

Bedienungsanleitung

ASpect PQ

Software für ICP-OES



Hersteller Analytik Jena GmbH+Co. KG
Konrad-Zuse-Straße 1
07745 Jena / Deutschland
Telefon: +49 3641 77 70
Fax: +49 3641 77 9279
E-Mail: info@analytik-jena.com

Technischer Service Analytik Jena GmbH+Co. KG
Konrad-Zuse-Straße 1
07745 Jena / Deutschland
Telefon: +49 3641 77 7407
Fax: +49 3641 77 9279
E-Mail: service@analytik-jena.com



Für einen ordnungsgemäßen und sicheren Gebrauch diesen Anleitungen folgen. Für späteres Nachschlagen aufbewahren.

Allgemeine Informationen <http://www.analytik-jena.com>

Dokumentationsnummer 13-5850-013-23

Ausgabe C (04/2025)

Technische Dokumentation Analytik Jena GmbH+Co. KG

© Copyright 2025, Analytik Jena GmbH+Co. KG

Inhaltsverzeichnis

1	Software ASpect PQ.....	7
1.1	Hinweise zum Datenschutz	7
1.2	ASpect PQ starten	7
1.2.1	Fenster Quickstart.....	8
1.2.2	Mit Worksheet starten	9
1.2.3	Ohne Worksheet starten	10
1.2.4	ASpect PQ in zweiter Instanz öffnen	11
1.2.5	ASpect PQ sperren	11
1.3	ASpect PQ beenden	11
1.4	Allgemeine Bedienhinweise.....	12
1.4.1	Die Arbeitsoberfläche	12
1.4.2	Hilfe verwenden.....	13
1.4.3	Übersicht über Menüleiste, Werkzeugleiste und Symbolleiste	13
1.4.4	Häufig verwendete Bedienelemente	15
2	Worksheets	18
2.1	Worksheet neu erstellen	19
2.2	Worksheet editieren	21
2.3	Worksheet laden	21
2.4	Worksheet löschen	21
3	Methoden	22
3.1	Methoden erstellen, speichern und laden	22
3.1.1	Neue Methode erstellen.....	22
3.1.2	Methode speichern.....	23
3.1.3	Methode laden	24
3.2	Methodenparameter spezifizieren	25
3.2.1	Analysenlinien spezifizieren (Fenster Methode Linien)	26
3.2.2	Parameter für Plasma und Transferoptik einstellen (Fenster Methode Plasma)	32
3.2.3	Probenzufuhr spezifizieren (Fenster Methode Probenzufuhr)	34
3.2.4	Peaks auswerten (Fenster Methode Auswertung).....	36
3.2.5	Kalibrierparameter eingeben (Fenster Methode Kalibrierung).....	40
3.2.6	Statistische Auswertungen spezifizieren (Fenster Methode Statistik)	45
3.2.7	Qualitätskontrolle spezifizieren (Fenster Methode QCS)	47
3.2.8	Qualitätskontrolle spezifizieren (Fenster Methode QCC)	51
3.2.9	Ausgabeformate für Ergebnisse spezifizieren (Fenster Methode Ausgabe)	53
4	Sequenzen	54
4.1	Sequenzen erstellen, speichern, öffnen	54
4.1.1	Neue Sequenz erstellen.....	54
4.1.2	Sequenz speichern	54
4.1.3	Sequenz laden.....	56
4.2	Fenster Sequenz	56
4.3	Messungen und Aktionen in einer Sequenz spezifizieren.....	58
4.4	Elemente/Linien für eine Probenanalyse/Aktion auswählen.....	60
5	Probeninformationsdaten (Proben-ID)	62
5.1	Probeninformationsdaten erstellen, speichern und öffnen	62

5.2	Fenster Proben-ID Probeninformation	62
5.3	Probeninformationen spezifizieren	64
6	Analysen durchführen und Ergebnisse berechnen	66
6.1	Übersicht der Menübefehle und Schaltflächen zum Starten der Analysen im Hauptfenster.....	66
6.2	Spektrometer einschalten und Plasma zünden	66
6.3	Plasma löschen und Spektrometer ausschalten	68
6.4	Messroutine starten	69
6.5	Anzeige und Speicherung der Ergebnisse während des Analysenlaufs.....	70
6.6	Analysenablauf unterbrechen und fortsetzen.....	71
6.7	Aktionen der Sequenz wiederholen.....	72
6.8	Analysenergebnisse Neuberechnen	72
6.9	Messungen parallel zur laufenden Analyse auswerten (Offline-Modus)	75
6.10	Anzeige der Ergebnisse und des Analysenfortschritts im Hauptfenster	76
6.10.1	Karte Sequenz/Ergebnisse	76
6.10.2	Karte Sequenz	76
6.10.3	Karte Ergebnisse	77
6.10.4	Karte Übersicht	80
6.11	Probeneinzelwerte anzeigen und bearbeiten	81
6.12	Intensitätsspektren anzeigen und bearbeiten	83
6.12.1	Spektren anzeigen – Fenster Spektren bearbeiten / Ansicht	83
6.12.2	Peak auswerten und Untergrundkorrektur bestimmen – Fenster Spektren bearbeiten Auswertung.....	87
6.12.3	Spektrale Störungen beseitigen – Fenster Spektren bearbeiten Spektrale Korrekturen.....	89
6.13	Übersichtsspektrum aufnehmen.....	92
7	Kalibrierung	94
7.1	Darstellung der Kalibrierkurve	95
7.2	Kalibrierergebnisse anzeigen	96
7.2.1	Kalibrierung – Karte Tabelle	96
7.2.2	Kalibrierung – Karte Residuen	97
7.2.3	Kalibrierung – Karte NWG/ BG	97
7.2.4	Kalibrierung – Karte NWG/ BG	98
7.3	Kalibrierkurve bearbeiten.....	99
8	Qualitätskontrolle.....	100
8.1	Parameter der QC-Karten.....	100
8.2	Einträge und Grenzen der QC-Karten.....	101
8.3	QC-Karten anzeigen	102
9	Gerät und Zubehör steuern und kontrollieren	104
9.1	Spektrometer	104
9.1.1	Spektrometerparameter einstellen und Funktionen testen	104
9.1.2	Diagnose von Geräteparametern.....	106
9.1.3	Kontinuierliche Peakmessung ausführen.....	106
9.1.4	Signalverlauf aufzeichnen	107
9.2	Plasma	108
9.2.1	Plasma zünden und Plasmabedingungen einstellen.....	108
9.2.2	Probenzufuhr der Pumpe kontrollieren	111
9.2.3	Justierung und Optimierung des Plasmas	111

9.3	Probengeber	114
9.3.1	Angeschlossenen Probengeber anzeigen.....	115
9.3.2	Probengeber-Rack konfigurieren.....	115
9.3.3	Technische Parameter des Probengebers.....	116
9.3.4	Probengeberfunktionen testen.....	117
9.3.5	Probenpositionen auf dem Probengeber anzeigen	118
9.3.6	Verdünnungsfunktion.....	119
9.4	Umlaufkühler	120
10	Datenmanagement.....	121
10.1	Druckfunktionen in ASpect PQ.....	121
10.1.1	Analysenergebnisse drucken.....	121
10.1.2	Weitere Analysenparameter und Einstellungen drucken.....	124
10.1.3	Protokollvorlagen	125
10.2	Datenverwaltung für alle Datentypen in ASpect PQ.....	127
10.2.1	Methoden und Sequenzen verwalten	127
10.2.2	Ergebnisdateien verwalten	129
10.2.3	Linien-/Wellenlängendateien exportieren	131
10.2.4	Korrekturmodelle verwalten	131
10.2.5	Korrekturspektren löschen.....	132
10.2.6	Protokollvorlagen importieren.....	132
10.2.7	Linienfavoriten verwalten	132
10.2.8	Worksheets importieren, exportieren und löschen	133
10.3	Ergebnisse im ASCII/CSV-Format speichern	134
10.4	Einheiten spezifizieren	134
10.5	Datenbanken für Stocks und QC-Proben verwalten	135
10.6	Vordefinierte Bemerkungen erstellen	136
10.7	Windows-Zwischenablage verwenden.....	136
11	ASpect PQ anpassen	138
11.1	Ansichtsoptionen	138
11.2	Speicherpfade	139
11.3	Exportoptionen	140
11.4	Optionen zum fortlaufenden ASCII-Export	140
11.5	Optionen zum Analysenablauf.....	141
11.6	Allgemeine Einstellungen für die Kalibration und Blindwertkorrektur	142
12	Datenaustausch mit einem externen Auftragsverwaltungssystem einrichten	145
12.1	Messergebnisse exportieren	145
12.2	Probeninformationsdateien importieren	147
12.3	Felder des Ergebnisexports	148
12.4	Felder der Probeninformationsdateien	150
13	Optionales FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul.....	152
13.1	Benutzerverwaltung	152
13.1.1	Benutzerverwaltung – Anzeigen und Einstellungen	152
13.1.2	Benutzerebenen konfigurieren.....	153
13.1.3	Allgemeine Einstellungen der Benutzerverwaltung konfigurieren.....	155
13.1.4	Neues Benutzerkonto anlegen.....	157
13.1.5	Bestehendes Benutzerkonto ändern	158

13.2	Kennwort ändern	158
13.3	Audittrail anzeigen, drucken und exportieren	159
13.4	Elektronische Signaturen	160
13.4.1	Messengergebnisse signieren	160
13.4.2	Signatur anzeigen	161
13.5	AJ File Protection	162
14	Anhang	163
14.1	Übersicht über Markierungen in der Werteanzeige	163

1 Software ASpect PQ

ASpect PQ ist die Steuer- und Auswertesoftware für folgende ICP-OES Geräte:

- PlasmaQuant PQ 9000
- PlasmaQuant 9100
- PlasmaQuant 9200

Für die Messabläufe können die Methodenparameter entsprechend den Probenanforderungen optimiert werden. Die Ergebnisdaten können nachberechnet, in verschiedene Dateiformate exportiert und ausgedruckt werden.

Diese Anleitung enthält neben der Softwarebeschreibung Hinweise zur Wartung und Pflege des ICP-OES Gerätes. Viele der Wartungsanleitungen sind mit Animationen und Videos bereichert.

Beschriebene Software-Version	Das vorliegende Dokument orientiert sich an der Version ASpect PQ 1.4.
Bestimmungsgemäße Verwendung	Die Software ASpect PQ dient ausschließlich der Ansteuerung der oben genannten Geräte und der Auswertung der mit diesen Geräten aufgenommenen Daten. Der Hersteller übernimmt keine Haftung für Probleme oder Schäden, die durch nichtbestimmungsgemäße Verwendung von ASpect PQ verursacht werden. ASpect PQ und das damit zu steuernde Gerät dürfen nur durch ausgebildetes und eingewiesenes Personal bedient werden. Der Anwender muss mit dem Inhalt dieses und des Geräte-Handbuches vertraut sein.

