при его создании или модификации, осуществляемое при работе в программе СпектраЛЮМ оператора, указанного в столбце **Имя (Логин)**.

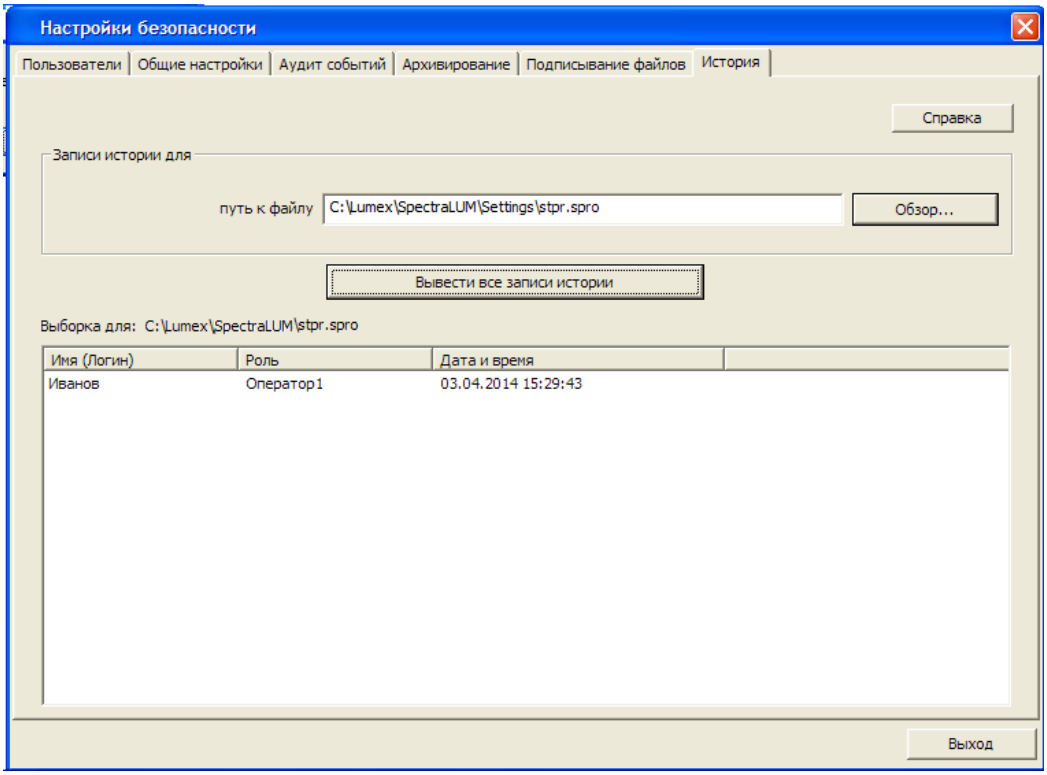


Рис. 11-14 Вкладка История окна Настройки безопасности

Чтобы посмотреть историю модификации файла:

1. Нажмите кнопку **Обзор**. Откроется стандартное окно, в котором необходимо выбрать интересующий файл и нажать кнопку **Открыть**. В поле **Путь к файлу** отобразится путь к выбранному файлу.

2. Нажмите кнопку **Вывести все записи истории**.

12 Установка программного обеспечения

Для первичной установки программного обеспечения сделайте следующее:

1. включите персональный компьютер;
2. запустите файл SpectraLUM_Installer.exe, предназначенный для инсталляции программного обеспечения;
3. откроется окно мастера **Installshield Wizard**. Нажмите кнопку **Далее**.
4. в открывшемся окне **Лицензионное соглашение** необходимо ознакомиться с текстом лицензионного соглашения и принять условия, выбрав пункт **Я принимаю условия лицензионного соглашения**, затем нажать кнопку **Далее**.
5. в открывшемся окне **Сведения о пользователе** необходимо ввести следующие сведения: имя пользователя, название организации, затем выбрать вариант установки приложения и нажать кнопку **Далее**;
6. в следующем окне **Выбор установки** выберите вид установки. Предлагаются следующие варианты:
   - **Обычная** - устанавливаются все компоненты программы, документация по работе с программой и прибором;
   - **Выборочная** - рассчитана на опытных пользователей. В данном варианте предлагается самостоятельно выбрать набор устанавливаемых компонентов.

