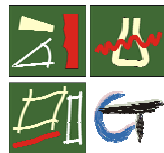


CCE v1.0

Comparación Cualitativa de Espectros (versión 1.0)

Manual de uso



DACITEC

Desarrollo y Aplicaciones Científicas y Tecnológicas S.L.

Plaza Pedro Iturralde nº 12 – 1

46900 Torrente (Valencia)

Teléfono: 655179800

e-mail: info@dacitec.com

Septiembre 2005

Índice

1. Introducción	2
2. Comparación Cualitativa de Elementos	
2.1. Instalación	3
2.2. Ejecución	3
2.2.1. Añadir Ficheros	4
2.2.2. Manipulación de los datos	5
2.2.3. Análisis de lo datos	6



1. Introducción

La aplicación *CCE v1.0* (Comparación Cualitativa de Elementos versión 1.0) es una herramienta que permite el estudio sistemático de un gran número de datos obtenidos del tratamiento de los espectros de espectroscopía de fluorescencia de rayos X sin toma de muestra con el programa WinQxas.

El proceso de cálculo empleado para el análisis de este tipo de objetos se basa en la experiencia adquirida durante años en la aplicación de la espectroscopía de fluorescencia de rayos X sin toma de muestra en el campo del Patrimonio Histórico-Artístico.

Esta aplicación se caracteriza por los siguientes puntos que lo hacen específico para el estudio de Bienes de Interés Cultural:

- Permite establecer un criterio variable a partir de los datos obtenidos, mediante el cual se considera la presencia de elementos en el material.
- Permite realizar relaciones entre elementos presentes en el material.
- Realiza la substracción de los elementos presentes en el soporte de los elementos que constituyen el material sustentado.
- Permite establecer un criterio variable de presencia de elementos en los materiales sustentados.

2. Comparación Cualitativa de Elementos

2.1. Instalación

La instalación del programa es sencilla. Tan sólo hay que copiar la carpeta CCE del cd-rom al directorio c: del ordenador.

2.2. Ejecución

Para ejecutar el programa se realiza doble clic sobre el icono CCE de la aplicación. Al ejecutar el programa aparece la ventana que constituye el espacio de trabajo (figura 1)

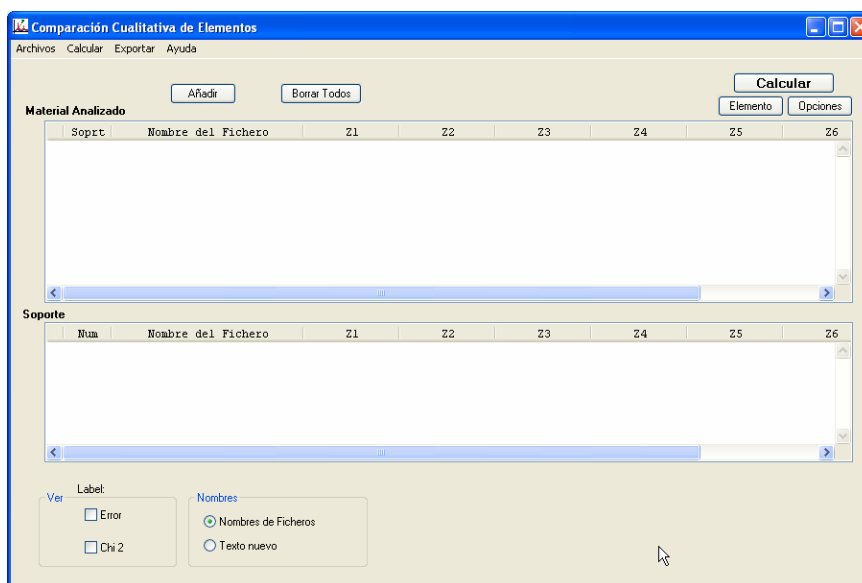


Figura 1: Imagen del área de trabajo

La ventana está compuesta de:

- Menús que permiten ejecutar las acciones del programa
- Botones de acción:
 - *Añadir*: permite cargar ficheros
 - *Borrar todos*: elimina los datos cargados
 - *Calcular*: realiza los cálculos que permiten determinar la presencia de elementos químicos en el material sustentado y en el soporte
 - *Elemento*: permite escoger el elemento para hacer la normalización
 - *Opciones*: varía los criterios de existencia de elementos en el material analizado y en el soporte.
- Una subventana denominada *Material Analizado* en el que aparecerán los datos de los espectros de espectroscopía de fluorescencia del objeto.
- Una subventana denominada *Soporte* en el que aparecerán los datos de los espectros de espectroscopía de fluorescencia del soporte o soportes del objeto.

2.2.1. Añadir ficheros

Para añadir los ficheros generados con el programa WinQxas procedentes del análisis de los espectros de espectroscopía de fluorescencia de rayos X sin toma de muestra se deben realizar los siguientes pasos:

1. pinchar en **Añadir**. Se abrirá la ventana (figura 2) en la que se puede navegar por los diferentes directorios del ordenador. Los ficheros que se generan con WinQxas tienen la extensión .asr o .txt que se puede escoger pinchando la opción **Filtro**.

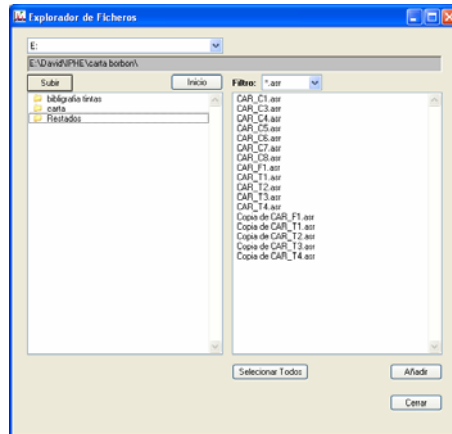


Figura 2: Explorador de Ficheros

2. Seleccionar los ficheros. Los ficheros pueden seleccionarse de una vez pinchando **Seleccionar Todos** y a continuación **Añadir** y **Cerrar**, o bien se pueden ir seleccionando uno a uno mediante Control+botón izdo del ratón. Una vez seleccionados se pincha **Añadir** y **Cerrar**.

Los datos se incorporan al área de trabajo tal y como aparece en la figura 3. Hay que tener presente que para realizar el análisis, los elementos incluidos en cada uno de los ficheros .asr o .txt deben ser los mismos, de lo contrario aparecerá un mensaje advirtiéndolo de que ficheros no se podrán procesar.

Soprt	Nombre del Fichero	15	16	17	19	20	25	26	27	29	30	33	46	80	
1	0	1107_e1.asr	45	317	87	936	11327	119	633	112	981	171	338	416	40
2	0	1107_e10.asr	53	312	442	907	21762	183	1562	209	26076	338	813	1063	28
3	0	1107_e11.asr	16	339	390	671	16588	180	1328	42	24748	392	499	1070	26
4	0	1107_e12.asr	165	838	476	2887	31967	218	2355	230	4566	628	788	1394	32
5	0	1107_e3.asr	180	1215	649	3217	35007	200	1995	175	7201	315	745	964	500
6	0	1107_e3.asr	141	781	875	2693	31816	174	1642	102	27382	318	633	1166	43
7	0	1107_e4.asr	194	295	559	1450	44289	186	3077	154	36864	619	909	1356	85

Num	Nombre del Fichero	15	16	17	19	20	25	26	27	29	30	33	46	80	
0	0	1107_e.asr	243	629	413	1398	40301	250	1572	341	526	286	875	1206	103

Figura 3: Área de trabajo en el que aparecen la distribución de los datos cargados

Los datos se distribuyen en filas en cada uno de las subventanas. La columna **Soprt** de la subventana **Material Analizado** indica el número del espectro soporte a la que está asociado a ese fichero. La columna **Nombre del Fichero** muestra la identificación del fichero. Este identificador puede ser modificado realizado los siguientes pasos:

1. Se escoge **Texto nuevo** del recuadro **Nombres**
2. Se pincha dos veces sobre el nombre de fichero que se quiera cambiar o comentar. Aparece una ventana en el que podemos introducir el texto.