1.1 Hinweise zum Datenschutz

Diese Software verwendet Probenamen und erlaubt optionale Angaben zur Probe (Notizen). Der Probenname dient als Identifikator für die Testergebnisse einer bestimmten Probe. Insbesondere im klinischen Umfeld könnten durch den Probenamen Testergebnisse der natürlichen Person zugeordnet werden, an der die Tests durchgeführt wurden. Die personenbezogenen Daten sollten so weit wie möglich minimiert werden, um sicherzustellen, dass niemand personenbezogene Informationen aus dem Probenamen oder den optionalen Notizen ableiten kann. Es sollten keine direkten Identifikatoren wie Namen, Sozialversicherungsnummern, nationale Identifikationsnummern, Geburtsdaten oder andere persönliche Attribute verwendet werden. Es liegt in der Verantwortung der für die Datenverarbeitung Verantwortlichen in den Labors, die geltenden Datenschutzgesetze und -verpflichtungen einzuhalten.

Analytik Jena kann darum bitten, dass Dateien mit Messergebnissen, die auch Probenamen oder Notizen enthalten, im Rahmen von servicebezogenen Aktivitäten wie Kundensupport, Fehlerbehebung und Untersuchung von Beschwerden weitergegeben werden.

1.2 ASpect PQ starten

- ▶ Schalten Sie das Gerät und den Probengeber ein.
- ▶ Klicken Sie auf das ASpect PQ-Icon auf dem Windows-Desktop.
 - ✓ ASpect PQ wird gestartet.

- ▶ Wenn die optionale Benutzerverwaltung installiert ist, erfolgt eine Abfrage von Benutzernamen und Passwort. Erst bei erfolgreicher Eingabe wird das Programm ASpect PQ freigegeben.

Nach dem Start der Software wird der Quickstart geöffnet. Sie haben hier die Möglichkeit, Worksheets mit voreingestellten Methoden und Sequenzen für einen schnellen Messstart zu wählen oder direkt auf die Oberfläche von ASpect PQ zu wechseln.

1.2.1 Fenster Quickstart

Nach Start der Software und Anmeldung eines Benutzers (nur bei installierter Benutzerverwaltung) erscheint das Fenster **Quickstart**. Von hier aus können Sie ein Worksheet laden oder ohne weitere Voreinstellungen in ASpect PQ wechseln. Das Fenster **Quickstart** können Sie in ASpect PQ auch mit dem Menübefehl **Datei | Quickstart** öffnen.

Einstellungen im Fenster Quickstart

Folgende Optionen und Schaltflächen stehen im Fenster **Quickstart** zur Verfügung.

Option / Schaltfläche	Beschreibung
Anwender	Bei Verwendung der optional installierbaren Benutzerverwaltung wird der angemeldete Benutzer angezeigt. Wenn die Rechteverwaltung nicht verwendet wird, kann hier manuell ein Benutzer eingetragen werden.
Labor	Es können bis zu 30 Zeichen eingegeben werden. Die zuletzt eingegebene Bezeichnung wird gespeichert und als Information in den Ergebnisprotokollen ausgegeben.
Routine	Programm für den Routinebetrieb starten. Im Routinebetrieb werden nur Methoden angezeigt, die für den Routinebetrieb freigeschaltet sind. Wenn das optionale "Modul 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ" installiert ist, ist die Option Routine voreingestellt. Es besteht keine Wahlmöglichkeit zwischen Routine und Methodenentwicklung.
Methodenentwicklung	Programm vollständig starten. Alle Einstellungen in der Methodenentwicklung sind freigeschaltet.

Option / Schaltfläche	Beschreibung
Torchmaterial	Wählen Sie das verwendete Torchmaterial (Quarz oder Keramik), um die Empfindlichkeit des optischen Plasmasensors anzupassen.
Simulation	Für Trainings- und Demonstrationszwecke ist es möglich, ASpect PQ ohne ein angeschlossenes Analysengerät zu betreiben. Bei Aktivierung werden alle Gerätefunktionen (einschließlich Messwerterfassung und -auswertung) im Simulationsmodus abgearbeitet.
Quickstart überspringen	Ohne Auswahl eines Worksheets zur Oberfläche von ASpect PQ wechseln.
Ports konfigurieren: AX/SDX	Nur wenn das Verdünnungssystem Teledyne Cetac SDXHPLD mit ASX-560 Autosampler angeschlossen ist Nach einem Klick auf die Schaltfläche werden die vom Probengeber und Verdünnungssystem belegten USB-Ports automatisch konfiguriert. Wenn das optionale "Modul 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ" (Benutzerverwaltung) installiert ist, kann diese Funktion nur von einem Benutzer mit Administratorrechten ausgeführt werden.
Beenden	Fenster Quickstart schließen und ASpect PQ beenden.
OK	Nach Auswahl eines Worksheets zur Oberfläche von ASpect PQ wechseln.

Worksheet-Tabelle

Die Worksheet-Tabelle zeigt die aktuell verfügbaren Worksheets an. Die 4 Tabs erleichtern Ihnen das Auffinden eines Worksheets:

Tab	Inhalt
Favoriten	Worksheets mit der Markierung Favorit
Zuletzt verwendet	Zuletzt verwendete Worksheets
Vordefiniert	Worksheets von Analytik Jena, die bei der Installation von ASpect PQ mit installiert werden
Alle	Alle Worksheets
	Mit dem Lupensymbol können Sie die Worksheets nach Elementen filtern. Nach einem Klick auf das Symbol wird eine Elementliste angezeigt, in der Sie ein Element wählen können. Die Auswahl können Sie wiederholen, wenn Sie nach weiteren Elementen suchen möchten. Wenn Sie mehrere Elemente markiert haben, werden alle Worksheets angezeigt, die mindestens eines der Elemente in der hinterlegten Methode beinhalten (ODER-Logik). Dabei werden sowohl die Methoden durchsucht, die direkt mit einem Worksheet verknüpft sind, als auch Methoden, die innerhalb einer verknüpften Sequenz geladen werden.

1.2.2 Mit Worksheet starten

Ein Worksheet ist eine Mappe, die eine Methode und eine Sequenz enthält. Optional können Worksheets auch Einstellungen zur Proben-ID und zum Speichern der Ergebnisdaterie enthalten. Mit einem ausgewählten Worksheet können Sie sofort eine Messung starten. Existieren von der Methode und der Sequenz mehrere Versionen, werden stets die neuesten (aktuellen) Versionen zur Messung verwendet.

- Installieren Sie das Zubehör am Analysengerät und schalten Sie danach das Zubehör und das Gerät ein.

- ▶ Starten Sie die Software.
 - ✓ Das Fenster **Quickstart** erscheint.
- ▶ Nehmen Sie die notwendigen Eingaben in den Feldern **Anwender** und **Labor** vor.
- ▶ Wählen Sie unter **Torchmaterial** Quarzglas oder Keramik.
- ▶ Markieren Sie in der Worksheet-Tabelle das benötigte Worksheet.
- ▶ Klicken Sie auf **OK**.
 - ✓ Die Oberfläche von ASpect PQ erscheint. Die Methode und die Sequenz sind bereits geladen.

Je nach Worksheet-Konfiguration können Sie nun die mit dem Worksheet geladene Methode und Sequenz mit einer Proben-ID-Datei verknüpfen oder die Messung direkt starten.

1.2.3 Ohne Worksheet starten

Ohne vorbereitetes Worksheet müssen Sie Methode, Sequenz und Proben-ID für die Messung laden oder neu konfigurieren.

- ▶ Installieren Sie das Zubehör am Analysengerät und schalten Sie danach das Zubehör und das Gerät ein.
- ▶ Starten Sie die Software.
 - ✓ Das Fenster **Quickstart** erscheint.
- ▶ Nehmen Sie die notwendigen Eingaben in den Feldern **Anwender** und **Labor** vor.
- ▶ Wählen Sie unter **Torchmaterial** Quarzglas oder Keramik.
- ▶ Klicken Sie auf **Quickstart überspringen**.
 - ✓ Die Oberfläche von ASpect PQ erscheint.

Allgemeiner Ablauf einer Messroutine

Spezifizieren Sie für Ihre Analysenaufgabe eine Methode und eine Sequenz und starten Sie die Messroutine. Für einen manuellen oder automatischen Messablauf sind folgende Schritte notwendig:

- ▶ **Methodenparameter** in einer Methode spezifizieren (Methodenentwicklung). Methode laden.
- ▶ **Sequenz** erstellen. Die Sequenz enthält Proben und Aktionen in der abzuarbeitenden Reihenfolge. Einige probenbeschreibende Daten wie Probenbezeichnung und Position auf dem Probengeber können direkt eingegeben und mit der Sequenz gespeichert werden.
- ▶ Für die Routine-Analytik ist es vorteilhaft, eine **Probenidentifikationsdatei** (Proben-ID) zu erstellen. Diese enthält probenbeschreibende Daten wie Bezeichnung, Verdünnungsfaktor und Probengeber-Position. Die Daten werden benötigt, wenn eine Rückrechnung der Konzentration auf die Originalprobe erfolgen soll. Probenidentifikationsdateien sind Textdateien und können auch über externe Programme erstellt werden.
- ▶ **Messung** starten.

Während des Messablaufs werden Ergebnisse sofort in die Ergebnisdatenbank geschrieben. Auf diese zentrale Ergebnisdatei wird mit den Datenverwaltungsfunktionen (z. B. Export, Druck) zugegriffen.

Nach dem Starten der Messung werden die Ergebniswerte in die Ergebnisliste im Hauptfenster eingetragen. Für eine Detailanzeige (z. B. Einzelwerte, Spektren) kann die entsprechende Probenzeile ausgewählt werden. Die zuletzt gemessenen Ergebnisse werden stets an das Ende der Tabelle angefügt, ein Überschreiben ist nicht möglich.

Falls notwendig, kann eine weitere Datenauswertung durch Neuberechnen erfolgen. Messdaten können für den Protokolldruck aufbereitet oder exportiert werden.

1.2.4 ASpect PQ in zweiter Instanz öffnen

Bei bereits laufender Anwendung wird eine weitere Programminstanz der Anwendung im Offline-Modus geöffnet. In diesem Modus besteht keine Verbindung zum Gerät. Alle weiteren Funktionen wie das Erstellen von Methoden oder das Laden und Auswerten von Ergebnissen können jedoch parallel zum laufenden Messbetrieb in der ersten Programminstanz verwendet werden.

- ▶ Starten Sie das Programm in der zweiten Instanz mit dem Menüpunkt **Datei | Offline-Programminstanz starten**.

1.2.5 ASpect PQ sperren

Die Anwendung kann für die Bedienung gesperrt werden, Messungen werden während der Sperrung weiter ausgeführt. In Verbindung mit der optional erhältlichen Benutzerverwaltung wird eine Kennwortbestätigung für das Entsperren des Bildschirms benötigt.