   Рекомендуется выбрать вид установки **Обычная**. После выбора нажмите кнопку **Далее**;
7. в открывшемся окне укажите папку, в которую будут установлены файлы программы СпектраЛЮМ (путь по умолчанию C:\Lumex\SpectraLUM). Для этого нажмите кнопку **Обзор**, выберите нужную папку и нажмите кнопку **Далее**;
8. в следующем окне **Добавление новой пользовательской группы** введите название группы и сведения о ее руководителе: имя (логин) (будет отображаться в окне ***Авторизация***), имя оператора 1 и оператора 2 (будет

отображаться в столбце **Оператор** во всех типах журналов), пароль, а также выберите пользовательский язык программы. Если необходимо сменить пароль при первом входе пользователя в программу, установите галочку **Потребовать смены пароля в начале первой работы с приложением**.



Руководитель группы – это пользователь, который может в программе СпектраЛЮМ создавать новых пользователей внутри своей группы и управлять их учетными записями, а также настраивать систему безопасности в зависимости от политики предприятия.



Пользователь, не обладающий правами руководителя группы, имеет доступ к тем же функциям программы, что и руководитель группы, за исключением функций создания новых пользователей и настроек системы безопасности.

Нажмите кнопку **Далее**.

9. в следующем окне ***Выберите вариант для продолжения работы*** предоставляются следующие возможности:

- Выбор переключателя **Продолжить процесс инсталляции** позволяет продолжить процедуру установки.
- Выбор переключателя **Добавить группу** позволяет создать новую группу и ввести сведения об ее руководителе (имя, полное имя, пользовательский язык, пароль).
- Выбор переключателя **Добавить пользователя** позволяет создать нового пользователя внутри какой-либо из существующих групп и ввести информацию о данном пользователе (имя, полное имя, пользовательский язык, пароль).

Выбрав нужный переключатель, нажмите кнопку **Далее.**

10. в открывшемся окне нажмите **Установить**;
11. после выбора продолжения процесса инсталляции откроется диалоговое окно ***Проверьте информацию об установке***. Удостоверьтесь, что введена корректная информация, и нажмите кнопку **Далее**;

12. после того, как программа установки СпектраЛЮМ выполнит требуемые операции, в следующем окне нажмите кнопку **Готово;**

13. скопируйте папку SST с электронного носителя в папку SpectraLUM (путь по умолчанию C:\Lumex\SpectraLUM).

Для обновления установленной версии программного обеспечения СпектраЛЮМ сделайте следующее:

1 запустите файл SpectraLUM_Installer.exe, предназначенный для инсталляции программного обеспечения;

2 в открывшемся окне программы **Installshield Wizard** выберите вариант для продолжения работы:

- переключатель **Установить** предназначен для первичной установки программы;
- переключатель **Исправить** предназначен для обновления программы СпектраЛЮМ. При обновлении все данные архивов сохраняются;
- переключатель **Удалить** предназначен для удаления программы с сохранением данных архивов;

3 нажмите кнопку **Готово**.

Для установки драйвера спектрометра необходимо сделать следующее:

1 Подключите интерфейсный (USB) и кабель питания к прибору.

2 Включите прибор, следуя указаниям соответствующего Руководства по эксплуатации.

3 Запустите **Диспетчер устройств** и найдите новое устройство **InfraLUM FT-08**.

4 Щелкните по **InfraLUM FT-08** правой кнопкой мыши, нажмите **Свойства**, чтобы открыть окно **Свойства: InfraLUM FT-08** нового устройства.