Las siguientes columnas vienen etiquetadas con el número atómico de los elementos empleados en el análisis con el programa WinQxas. En cada columna aparece el área neta del pico asociado a ese elemento en el espectro de fluorescencia. Seleccionando **Error** del recuadro **Ver** aparecen los errores de cada una de las áreas. De igual modo si se selecciona **Chi 2** aparece el valor χ^2 del ajuste.

2.2.2. Manipulación de los datos

Existe un método de autoclasificación para los datos del material analizado y del material soporte basado en un criterio de nombre de los ficheros:

- Los ficheros del soporte deben tener una nomenclatura que incluya una serie de números y una *f* al final (de fondo), por ejemplo: 1234f1.asr
- Los ficheros del material deben poseer una nomenclatura que incluya una serie de números y una letra distinta de la *f*, por ejemplo: 1234t1.asr, 1234t2.asr

El programa clasificará cada espectro de material con su soporte asociado en función del código numérico.

En caso de que la autoclasificación no pudiera llevarse a cabo o no fuera correcta, la asignación de los datos del material sustentante y del soporte se puede llevar a cabo manualmente.

Pasar un archivo de **Material Analizado** a **Soporte** y viceversa:

1. Seleccionar la fila del fichero que se quiera trasladar pinchando una vez sobre el con el ratón.
2. Pinchar y arrastrar la fila a la ventana del soporte.

De igual forma se puede pasar un fichero de soporte a material analizado.

El soporte asociado a cada unos de los materiales analizados puede cambiarse manualmente. Para ello se debe realizar lo siguiente:

1. Pinchar dos veces con el ratón en la celda que indica el soporte asociado. Se abrirá la ventana de la figura 4

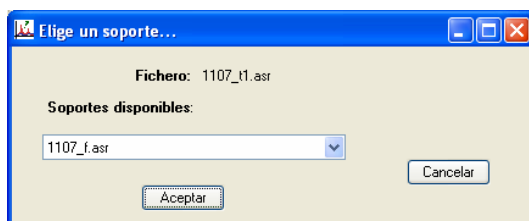


Figura 4: Modificación del soporte asociado a un fichero

2. Escoger del desplegable **Soportes disponibles** el fichero soporte asociado. En el desplegable aparecen los ficheros que se encuentren en la subventana **Soportes**

2.2.3. Análisis de los datos

Para realizar el análisis de los datos se ha de establecer *el elemento químico de normalización, el criterio de pico inicial y el parámetro de tolerancia*.

- El *elemento químico* se selecciona pinchando sobre el botón **Elemento** y seleccionar el número atómico en el desplegado (figura 5)

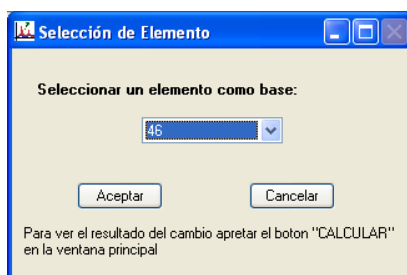


Figura 5: Ventana de selección de elemento para normalización

- El *criterio de pico inicial* y el *parámetro de tolerancia* se seleccionan pinchando sobre el botón **Opciones** (figura 6)

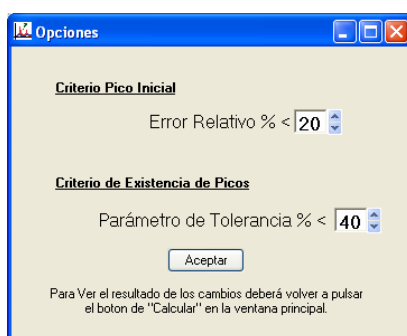


Figura 6: Ventana de selección de elemento para el criterio de pico inicial y el parámetro de tolerancia

El **Criterio de Pico Inicial** establece el error relativo del ajuste gaussiano de los picos asociados a los elementos químicos del espectro de fluorescencia de rayos X por encima del cual se descarta ese elemento.