- ▶ Wählen Sie den Menüpunkt **Extras | Sperren**.
- ▶ Um die Anwendung zu entsperren, klicken Sie auf das Schlosssymbol auf dem Bildschirm.

1.3 ASpect PQ beenden

- ▶ Löschen Sie das Plasma.
- ▶ Beenden Sie das Programm, indem Sie den Menüpunkt **Datei | Beenden** wählen.
- ▶ Sind zu diesem Zeitpunkt Methoden-, Sequenz- oder Probeninformationsdaten noch nicht gespeichert, erscheint ein Bedienhinweis. Klicken Sie auf **Ja**, wenn Sie die Dateien speichern wollen.
- ▶ Das ICP-OES Gerät benötigt nach Abschalten des Plasmas noch Zeit für die Systemkühlung. Ist die Zieltemperatur noch nicht erreicht, wird ein Verlaufs Fenster mit Benachrichtigung zum sicheren Ausschalten des Gerätes angezeigt. Schalten Sie erst nach Beenden von ASpect PQ das ICP-OES Gerät aus.



HINWEIS

Wenn Sie ASpect PQ beenden, während das Plasma brennt, wird das Plasma nach Rückfrage automatisch gelöscht!

Sehen Sie dazu auch

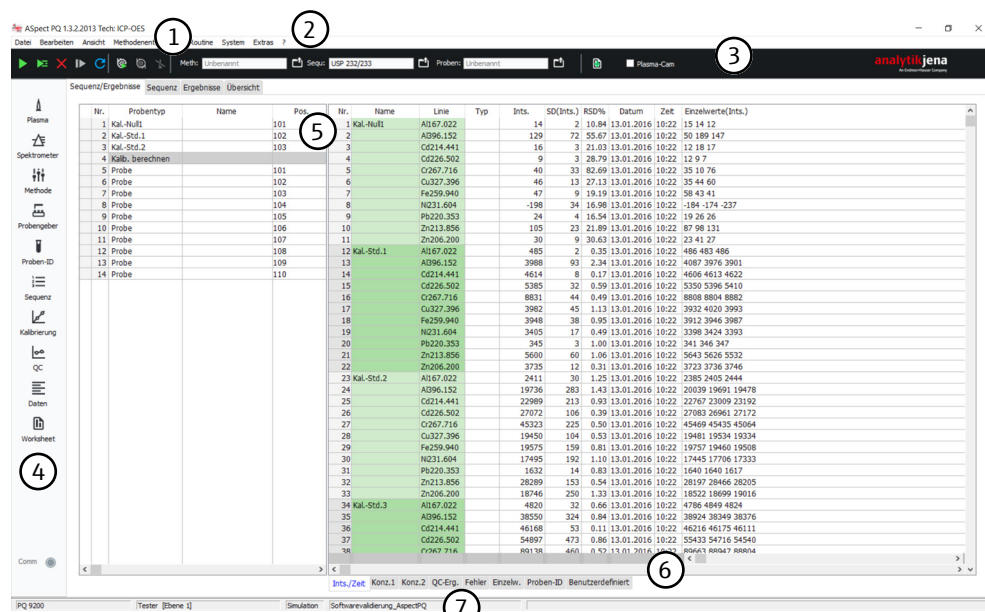
- 📖 Spektrometer einschalten und Plasma zünden [▶ 66]

1.4 Allgemeine Bedienungshinweise

1.4.1 Die Arbeitsoberfläche

Nach dem Start des Programms ASpect PQ wird zunächst das Fenster **Quickstart** geöffnet. Von dort aus erreichen Sie die Arbeitsoberfläche.

Hauptbestandteile der Arbeitsoberfläche



Nr.	Beschreibung
1	In der Titelzeile finden Sie Informationen zur Softwareversion, zum angeschlossenen Gerät, zur Technik und (falls geladen) des Worksheets.
2	Über die Menüleiste erreichen Sie alle Programmfunktionen der Software.
3	Die Werkzeugleiste enthält die Schaltflächen für den Start und das Pausieren von Messsequenzen, und zeigt die aktuell geladene Methode, Sequenz und Proben-ID-Datei an. Mit Klick auf die Schaltfläche  hinter den Feldern können Sie den Datensatz laden. Außerdem finden Sie hier die Schaltfläche zum Anlegen ein neues Worksheets.
4	Über die Symbolleiste haben Sie Zugriff auf die wichtigsten Fenster (Funktionen) der Software. Sobald eines der Fenster geöffnet ist, färbt sich das entsprechende Symbol rot. Wenn mehrere Fenster geöffnet sind, holen Sie ein Fenster mit erneutem Klick auf das Symbol in den Vordergrund.
5	Im Hauptfenster werden die Sequenz und die Messergebnisse angezeigt.
6	Einige Hauptkarten besitzen weitere Unterregister , die im unteren Bereich des Fensters angeordnet sind.
7	In der Statusleiste am unteren Rand werden Informationen über das angeschlossene Gerät, den angemeldeten Nutzer und der Name der aktuell angezeigten Ergebnisdatenbank ausgegeben.

Sehen Sie dazu auch

- Anzeige der Ergebnisse und des Analysenfortschritts im Hauptfenster [► 76]
- Fenster Quickstart [► 8]

1.4.2 Hilfe verwenden

Hilfe zur Bedienung von ASpect PQ erhalten Sie über den Menüpunkt **? | Hilfethemen**. Während der Arbeit mit den Fenstern von ASpect PQ können Sie die Funktionstaste **F1** drücken, um eine kontextsensitive Hilfe zu erhalten.

Das Programm blendet Kurzinformationen (Tooltips) zu den Schaltflächen der Werkzeug- und der Symbolleiste, anderen Symbolschaltflächen und für die Spaltentitel in den Fenstern **Methode**, **Sequenz** und **Proben-ID** ein, wenn Sie den Mauszeiger darüber bewegen.

1.4.3 Übersicht über Menüleiste, Werkzeugleiste und Symbolleiste

Funktionen in der Menüleiste

Am oberen Rand der ASpect PQ-Oberfläche befindet sich die Menüleiste, mit der alle Bedienvorgänge der Software ausgelöst werden können. Menüs und Schaltflächen, die für den aktuellen Inhalt der Arbeitsoberfläche nicht zugänglich sind, werden grau dargestellt. Einige Menüpunkte, wie z. B. die Druckfunktion, werden in Abhängigkeit von weiteren geöffneten Fenstern eingeblendet.

Menüpunkt	Beschreibung
Datei	- Methoden, Sequenzen und Probeninformationsdaten neu erstellen, öffnen und speichern - Ergebnisdaten öffnen - Methoden und Sequenzen löschen - Spektrendaten exportieren - Aktives Fenster oder Protokoll drucken - Protokollentwurfsmodus aufrufen - Offline- bzw. Online-Programminstanz starten - Fenster Quickstart öffnen - Anwendung beenden - Zuletzt geöffnete Methoden und Sequenzen direkt aufrufen
Bearbeiten	- Inhalt von Text- und Eingabefeldern kopieren und einfügen - Ausgewählte Zeilen der Ergebnisliste in die Zwischenablage kopieren - Inhalt der Ergebnisliste löschen
Ansicht	- Fenster, die Darstellungen und Informationen während des Analysenablaufs enthalten, z. B. Signalverlauf, öffnen und schließen - Skalierung der Signalachse der Darstellungen auswählen
Methodenentwicklung	- Fenster, die während der Methodenentwicklung benötigt werden, öffnen - Übersichtsspektrum aufzeichnen
Routine	- Messablauf starten, pausieren und abbrechen - Ergebnisse Neuberechnen - Kalibrierung löschen - Plasma löschen - System spülen
System	Verfügbar, wenn das optionale Modul "21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ" installiert ist - Benutzerverwaltung konfigurieren - Kennwort ändern - Audit Trail ansehen - Ergebnisse signieren
Extras	- Fenster Daten und Optionen öffnen - Linienliste öffnen - Proben suchen - Aktuelle Bildschirmanzeige ausdrucken - Wartungen (Umlaufkühler) überprüfen und durchführen

Menüpunkt	Beschreibung
	Arbeitsplatz sperren
?	Hilfe und Versionsinformation anzeigen

Werkzeugleiste

Die Schaltflächen in der Werkzeugleiste dienen hauptsächlich zum Starten/Unterbrechen und Fortsetzen der Sequenzmessung. In den Feldern der Werkzeugleiste werden die aktuell geladenen Methoden, Sequenzen und Proben-IDs angezeigt.

Tools	Beschreibung
	Messroutine starten
	Markierte Zeilen in der Sequenz messen
	Laufende Messroutine unterbrechen
	Unterbrochene Sequenzmessung fortsetzen
	Ergebnisse neu berechnen
	Pumpe am ICP-OES Gerät starten/stoppen
	Pumpe schneller laufen lassen (Probenweg spülen)
	Plasma löschen (Schnellabschaltung)
	Dateien öffnen Es können gespeicherte Methoden, Sequenzen oder Proben-ID in das Programm geladen und für die aktuelle Analyse verwendet werden.
	Neues Worksheet erstellen
Plasma-Cam	Plasma-Kamera aktivieren Die Software blendet ständig das Kamerabild mit einer Aufzeichnung des Plasmas ein. Mögliche Unregelmäßigkeiten wie die Ausbildung eines Ringplasmas während des Zündvorgangs werden schnell erkannt. Das Kamerabild kann mit dem Menübefehl Einstellungen Kamerabild zuschneiden im Kamerafenster zugeschnitten werden.

Symbolleiste

Die Symbolleiste bietet schnellen Zugriff zu den wichtigsten Funktionen des Programms ASpect PQ. Ein Klick auf das Icon öffnet das Fenster mit der entsprechenden Programmfunktion. Die Symbolleiste befindet sich nach der Installation am linken Bildschirmrand, sie kann jedoch beliebig mit gedrückter Maustaste verschoben werden.

Icon	Beschreibung
	Atomisierung kontrollieren: - Zünden/Löschen des Plasmas - Einstellungen der Gasflüsse - Überprüfen der Pumpe für die Probenförderung zum Zerstäuber - Justieren der Transferoptik - Optimierung von Plasmaleistung und Zerstäubergas
	Spektrometerfunktionen überprüfen: - Gerätedaten - Test der Wellenlängenkorrekturen - Messung an einer Test-Wellenlänge starten - eine kontinuierliche Messung für Geräteoptimierungen starten

Icon	Beschreibung
	Methodenfenster öffnen
	Probengeber spezifizieren
	Fenster mit Probeninformationsdaten öffnen
	Sequenzfenster öffnen
	Fenster mit Kalibrierung öffnen
	Fenster mit Daten der Qualitätskontrolle öffnen
	Datenverwaltung öffnen
	Worksheets verwalten, gespeicherte Worksheets öffnen

1.4.4 Häufig verwendete Bedienelemente

Verschiedene Schaltflächen, Maus- und Tastaturfunktionen werden innerhalb von ASpect PQ mit immer wieder gleicher bzw. sehr ähnlicher Bedeutung verwendet.