5 Перейдите на вкладку **Драйвер**. Нажмите кнопку **Обновить драйвер**, откроется окно **Обновить драйверы – InfraLUM FT-08.**

6 В окне **Обновить драйверы – InfraLUM FT-08** выберите пункт **Выполнить поиск драйверов на этом компьютере**.

7 С помощью кнопки **Обзор** укажите путь к папке **Drivers** в директории программы СпектраЛЮМ (путь по умолчанию C:\Lumex\SpectraLUM\Drivers).

8 Нажмите кнопку **Далее** и дождитесь завершения установки.

13 Идентификация программного обеспечения

Программа СпектраЛЮМ позволяет выполнять идентификацию программного обеспечения для проверки соответствия контрольной суммы его метрологически значимой части. Для этого нужно воспользоваться пунктом меню **Справка/Идентификация ПО** в главном окне программы**.** При этом откроется диалоговое окно ***Идентификация ПО*** (Рис. 13-1), в котором содержатся следующие сведения: версия программного обеспечения, название файла, содержащего метрологически значимую часть, контрольная сумма этого файла и алгоритм для вычисления контрольной суммы. Кнопка **ОК** возвращает в главное окно программы.

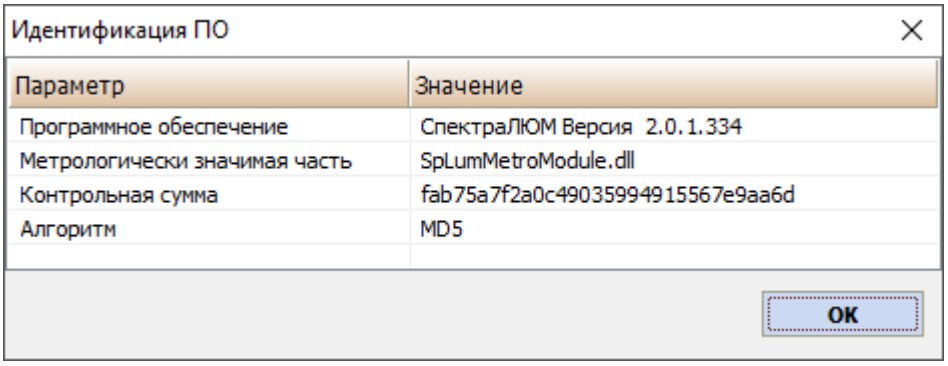


Рис. 13-1 Диалоговое окно «Идентификация ПО»

Встроенное программное обеспечение контроллера спектрометра осуществляет управление спектрометром, сбор данных от него и передачу их в автономное ПО «СпектраЛюм». Запись встроенного ПО осуществляется на предприятии-изготовителе с использованием программно-аппаратного комплекса, который не входит в состав комплекта поставки и не может быть приобретен отдельно. Доступ к программной части комплекса ограничен паролем предприятия изготовителя, который не сообщается дилерам и конечным пользователям. При записи ПО в условиях предприятия-изготовителя генерируются особые метки, которые устанавливают однозначную принадлежность записанного ПО данному экземпляру прибора. Поэтому несанкционированная замена чипа или запись произвольного (в том числе отредактированного) встроенного ПО приведет к неработоспособности спектрометра.

Встроенное ПО не обнаруживается средствами операционной системы пользовательского компьютера и поэтому не может быть изменено или удалено пользователем. Необходимость повторной записи встроенного

ПО прибора определяет сервисная служба изготовителя при возникновении неполадок спектрометра. Любая попытка несанкционированного доступа к встроенному ПО является основанием для отказа в гарантийном ремонте спектрометра.

14 Обновление версий программного обеспечения

Предприятие-изготовитель предлагает всем операторам спектрометра периодическое обновление версий программного обеспечения (без изменения его метрологической части).

Получить файл обновления программы СпектраЛЮМ можно путем запроса на веб-сайте по адресу: https://lmm-soft.ru/ или по электронной почте по адресу info@lmm-soft.ru.