El **Parámetro de Tolerancia** establece un criterio para la presencia de elementos químicos en el material analizado una vez sustraído la componente del soporte.

Una vez fijados los criterios se pincha sobre el botón **Calcular**.

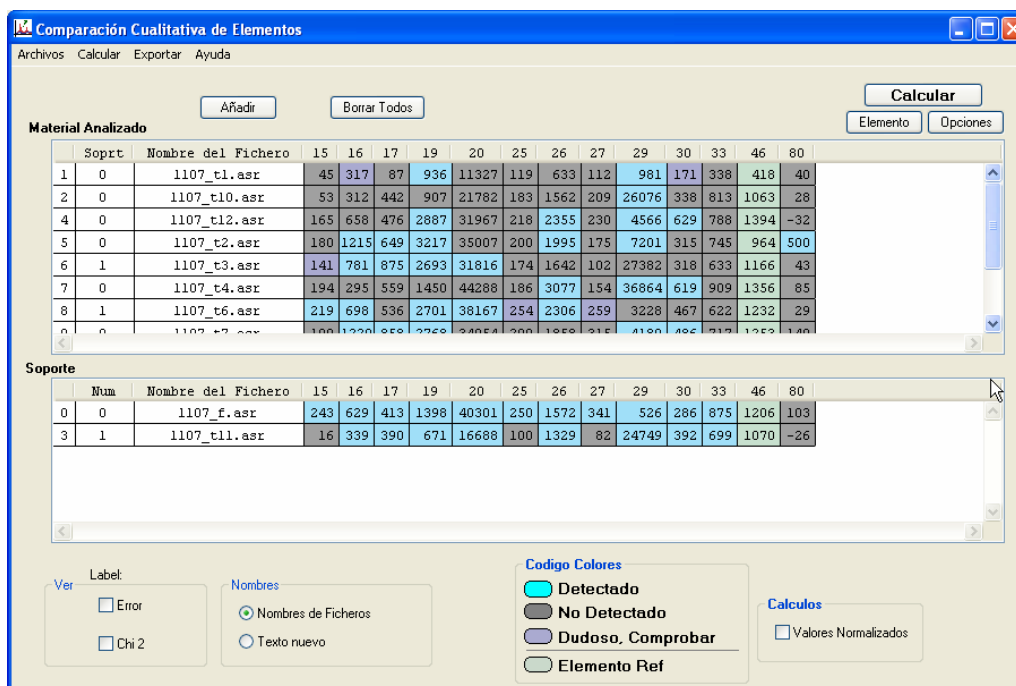


Figura 7: Resultado después de aplicar el cálculo

El resultado aparece con un código de colores sobre las tablas de materiales analizados y del soporte (figura 7). El código de colores indica los elementos detectados, no detectados y dudosos en para cada uno de los ficheros. Los elementos clasificados dudosos son aquellos que se aproximan mucho al nivel de tolerancia.

Pinchando sobre **Valores Normalizados** dentro del recuadro **Cálculos** aparecen los valores de las áreas normalizadas al elemento escogido. Esto se puede completar pinchando en **Error** dentro del recuadro **Ver**.

El resultado se puede exportar a un fichero de texto seleccionado **Exportar -> a Texto** de la barra de menú. El fichero texto posee un formato que puede ser importado por otros programas como la hoja de cálculo Excel.

Se pueden variar el criterio de pico inicial, de tolerancia y el elemento de normalización. Para que la variación se vea reflejada en el resultado, debe pincharse de nuevo sobre **Calcular**.