Diese Bedienelemente werden hier allgemein beschrieben, soweit erforderlich finden Sie spezifische Informationen bei der Beschreibung der jeweiligen Fenster.

Allgemeine Schaltflächen

Die Bedeutung von Symbolschaltflächen wird durch Tooltips angezeigt, wenn sich der Mauszeiger über dem entsprechenden Symbol befindet.

Schaltfläche	Beschreibung
OK	Fenster schließen und Einstellungen übernehmen
Abbrechen	Fenster schließen, Änderungen verwerfen
Übernehmen	Einstellungen übernehmen, ohne das Fenster zu schließen
Schließen	Fenster schließen, Einstellungen können nicht dauerhaft gespeichert werden
Öffnen	Ein Auswahlfenster öffnen, um eine Datei oder einen Datensatz zu laden
Speichern	Ein Auswahlfenster öffnen, um eine Datei oder einen Datensatz zu speichern
	Ein Auswahldialogfenster, z. B. PfadauswahlDialog, öffnen
	Das Fenster Drucken öffnen. Der Inhalt des aktuellen Fensters kann gedruckt oder in eine Datei exportiert werden

Tabellen

	Typ	Pos	Name	AS-VF	Name(2)	Elemente
1	Reag.-Blindwert	101		1		alle
2	Kal.-Null1	101		1		alle
3	Kal.-Std.1	102		1		alle
4	Kal.-Std.2	103		1		alle
5	Kal.-Std.3	104		1		alle
6	Kal.-Std.4	105		1		alle
7	Kal.-Std.5	106		1		Al396.152, Cu324.754, Fe259.940, ...
8	Kalb. berechnen					
9	Probe	101		1		alle
10	Probe	102		1		alle
11	Probe	103		1		alle

Anhängen Einfügen Löschen
 


☐ inc.
☒ Typen

In einigen Fenstern werden Werte direkt in eine Tabelle eingetragen. Je nach Art des Eintrags verhält sich die Tabellenzelle wie ein Eingabefeld, eine Auswahlliste oder ein Eingabefeld für einen begrenzten Zahlenwertbereich mit Pfeiltasten.

- ▶ Zum Markieren einer Tabellenzeile klicken Sie in der ersten grau unterlegten Tabellenspalte auf die entsprechende Zeile. Der Markierungsbalken kann anschließend mit den Pfeiltasten der Tastatur verschoben werden.
- ▶ Zum Verändern der Spaltenbreite bewegen Sie den Mauszeiger auf die Begrenzungslinie zwischen zwei Spalten bis ein Doppelpfeil erscheint. Drücken Sie die linke Maustaste und passen Sie die Spaltenbreite an.

In Eingabefeldern stehen zusätzlich folgende Funktionen zur Verfügung:

- ▶ F2 schaltet den Editiermodus ein. In diesem Modus werden die Pfeiltasten auf der Tastatur zum zeichenweisen Editieren verwendet. Erneutes Drücken von **F2** aktiviert den Standardmodus bei dem die Cursortasten zur Navigation zwischen den Zellen verwendet werden.
- ▶ Texte können über das Menü **Bearbeiten | Kopieren** und **Bearbeiten | Einfügen** oder über die Tastenkombination Strg+C und Strg+V in die Windows-Zwischenablage kopiert und wieder eingefügt werden.

Schaltflächen in den Tabellen

Schaltfläche	Funktion
Anhängen	Fügt eine neue Tabellenzeile am Ende der Liste ein.
Einfügen	Fügt eine neue Tabellenzeile vor einer markierten Tabellenzeile ein.
Löschen	Löscht die markierte Tabellenzeile.
	Verschiebt die markierte Tabellenzeile eine Position nach oben. Hinweis: Eine Tabellenzeile muss vollständig markiert sein, damit sie verschoben werden kann. Dafür klicken Sie auf die Nummer der betreffenden Zeile in der ersten Tabellenspalte.
	Verschiebt die markierte Tabellenzeile eine Position nach unten.
	Übernimmt den Wert der markierten Zelle in alle nachfolgenden Tabellenzeilen des gleichen Probenotyps (Probe, Standards, QC usw.). Bei aktiviertem Kontrollkästchen inc. (steht für Inkrement) wird dieser Wert automatisch erhöht, z. B. Probe001, Probe002 ...

Grafiken

In Grafiken kann mit Hilfe der rechten Maustaste ein Kontextmenü geöffnet werden, um die Grafik oder das gesamte Fenster im Grafikformat in die Windows-Zwischenablage zu kopieren. In mehreren Grafikenfenstern stehen zusätzliche Symbolschaltflächen zur Verfügung:

Symbol	Funktion
	Aktiviert den Zoommodus Ziehen Sie nach Aktivierung der Schaltfläche mit gedrückter linker Maustaste um den zu vergrößernden Grafikbereich einen Rahmen und lassen die Maustaste los.
	Deaktiviert den Zoommodus und schaltet die Darstellung auf die ursprüngliche Skalierung zurück
	Aktiviert den Textmodus Ziehen Sie nach Aktivierung der Schaltfläche mit gedrückter linker Maustaste in der Grafik einen Rahmen auf und geben Sie den Text ein. Ein Doppelklick auf einen bestehenden Text öffnet das Fenster, um den Text zu ändern oder zu löschen. Mit der Kombination Strg + rechte Maustaste kann ein bestehender Text verschoben werden.
	Aktiviert den Markierungsmodus in Darstellungen des Signalverlaufs oder Spektren Mit der linken Maustaste werden Beschriftungen zu den Messpunkten hinzugefügt.

Funktionstasten

Symbol	Funktion
F1	Kontextsensitive Hilfe aufrufen
F2	Tabellenzellen editieren
F5	Bildschirm Ausdruck starten
F6	Ausgewählte Zeile der Sequenz (Menüpunkt Routine Zeile(n) der Sequenz ausführen...) messen
F7	Zusätzliche Darstellungsfenster (z. B. Signalverlauf) anzeigen
F8	Zusätzliche Darstellungsfenster schließen
F10	Für die Bedienung per Tastatur zwischen Menüzeile des Arbeitsbereichs und Ergebnisfenster umschalten
F11	Gestoppten Messablauf fortsetzen (Menüpunkt Routine Fortsetzen)
F12	Messablauf starten und stoppen (Menüpunkte Routine Sequenz starten... und Routine Stopp)

Drucker verwenden

In ASpect PQ wird der unter Windows eingerichtete Standard-Drucker verwendet.

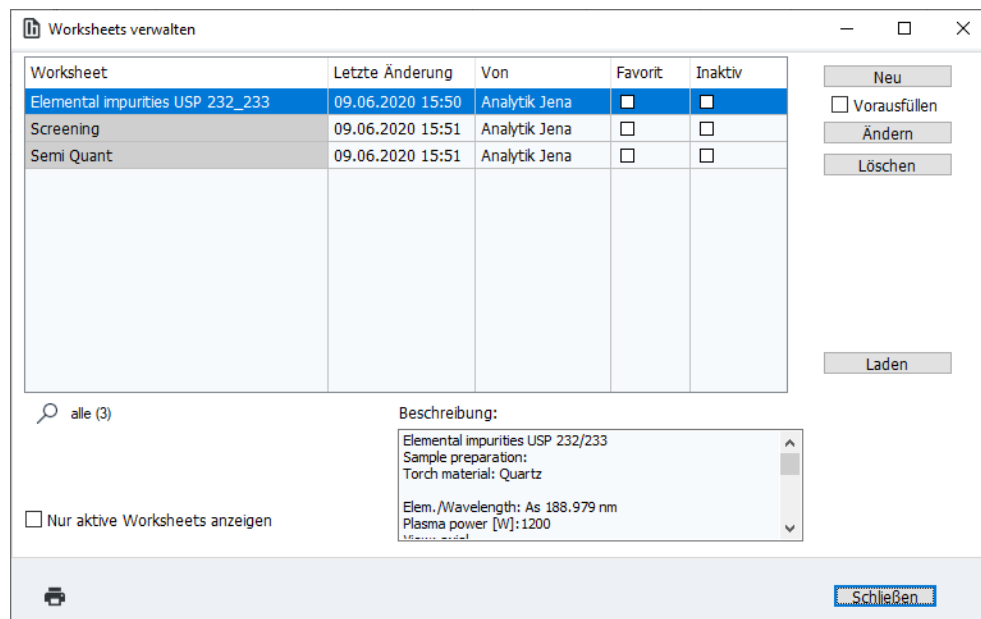
2 Worksheets

Ein Worksheet ist eine Mappe, die eine Methode und eine Sequenz zusammenfasst. Ergänzend können in einem Worksheet Einstellungen für eine Proben-ID-Datei und für Ergebnisdaten hinterlegt werden. Mit einem geladenen Worksheet können Sie direkt die Messroutine starten.

Sie können Worksheets neu erstellen, ändern, löschen, deaktivieren oder laden. Die Funktionen dafür finden Sie im Fenster **Worksheets verwalten**.

Das Fenster **Worksheets verwalten** öffnen Sie mit einem Klick auf  in der Symbolleiste.

Elemente im Fenster Worksheets verwalten



Schaltflächen / Optionen	Beschreibung
Neu	Neues Worksheet erstellen
Vorausfüllen	Eine bereits geladene Sequenz und Methode werden übernommen.
Ändern	Markiertes Worksheet editieren
Löschen	Markiertes Worksheet löschen
Laden	Markiertes Worksheet für eine Messung laden
Nur aktive Worksheets anzeigen	In der Tabelle alle Worksheets ausblenden, die mit Inaktiv gekennzeichnet sind.
Beschreibung	Beschreibung des markierten Worksheets Diese Informationen werden beim Erstellen des Worksheets hinterlegt.

In der Tabelle werden folgende Informationen zu den Worksheets ausgegeben:

Tabellenspalte	Beschreibung
Worksheet	Name des Worksheets
Letzte Änderung	Datum der letzten Änderung des Worksheets
Von	Dieser Anwender hat die letzte Änderung vorgenommen. Der Name des Anwenders wird aus dem Quickstart übernommen.

Tabellenspalte	Beschreibung
Favorit	Wenn aktiviert, wird das Worksheet auf dem Tab Favoriten im Fenster Quickstart angezeigt
Inaktiv	Wenn aktiviert, wird dieses Worksheet nicht im Quickstart angezeigt. Ein als inaktiv markiertes Worksheet kann jedoch aus dem Fenster Worksheets verwalten geladen werden.

Sehen Sie dazu auch

 Mit Worksheet starten [► 9]

2.1 Worksheet neu erstellen

Ein Worksheet erstellen Sie im Fenster **Neues Worksheet**.

Neues Worksheet

Name: ★ Favorit
☐ Inaktiv

Methode:  

08.06.2020 15:10

Sequenz: 

09.06.2020 7:45

Proben-ID: 

Ordner: 

Ergebnisdatei: 

Ordner: 

Name:

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

Elemente:

Letzte Änderung: 10.08.2020 10:29

Beschreibung:

Elemente im Fenster Neues Worksheet

Feld / Option	Beschreibung
Name	Name des Worksheets eingeben
Methode	Im Worksheet hinterlegte Methode Öffnen Sie mit  das Datenbankfenster und wählen Sie die Methode aus.
Sequenz	Im Worksheet hinterlegte Sequenz Öffnen Sie mit  das Datenbankfenster und wählen Sie die Sequenz aus.

Feld / Option	Beschreibung
Proben-ID	Optional können Sie Einstellungen zum Laden einer Proben-ID-Datei vornehmen: (keine): Es werden keine Einstellungen für die Proben-ID-Datei hinterlegt. Ordner mit Proben-ID Dateien öffnen: Nach Laden des Worksheets wird ein Ordner geöffnet, in dem die Proben-ID-Datei bereit liegt. Klicken Sie auf  und wählen Sie den Ordner. Proben-ID Datei laden: Beim Laden des Worksheets wird automatisch eine Proben-ID-Datei geladen. Klicken Sie auf  und wählen Sie die Datei aus. Sie können mit den Platzhaltern "*" und "?" auch eine Datei-Maske definieren.
Ergebnis-datei	Optional können Sie Einstellungen zum Speichern der Ergebnisse vornehmen: (keine) Messung startet mit Fenster Messstart, in dem der Name der Ergebnisdatei und der Speicherort vergeben wird. Datei immer neu erstellen (Zeitstempel anhängen) Ergebnisdateien einer Sequenz werden jeweils in einer neuen Datei gespeichert. Der Dateiname setzt sich aus einem festen Bestandteil (Name) und dem Zeitstempel der Messung zusammen. Wählen Sie einen Ordner, in dem die Datei gespeichert wird, und geben Sie einen Namen ein. Erstellen und an Datei anhängen Beim ersten Sequenzstart wird die Ergebnisdatei erzeugt. Bei jedem weiteren Sequenzstart werden die Ergebnisse in dieser Datei angehängt.
Beschreibung	Im Feld Beschreibung werden zunächst voreingestellt einige Analysenparameter angezeigt, die aus der Methode extrahiert wurden. Sie können diese Angaben frei editieren und so konkrete Hinweise zur Verwendung des Worksheets geben. Die Eingaben erscheinen im Quickstart und im Fenster Worksheets verwalten für ein ausgewähltes Worksheet.
Favorit	Mit einem Klick auf den Stern, können Sie das Worksheet als Favorit markieren: Gelber Stern: Favorit Grauer Stern: Kein Favorit
Inaktiv	Wenn aktiviert, wird dieses Worksheet nicht im Quickstart angezeigt. Ein als inaktiv markiertes Worksheet kann aus dem Fenster Worksheets verwalten geladen werden.

Worksheet spezifizieren

- ▶ Um ein neues Worksheet zu erstellen, öffnen Sie mit einem Klick auf  in der Symbolleiste das Fenster **Worksheets verwalten** und klicken Sie auf **Neu**. Alternativ können Sie in der Werkzeugleiste auf  klicken.
 - ✓ Das Fenster **Neues Worksheet** erscheint.
- ▶ Wählen Sie eine Methode und eine Sequenz.

Hinweis: In einer Sequenz können weitere Methoden als Aktionen nachgeladen werden.
- ▶ Optional können Sie Vereinbarungen zum Speichern der Ergebnisdatei und der Verwendung einer Proben-ID-Datei treffen und die Beschreibung editieren (siehe unten).
- ▶ Verlassen Sie das Fenster mit Klick auf **OK**.
 - ✓ Das neue Worksheet erscheint im Fenster **Worksheets verwalten** und kann geladen werden.

Sehen Sie dazu auch

- 📄 Messroutine starten [► 69]

2.2 Worksheet editieren

Sie können alle Einstellungen in einem vorhandenen Worksheet editieren.

- ▶ Öffnen Sie mit einem Klick auf  in der Symbolleiste das Fenster **Worksheets verwalten**.
- ▶ Markieren Sie das Worksheet und klicken Sie auf **Ändern**. Das Fenster **Worksheet bearbeiten** erscheint.
- ▶ Nehmen Sie analog zum Neuerstellen eines Worksheets die Änderungen vor.

2.3 Worksheet laden

Ein Worksheet können Sie im **Quickstart** wählen oder im Fenster **Worksheets verwalten** laden:

- ▶ Das Fenster **Worksheets verwalten** mit einem Klick auf  in der Symbolleiste öffnen.
- ▶ Das Worksheet mit einem Mausklick in der Tabelle markieren und auf **Laden** klicken.
 - ✓ Das Worksheet wird geladen und die Sequenz im Hauptfenster angezeigt.

Je nach Worksheet-Konfiguration können Sie nun die mit dem Worksheet geladene Methode und Sequenz mit einer Proben-ID-Datei verknüpfen oder die Messung direkt starten.



HINWEIS

Beim Laden eines Worksheets werden stets die aktuellen Versionen der Methode und der Sequenz verwendet.

Wenn Sie eine vom Worksheet abweichende Methode oder Sequenz laden, werden die Einstellungen für die Ergebnisdatei und die Proben-IDs im Worksheet zurückgesetzt.

2.4 Worksheet löschen

Sie können ein nicht benötigtes Worksheet löschen.

- ▶ Öffnen Sie mit einem Klick auf  in der Symbolleiste das Fenster **Worksheets verwalten**.
- ▶ Markieren Sie das Worksheet und klicken Sie auf **Löschen**.
 - ✓ Nach einer Rückfrage wird das Worksheet gelöscht.

3 Methoden

In den Methoden sind die für eine Analyse nötigen Parameter gespeichert:

- Auswahl der Analysenlinien
- Parameter für die Linienauswertung
- Plasma- und Spektrometereinstellungen
- Art der Probenzufuhr
- Kalibrierparameter
- Statistische Auswertungen
- Einstellungen zur Qualitätskontrolle und -sicherung
- Einstellungen zur Messwertausgabe

Auf Grundlage einer Methode können Messsequenzen erstellt werden. Sequenzen legen fest, in welcher Reihenfolge Proben und Aktionen innerhalb der Messroutine abzuarbeitet sind. Gespeicherte Methoden können für Analysen mit unterschiedlichen Sequenzen genutzt werden.

Das Fenster **Methode** öffnen Sie mit einem Klick auf  in der Symbolleiste. Die zuletzt aktive Methode wird angezeigt. Wenn Sie nach Start von ASpect PQ keine Methode geladen haben, enthalten die Anzeigen des Fensters die Voreinstellungen oder sind leer.

3.1 Methoden erstellen, speichern und laden

Methoden werden in einer Datenbank gespeichert. Wenn Sie eine vorhandenen Methode ändern und die geänderte Methode unter demselben Namen speichern, legt die Software eine neue Version der Methode an. Die vorhandene Methode kann also nicht überschrieben und auf diese Weise unabsichtlich gelöscht werden.

Weitere Funktionen zum Export, Import oder Löschen von Methoden finden Sie im Fenster **Daten | Datenverwaltung**.

Sehen Sie dazu auch

 Methoden und Sequenzen verwalten [► 127]

3.1.1 Neue Methode erstellen

Beim Erstellen einer neuen Methode können Sie auf Standardeinstellungen, Parameter einer gespeicherten Methode oder aktuelle Methodenparameter zurückgreifen.

- ▶ Wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Neue Methode erstellen**.
Wenn Sie bisher keine Methode aktiviert haben, können Sie alternativ auch auf  klicken.
- ▶ Aktivieren Sie eine der drei Optionen im Fenster **Neue Methode**:
 - **Basierend auf Standardwerten**: Das Fenster **Methode** nur mit Voreinstellungen für die Kalibrierung und Statistik öffnen.
 - **Basierend auf aktuellen Parametern**: Das Fenster **Methode** mit den aktuellen Methodenparametern öffnen.
 - **Basierend auf gespeicherter Methode**: Im Datenbankfenster **Methode öffnen** eine Methode wählen.
- ▶ Bestätigen Sie die Auswahl mit **OK**.
 - ✓ Das Fenster **Methode** mit den gewählten Voreinstellungen erscheint.

- ▶ Spezifizieren Sie die Methode auf den verschiedenen Registerkarten und nehmen Sie die nötigen Optimierungen vor.
- ▶ Übernehmen Sie die eingestellten Methodenparameter mit den Schaltflächen **OK** oder **Übernehmen**.
 - ✓ Sie können jetzt die Methode speichern oder für die nächste Analyse verwenden. Für die Analyse erstellen Sie auf Grundlage der Methode eine Sequenz und füllen optional eine Proben-ID-Tabelle aus. Starten Sie anschließend die Messung.

Sehen Sie dazu auch

📖 Methodenparameter spezifizieren [▶ 25]

3.1.2 Methode speichern

Nach Eingabe der Methodenparameter speichern Sie die Methode in der Datenbank. Damit können Sie die Methode zu einem späteren Zeitpunkt für weitere Messungen laden oder in Worksheets einbinden. Methoden werden im Fenster **Methode speichern** in der Datenbank gespeichert. Dabei können Sie weitere Daten eingeben, um die Methode zu kategorisieren und leichter auffindbar zu machen.

Elemente im Fenster Methode speichern

Option	Beschreibung
Name	Methodenname
Kat.	Kategorie (drei Zeichen) für eine weitere Kennzeichnung und Sortierung der Methoden Diese Eingabe ist optional. Wenn das FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul installiert ist, können Sie mit ausgewählten Kategorien eine Methode als freigegeben kennzeichnen. Die Kategorien für freigegebene Methoden definieren Sie in den Einstellungen der Benutzerverwaltung.
Tabelle	Übersicht vorhandener Methoden
Sortieren nach	Mit den Optionen in dieser Gruppe können Sie die Methodenliste sortieren. Wenn die Option Nur aktuelle Versionen anzeigen aktiviert ist, wird bei gleichnamigen Methoden jeweils nur die neueste Version angezeigt.

Option	Beschreibung
Als Routinemethode verwenden	Wenn aktiviert, ist die Methode im Programmmodus Routine verfügbar. Die Wahl des Programmmodus erfolgt im Fenster Quickstart . Wenn das optionale "Modul 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ" installiert ist, steht die Option nicht zur Auswahl.
Kalibrierkurve(n) speichern	Vorhandene Kalibrierkurven mit der Methode speichern Die Kalibrierkurven können für weitere Analysen verwendet werden.
Beschreibung	Optional nähere Erläuterungen zur Methode eingeben Mit Klick auf  öffnen Sie eine Liste mit vordefinierten Bemerkungen. Diese Bemerkungen verwalten Sie im Fenster Daten Vordefinierte Bemerkungen

Methode speichern

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Methode** auf **Speichern** oder wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Speichern | Methode**.
 - ✓ Das Fenster **Methode speichern** erscheint.
- ▶ Geben Sie den Namen der Methode ein und wählen Sie weitere Parameter.
 - ✓ Die Methode wird in der Datenbank gespeichert. Bei Verwendung eines vorhandenen Methodennamens wird eine neue Version der Methode in der Datenbank angelegt.



HINWEIS

Die Methode wird auch in der Ergebnisdatei der Messung gespeichert. Nach Aufrufen der Ergebnisdatei können Sie die Methode aus der Ergebnisdatei wiederherstellen. Weitere Verwaltungsfunktionen für Methoden stehen im Fenster **Daten | Datenverwaltung** zur Verfügung.

Sehen Sie dazu auch

-  Allgemeine Einstellungen der Benutzerverwaltung konfigurieren [▶ 155]
-  Fenster Quickstart [▶ 8]
-  Methoden und Sequenzen verwalten [▶ 127]

3.1.3 Methode laden

Sie können gespeicherte Methoden laden und zusammen mit einer Sequenz eine Messroutine starten. Methodenparameter können aus der Methodendatenbank oder aus einer vorhandenen Ergebnisdatei geladen werden.

Aus Datenbank laden

- ▶ Öffnen Sie das Datenbankfenster mit einer der folgenden Alternativen:
 - Klicken Sie in der Werkzeugleiste auf das Ordner-Symbol  neben dem Feld **Methode**.
 - Wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Methode öffnen**.
 - Klicken Sie im Fenster **Methode** auf **Öffnen**.
- ▶ Wählen Sie in der Liste die gewünschte Methode aus.
- ▶ Im Feld **Kat.** können Sie die angezeigten Methoden mit Auswahl einer Kategorie einschränken. Wenn Sie alle Methoden sehen möchten, löschen Sie den Eintrag im Feld **Kat..**

- ▶ Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Nur aktuelle Versionen anzeigen**, wenn bei gleichnamigen Methoden jeweils nur die Methode mit der höchsten Version angezeigt werden soll.
- ▶ Verlassen Sie das Fenster **Methode** mit **OK**.
 - ✓ Sie haben die gewünschte Methode geladen. Die Methode wird in der Werkzeugleiste bei **Meth** angezeigt.

Aus Ergebnisdatei laden

Aus einer im Hauptfenster angezeigten Ergebnisdatei kann die Methode extrahiert werden.

- ▶ Führen Sie auf eine beliebige Probe einen Rechtsklick aus.
- ▶ Wählen Sie im Kontextmenü den Punkt **Methode aus Ergebnisdaten laden**.
- ▶ Nach einer Abfrage, ob aktuelle Methodenparameter überschrieben werden, kann die Methode mit einem Klick auf  angezeigt werden.

3.2 Methodenparameter spezifizieren

Im Fenster **Methode** spezifizieren Sie für eine Analyse die Messparameter und die Parameter für die Ergebnisauswertung.

Das Fenster **Methode** öffnen Sie mit Klick auf .

Schaltflächen im Fenster Methode

Im unteren Bereich des Fensters befinden sich Schaltflächen, die immer zur Verfügung stehen.

Schaltfläche	Beschreibung
Öffnen	Eine gespeicherte Methode öffnen
Speichern	Die aktuellen Methodenparameter speichern
	Methodenparameter drucken
	Eigenschaften der Methode einsehen
OK	Parameter im Fenster übernehmen und das Fenster schließen
Übernehmen	Parameter im Fenster übernehmen, aber das Fenster offen lassen
Abbrechen	Geänderte Parameter nicht übernehmen und das Fenster schließen

3.2.1 Analysenlinien spezifizieren (Fenster Methode | Linien)

Im Fenster **Methode | Linien** wählen Sie die Analysenlinien für die Messung.

Fenster Methode | Linien

Nr.	Elem.	Wellenl. [nm]	Linie	Typ	Hauptlinie	Messzeit [s]	Autointegr. Bereich	Folge
1	Ar	420.0680	Ar420.068	Int.Std.		3.0	Peak	1
2	As	188.9790	As188.979	Analyt		10.0	Peak	2
3	Cd	214.4410	Cd214.441	Analyt		3.0	Peak	3
4	Hg	184.8860	Hg184.886	Analyt		3.0	Peak	4
5	Pb	220.3534	Pb220.353	Analyt		10.0	Peak	5
6	Co	237.8625	Co237.863	Analyt		3.0	Peak	6
7	Ni	231.6036	Ni231.604	Analyt		3.0	Peak	7
8	V	292.4636	V292.464	Analyt		3.0	Peak	8
9	Ag	328.0683	Ag328.068	Analyt		3.0	Peak	9
10	Se	196.0280	Se196.028	Analyt		3.0	Peak	10
11	Tl	190.7960	Tl190.796	Analyt		3.0	Peak	11

Linie

Anhängen... Einfügen... Löschen Ändern... ★

Mehrlinienauswertung... ☐ Zeitoptimierte Messfolge

Interne Std. zuweisen... (keine)

Öffnen... Speichern... OK Übernehmen Abbrechen

Parameter der Linientabelle

Tabellenspalte	Beschreibung
Nr.	Reihenfolge der ausgewählten Linien in der Tabelle
☐ / ☒	Nur im Modus Methodenentwicklung verfügbar (nicht mit "Modul 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ") Die Markierung erleichtert die Methodenentwicklung, bei der zu Beginn mehrere Linien eines Elements gemessen und dann die geeignete Linie ausgewählt wird. Wenn eine Elementlinie mit einem Häkchen aktiviert ist, wird diese Linie für die Analyse verwendet und gemessen. Deaktivierte Linien sind in der folgenden Analyse ausgeschlossen und werden nicht gemessen. Deaktivierte Linien sind noch nicht explizit aus der Linientabelle gelöscht.
Elem.	Elementsymbol des zu analysierenden Elements
Wellenlänge	Wellenlänge der Analysenlinie in nm
Linie	Bezeichnung der Analysenlinie In der Voreinstellung setzt sich die Bezeichnung der Linie aus dem Elementsymbol und der Wellenlänge zusammen. Die Bezeichnung kann frei editiert werden und muss eindeutig sein.
Typ	Auswahl zwischen Analyt (zu analysierende Linie) und Int.Std. (interne Referenzlinie)
Hauptlinie	Auswahl und Anzeige, mit welcher Analysenlinie die aktuelle Linie gleichzeitig gemessen wird (Simultanmessung) Die Messzeit kann verkürzt werden, indem nahe zusammenliegende Linien mit einer Spektrometereinstellung erfasst werden. Nach einem Klick auf Mehrlinienauswertung werden die möglichen Kombinationen angezeigt.
Messzeit	Gesamtmesszeit für eine Analysenlinie

Tabellenspalte	Beschreibung
Autointegr. Bereich	Die Integrationszeit automatisch wählen, sodass der CCD-Detektor optimal beleuchtet ist und keine Überbelichtung auftritt Bei einer Überbelichtung läuft die von einem Pixel nicht aufgenommene Ladung auf benachbarte Pixel über und verursacht Messfehler (Blooming-Effekt). Für die Ermittlung der Integrationszeit muss der betrachtete Bereich gewählt werden: Spektrum Die Integrationszeit wird auf den höchsten Peak im Spektralbereich der Linie optimiert. Diese Option ist voreingestellt und führt zu einem sicheren Ergebnis. Peak Die Integrationszeit wird auf den Analysenpeak optimiert. Bei Auswahl dieser Option wird der Dynamikbereich des CCD-Detektors für die Analyse optimal genutzt. Es ist jedoch darauf zu achten, dass sich nicht in unmittelbarer Nähe des Analysenpixels ein höherer Peak befindet. In diesem Fall könnte das Messergebnis durch den Blooming-Effekt verfälscht werden. Detektor Die Integrationszeit wird an den höchsten Peak auf dem Detektor angepasst. Bei dieser Option wird kein Bereich des Detektors überbelichtet, unter Umständen werden die Pixel des Analysenpeaks nicht optimal beleuchtet.
Folge	Reihenfolge in der Analyse Die Messreihenfolge kann frei festgelegt werden. Hinweis: Nach Markierung einer Zahl werden mit einem Klick auf  den nachfolgenden Zeilen die Zahlen in aufsteigender Reihenfolge zugeordnet. Sie können markierte Zeilen (Elementlinien) mit  und  in der Tabelle in der gewünschten Messreihenfolge anordnen, in der ersten Zeile unter Folge "1" eingeben und mit  die Messreihenfolge aufsteigend allen anderen Analysenlinien zuordnen.

Schaltflächen in der Gruppe Linien

Mit den Schaltflächen **Anhängen**, **Einfügen** und **Ändern** fügen Sie der Linientabelle weitere Analysenlinien hinzu bzw. editieren Sie eine ausgewählte Linie. Nach einem Klick auf eine dieser Schaltflächen öffnet sich das Fenster **Element/Linie auswählen** für weitere Eingaben. Mit der Schaltfläche **Löschen** löschen Sie eine oder mehrere markierte Analysenlinien aus der Methode.

Weitere Schaltflächen und Kontrollkästchen

Schaltfläche	Beschreibung
Mehrlinienauswertung	Kombinationen von Analysenlinien finden, die gemeinsam mit einer Spektrometereinstellung erfasst werden können Diese Analysenlinien können simultan gemessen werden.
Interne Std. zuweisen	Analysenlinien mit einem internen Standard verknüpfen und korrigieren
Nicht verwendete Linien löschen	Nur im Programmmodus Methodenentwicklung verfügbar (nicht mit "Modul 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ") Alle deaktivierten Linien aus der Methodenliste löschen. Hinweis: Methoden können nur als Routinemethoden gespeichert und verwendet werden, wenn alle Linien in der Linientabelle verwendet werden.

Schaltfläche	Beschreibung
Optimierte Messfolge	Analysenlinien automatisch nach Wellenlänge und Messbedingungen sortieren, sodass die Gesamtmesszeit verkürzt wird Bei Aktivierung des Kontrollkästchens ist keine manuelle Sortierung der Analysenlinien mehr möglich. Hinweis: Die Messzeit hängt von der Anzahl und Sortierung der Analysenlinien und den Messbedingungen ab. Somit kann auch die Auswahl ähnlicher Parameter für Plasma und Transferoptik für viele Analysenlinien die Messzeit verringern.

Sehen Sie dazu auch

- 📄 Linien simultan messen [► 30]
- 📄 Häufig verwendete Bedienelemente [► 15]
- 📄 Interne Standards definieren [► 32]

3.2.1.1 Analysenlinien in die Linientabelle einfügen

Die Auswahl der Analysenlinien erfolgt im Fenster **Element/Linie auswählen**.

Elemente im Fenster Element/
Linie auswählen

Die Karte **Elemente** enthält das Periodensystem mit allen mit der ICP-OES-Technik analysierbaren Elementen (mit dunkelgrauen Schaltflächen und schwarzen Elementensymbolen). "Ausgegraute" Elemente sind nicht verfügbar. Die Karte **Linieninterferenzen** zeigt für eine ausgewählte Linie die bekannten möglichen Interferenzen mit den relativen Empfindlichkeiten an.

Element/Linie auswählen - [Ausgewählt: 1 von 186]

Elemente Linieninterferenzen Element auswählen: **Si**

Element	Wellenl. [nm]	Typ	BEC(ax.) [mg/L]	Rang
☒ Si	251.6112	I	0.05	1
☐ Si	212.4120	I	0.08	2
☐ Si	288.1577	I	0.13	3
☐ Si	221.6669	I	0.15	4
☐ Si	220.7978	I	0.61	5
☐ Si	252.4108	I	0.19	6
☐ Si	198.8370	I	0.25	7
☐ Si	190.0730	I	0.65	8
☐ Si	221.0892	I	0.28	9
☐ Si	251.9202	I	0.25	10
☐ Si	250.6897	I	0.15	11
☐ Si	252.8508	I	0.16	12
☐ Si	251.4316	I	0.19	13
☐ Si	243.5150	I	0.57	14
☐ Si	205.8130	I	1.07	15

Sortieren nach (15 Linie(n) gefunden):
☒ Element ☐ Wellenlänge ☐ BEC
☒ Auswahl wie Liste sortieren
 Auswahl aufheben

Linien Favoriten

Erweiterter Linienkatalog... Eigene Linien... OK Abbrechen

Das Tabellenblatt **Favoriten** enthält eine Vorauswahl Linien mit den empfohlenen Anwendungen (Schlagwörtern). Bei Auswahl dieser Linien werden gleichzeitig optimierte Methodenparameter in die Methode übertragen. Eigene Linien können ebenfalls diesen Favoriten hinzugefügt werden.

Das Tabellenblatt **Linien** beinhaltet alle wählbaren Linien mit folgenden Angaben:

Tabellenspalte	Beschreibung
Element	Element
Wellenl.	Analysenwellenlänge in nm
Typ	Anzeige des Atomisierungstyp: I: Atomlinie II: Ionenlinie
BEC	Typischer BEC-Wert der Analytlinie Der BEC-Wert (background equivalent concentration) ist die Konzentration des Analyten, die eine dem Untergrund äquivalente Intensität erzeugt. Ein kleinerer Wert entspricht damit einer höheren Empfindlichkeit. Die BEC-Werte wurden unter folgenden Bedingungen ermittelt: axiale Beobachtung, Leistung 1200 W, Plasmagasfluss 12 L/min, Hilfsgasfluss 0,5 L/min, Zerstäubergasfluss 0,6 L/min.
Rang	Rangordnung der Empfehlung der Analysenlinie Die Empfehlung einer Analysenlinie hängt sowohl von der Empfindlichkeit als auch von den möglichen Störungen durch benachbarte Linien anderer Elemente ab. Je weiter vorn sich eine Linie in der Rangfolge befindet, desto besser sind Erfolgschancen, dass mit der Analysenlinie gute Ergebnisse erzielt werden.

Mit den Optionen **Element**, **Wellenlänge** oder **BEC** sortieren Sie die Linientabelle aufsteigend nach chemischem Symbol, Wellenlänge oder BEC.

Wird die Option **Auswahl wie Liste sortieren** aktiviert, werden die Linien in Sortierreihenfolge der Liste (**Sortieren nach**) in die Linientabelle der Methode eingefügt. Ist die Option deaktiviert, werden die Linien in der Reihenfolge der Markierung eingefügt.

Linien auswählen

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Methode | Linien** auf **Anhängen** oder **Einfügen**.
✓ Das Fenster **Element/Linie auswählen** erscheint.
- ▶ Wenn Sie im Periodensystem auf eines der dunkelgrauen Elementsymbole klicken, werden nur die Linien des gewählten Elements in den Tabellen **Linien** und **Favoriten** angezeigt.
Alternativ geben Sie im Feld **Element auswählen** das Elementsymbol ein.
Löschen Sie die Eingabe im Feld **Element auswählen**, um die vollständige Elementliste in der Linientabelle anzuzeigen.
- ▶ Markieren Sie auf dem Tabellenblatt **Favoriten** die Linien entsprechend Ihrer Anwendung oder aktivieren Sie in der Tabelle **Linien** die Kontrollkästchen der gewünschten Linien.
- ▶ Wechseln Sie auf die Karte **Linieninterferenzen** und prüfen Sie die ausgewählten Linien auf bekannte Interferenzen.
- ▶ Fahren Sie so fort, bis Sie für jeden Analyten die Linien ausgewählt haben. Verlassen Sie das Fenster mit **OK**.
✓ Die markierten Linien werden in das Fenster **Methode | Linien** übernommen.

Hinweis:

Wählen Sie während der Methodenerarbeitung mehrere Linien für jeden Analyten aus.

Erweiterter Linienkatalog

Die Linienliste enthält nach der Installation eine Vorauswahl von Analysenlinien. Diese kann durch Analysenlinien aus dem erweiterten Linienkatalog ergänzt werden.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Element/Linie auswählen | Elemente** auf **Erweiterter Linienkatalog**.

- ▶ Markieren Sie in der Liste per Mausklick die gewünschten Linien.
Mit einem erneuten Mausklick auf eine einzelne Linie entfernen Sie die Markierung.
Mit **Auswahl aufheben** entfernen Sie alle Markierungen.
- ▶ Übertragen Sie mit einem Klick auf **Zur Linienliste hinzufügen** die Auswahl in die Linienliste.



HINWEIS

Die aus dem erweiterten Linienkatalog hinzugefügten Linien können nicht mehr aus dem Standardkatalog entfernt werden.

Eigene Analysenlinien anlegen und editieren

Sie können eigene Analysenlinien anlegen und für die Analyse verwenden.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Element/Linie auswählen** auf **Eigene Linien**.
- ▶ Geben Sie im Fenster **Linien editieren** die Daten für **Element** und **Wellenlänge** ein und wählen Sie im Listenfeld **Typ**.
- ▶ Übertragen Sie die Eingaben mit **Hinzufügen** in die eigene Linienliste.
- ▶ Mit Klick auf **Schließen** werden die eigenen Linien in die Linienliste übernommen.

Sie können eigene Linien editieren oder aus der Linienliste wieder entfernen.

- ▶ Um eine Linie in der eigenen Liste zu editieren, markieren Sie die Linie mit Mausklick in der Liste des Fensters **Linien editieren**.
Geben Sie die neuen Liniendaten ein und klicken Sie anschließend auf **Ändern**.
- ▶ Einen markierten Eintrag in der Liste entfernen Sie mit einem Klick auf **Löschen**.

Sehen Sie dazu auch

📖 Eigene Favoritenlinien definieren [▶ 31]

3.2.1.2 Linien simultan messen

Linien, die mit einer Spektrometereinstellung gemeinsam erfasst werden, können Sie simultan messen und so die Analysenzeit verkürzen. Mit der Funktion **Mehrlinienauswertung** können Sie diese Linien in der aktuellen Methode finden und für die Analyse kombinieren.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Methode | Linien** auf **Mehrlinienauswertung**.
Das gleichnamige Fenster mit einer Übersicht möglicher Linienkombinationen erscheint.

Elemente im Fenster Mehrlinienauswertung

Im Fenster **Mehrlinienauswertung** werden die möglichen Linienkombinationen aufgelistet. Ein Balkendiagramm zeigt die Lage der Linien auf dem Detektor für die ausgewählte Listenzeile.

Mehrlinienauswertung

Hauptlinie		Zusätzliche Linie		Messwellenl.	Status
Linie	Wellenl. [nm]	Linie	Wellenl. [nm]	[nm]	
☒ P178.224	178.2240	I178.218	178.2180	178.2210	OK
☒ S182.565	182.5650	B182.581	182.5810	182.5730	OK
☒ Ge265.157	265.1568	Ge265.117	265.1172	265.1606	OK
☒ Ge265.157	265.1568	Hg265.204	265.2040	265.1606	OK

Linienpositionen auf CCD [nm] ☐ Alle Linienpositionen anzeigen

Tabellenspalten / Schaltfläche	Inhalt
Kontrollkästchen	Wenn aktiviert, wird die betreffende Linienkombination in der Methode simultan gemessen.
Hauptlinie	Für die Messung der Linienkombination werden die Messparameter von Hauptlinie verwendet. Linie Linienbezeichnung der Hauptlinie Wellenl. Wellenlänge in nm der Hauptlinie
Zusätzliche Linie	Linie Linienbezeichnung der zusätzlich zu analysierenden Linie Wellenl. Wellenlänge in nm der zusätzlich zu analysierenden Linie
Messwellenl.	Messwellenlänge in nm (Mittelpunkt der Detektorzeile)
Status	Bemerkungen
Keine Linien zusammenfassen	Alle Markierungen löschen Es werden keine Linien in der Methode zusammen gemessen.
Priorität der Linien vertauschen	In einer Linienkombination die Hauptlinie und die zusätzliche Linie vertauschen

Für eine Linienkombination wird automatisch eine Hauptlinie und die zusätzliche Linie bestimmt. Die zusätzlichen Linien übernehmen die Analysenzeit und die Plasmamaparameter von der Hauptlinie. Mit **Priorität der Linien vertauschen** kann diese Zuordnung umgekehrt werden.

3.2.1.3 Eigene Favoritenlinien definieren

Bevorzugte Analysenlinien können Sie einer Favoritenliste mit Hinweisen zur bevorzugten Applikation hinzufügen. Die Angaben zur Analysenlinie werden mit allen linienrelevanten Methodenparametern unter diesem Eintrag gespeichert. Die Favoritenliste steht Ihnen bei jeder Auswahl von Elementlinien zur Verfügung.

- ▶ Markieren Sie die Linie in der Tabelle des Fensters **Methode | Linien** und klicken Sie auf .
- ▶ Editieren Sie im Fenster **Zu Favoriten hinzufügen** die Linienbezeichnung.
- ▶ Im Feld **Kommentar** können Sie weitere Notizen zur Linie eintragen.
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Schlagwörter** eine oder mehrere Applikationen aus. Die Schlagwortliste können Sie durch eigene Einträge ergänzen. Vordefinierte Schlagwörter sind blau gekennzeichnet.
 - ✓ Die Linie steht im Fenster **Element/Linie auswählen** zur Verfügung.

3.2.1.4 Interne Standards definieren

Interne Standards dienen hauptsächlich dazu, nichtspektrale Störungen, die z. B. auf Proben-transportstörungen beruhen, zu korrigieren. Die internen Standards definieren Sie in der Linientabelle des Fensters **Methode | Linien**.

- ▶ Fügen Sie die Analyselinie, die Sie als internen Standard verwenden wollen, in die Linientabelle ein und wählen Sie in der Tabellenspalte **Typ** die Option **Int.Std..**
- ▶ Klicken Sie auf **Interne Std. zuweisen**.
Das Fenster **Interne Std. zuweisen** erscheint.
- ▶ Ordnen Sie in der Tabelle den oder die internen Standards den gewünschten Analyselinien zu. Klicken Sie dafür in der Spalte **Interner Standard** auf die entsprechende Zeile und wählen Sie den internen Standard aus der Liste.
- ▶ Mit einem Klick  übertragen Sie die Einstellungen für eine Analyselinie auf alle in der Tabelle folgenden Linien.
- ▶ Mit **OK** werden die Einstellungen in die Methode übernommen.



3.2.2 Parameter für Plasma und Transferoptik einstellen (Fenster Methode | Plasma)

Im Fenster **Methode | Plasma** nehmen Sie folgende Einstellungen vor:

- Gasflüsse für das Plasma in der Torch
- Auswahl der Beobachtungsrichtung des Plasmas und deren Justierung

Elemente im Fenster Methode | Plasma

Methode — □ ×

Linien Plasma Probenzufuhr Auswertung Kalibrierung Statistik QCS QCC Ausgabe

Sauerstofffluss [L/min]:

Nr.	Linie	Leistung [W]	Plasmagas [L/min]	Hilfsgas [L/min]	Zerstäubergas [L/min]	Richtung	x-Offset [mm]	y-Offset [mm]
1	Al396.152	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
2	As188.979	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
3	As193.698	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
4	Cd214.441	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
5	Cd226.502	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
6	Cr267.716	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
7	Cu324.754	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
8	Fe259.940	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
9	Mn257.610	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0
10	Ni231.604	1200	12.0	0.50	0.60	axial	0	0

Tabellenspalte	Beschreibung
Nr.	Reihenfolge der ausgewählten Linien in der Tabelle
Linie	Bezeichnung der Analyselinie
Leistung	Effektive Plasmaleistung in Watt Eine Erhöhung der Plasmaleistung verbessert die Stabilität des Plasmas, z. B. bei organischen Lösungsmitteln oder stark salzhaltigen Proben als Messlösung. Gleichzeitig erfordert eine größere Plasmaleistung auch einen höheren Plasmagasstrom, um das Schmelzen oder Beschädigungen der Torch zu verhindern.
Plasmagas	Plasmagasstrom in L/min Das Plasmagas fließt zwischen äußerem und innerem Quarzrohr der Torch. Es wird durch die Induktion der Spule in den Plasmazustand versetzt und kühlt gleichzeitig das äußere Rohr der Torch. Ein höherer Plasmagasstrom kann die Lebensdauer der Torch verbessern.
Hilfsgas	Hilfsgasstrom in L/min Das Hilfsgas strömt zwischen innerem Quarzrohr und Injektor. Es unterstützt die Ausbildung des Messkanals und drückt das Plasma weg von der Injektorspitze. Ein höherer Hilfsgasstrom wird z. B. bei Messlösungen mit organischen Lösungsmitteln oder höheren Salzkonzentrationen benötigt.
Zerstäubergas	Zerstäubergasstrom in L/min Das Zerstäubergas wird am Zerstäuber zugeführt. Es zerstäubt die Probe und trägt sie durch Sprühkammer und Injektor in das Plasma.
Richtung	Beobachtungsrichtung des Plasmas Mit der Transferoptik kann die Emissionsstrahlung aus dem Plasma aus zwei Richtungen in das Spektrometer eingekoppelt werden. Je nach Analyselinie kann die optimale Beobachtungsrichtung gewählt werden. radial Die Beobachtung des Plasmas erfolgt von der Seite auf einer bestimmten Höhe über der Spulenoberkante. axial Die Beobachtung erfolgt von oben entlang der Längsachse des Plasmas.

Tabellenspalte	Beschreibung
	Beide Beobachtungsrichtungen können auch abgeschwächt werden. Dadurch wird bei hohen Intensitäten ein Überlauf des Detektors vermieden und der analytische Bereich vergrößert.
x-Offset und y-Offset	Korrektur der Transferoptik in mm Durch das Verschieben der Optik entlang des Messkanals (bei radialer Beobachtung) und aus dem Zentrum des Messkanals (bei radialer und axialer Beobachtung) können unterschiedlich heiße Bereiche gescannt und so die optimale Emissionstemperatur der Analysenlinie erfasst werden. Sie können das Optimum für eine Linie im Fenster Plasma automatisch bestimmen lassen.



HINWEIS

Während der ersten Phase der Methodenentwicklung (Auswahl der geeigneten Linien) sind die voreingestellten Plasma-Parameter ausreichend. Die Änderung dieser Parameter kann nach der Festlegung der Analysenlinien, der nötigen Untergrundkorrekturen und der Bestimmung des Linearitätsbereiches erfolgen, um die Methodenparameter noch weiter zu optimieren.

Sauerstoff verwenden

Für spezielle Applikationen, z. B. organische Matrices, kann als Zusatzgas Sauerstoff zum Einsatz kommen.

► Stellen Sie im Feld **Sauerstofffluss** den Gasfluss ein.

Sehen Sie dazu auch

📖 Justierung und Optimierung des Plasmas [► 111]

3.2.3 Probenzufuhr spezifizieren (Fenster Methode | Probenzufuhr)

Im Fenster **Methode | Probenzufuhr** nehmen Sie für das Analysengerät folgende Einstellungen vor:

- Pumpraten der Pumpe am Analysengerät
- Verwendung des Probengebers
- Spüloptionen

Fenster Methode | Probenzufuhr

Pumpzeiten am ICP-OES Gerät

Option	Beschreibung
Normallauf	Normale Pumpgeschwindigkeit, mit der die Probe während der Analyse transportiert wird Diese Geschwindigkeit sollte eine optimale Zerstäubung der Probe gewährleisten und sich an der empfohlenen Pumprate des verwendeten Zerstäubers orientieren.
Schnellauf	Erhöhte Geschwindigkeit, mit der zwischen den Messpausen gespült (mit Spülflüssigkeit) und die Probe bis zum Zerstäuber transportiert werden kann Mit Einschalten dieser Geschwindigkeit wird die Transportzeit optimiert. Die Geschwindigkeit darf jedoch nicht während der Messzeit genutzt werden, da die homogene Zerstäubung der Probe nicht mehr gewährleistet ist.
Verzögerungszeit	Zeit, vom Beginn des Ansaugens der Probe bis zum tatsächlichen Messstart Diese Zeit wird benötigt, um den gesamten Probenweg bis einschließlich Torch mit der Probe zu spülen und eine stabile Atomisierung zu gewährleisten. Hinweis: Die Verzögerungszeit beinhaltet auch die im Feld davon Schnellaufzeit eingestellte Zeit.
davon Schnellaufzeit	Zeit, mit der die Probe während des Ablaufs der Verzögerungszeit mit hoher Pumprate transportiert wird



HINWEIS

Im Fenster **Methode | Probenzufuhr** stellen Sie die Pumpraten der Schlauchpumpe des ICP-OES Gerätes ein. Die Pumprate am Probengeber zur Förderung der Spülflüssigkeit regulieren Sie mit dem Drehknopf über der Pumpe am Probengeber bzw. bei den Cetac-Samplern im Fenster **Probengeber | Techn. Parameter**.

Probengeber verwenden

Wenn für die Analyse ein Probengeber verwendet wird, aktivieren Sie die Option **Probengeber**. Über **Parameter** gelangen Sie zu den Einstellungen des Probengebers.

Spülen und
Reinigungskontrolle

Während der Abarbeitung einer Sequenz können Sie Spülschritte nach jeder Probenmessung einstellen. Die Spülflüssigkeit wird bei der automatischen Messung aus dem Spülgefäß des Probengebers entnommen. Bei der manuellen Messung erfolgt eine Aufforderung, die Spülflüssigkeit bereitzustellen.

Wenn die Konzentration der Probe den Messbereich der Kalibrierkurve um mehr als 10 % überschreitet, kann der Probenweg und die Torch gespült werden, um Kontaminationen aus der vorangegangenen Messung zu entfernen. Während der Spülung wird zur Kontrolle des Reinigungsergebnisses die Intensität gemessen und so lange gespült, bis die Kontrollgrenze erreicht ist. Die automatische Reinigungskontrolle wird nach der Messung von hochkonzentrierten Proben empfohlen.

Option	Beschreibung
Spülen	aus Spülung ist ausgeschaltet. Es wird nicht automatisch gespült. nach jeder Probe Spülung nach jeder Probe, aber nicht innerhalb einer Statistikserie
Spülzeit	In dieser Zeit wird der Probenweg bis zur Torch gespült.
Spülen nur im Schnelllauf	Der Spülschritt erfolgt nur mit der Schnelllaufzeit. Wenn die Option deaktiviert ist, erfolgt die Spülung zunächst im Schnelllauf über die eingegebene Schnelllaufzeit (davon Schnelllaufzeit) und für den Rest der Spülzeit im Normallauf.
Reinigungs-Kontrolle	Wenn aktiviert, erfolgt automatisch bei Konzentrationsüberschreitungen eine kontrollierte Reinigung
Kontrollgrenze (Ints.)	Wert des Signalpegels, der während der Spülung erreicht werden muss, bevor die nächste Lösung gemessen wird
Linie	Elementlinie, die als Kontrolllinie herangezogen wird

3.2.4 Peaks auswerten (Fenster Methode | Auswertung)

Im Fenster **Methode | Auswertung** definieren Sie die Parameter für die Peakauswertung.



HINWEIS

In der Methodenentwicklung ermitteln Sie die optimalen Einstellungen zur Untergrundkorrektur der jeweiligen Analysenlinie im Fenster **Spektren bearbeiten | Auswertung** und übertragen Sie dann in die Methode.

Fenster Methode | Auswertung

Methode

Linien Plasma Probenzufuhr **Auswertung** Kalibrierung Statistik QCS QCC Ausgabe

Nr.	Linie	Bereich [nm]		Peakausw.	Poly.grd.	Korrektur	Anpassung	UGK-Pixelpos.
		unt.	ob.					
1	Al396.152	-0.22	0.22	3 Pixel	auto	aus	dynamisch	-15,15
2	As188.979	-0.12	0.12	3 Pixel	auto	aus	dynamisch	-15,15
3	As193.698	-0.12	0.12	3 Pixel	auto	aus	dynamisch	-15,15
4	Cd214.441	-0.13	0.13	3 Pixel	auto	aus	dynamisch	-15,15
5	Cd226.502	-0.13	0.13	3 Pixel	auto	aus	dynamisch	-15,15
6	Cr267.716	-0.16	0.16	3 Pixel	auto	aus	dynamisch	-15,15
7	Cu324.754	-0.19	0.19	3 Pixel	auto	aus	dynamisch	-15,15
8	Fe259.940	-0.15	0.15	3 Pixel	auto	aus	dynamisch	-15,15
9	Mn257.610	-0.15	0.15	3 Pixel	auto	aus	dynamisch	-15,15
10	Ni231.604	-0.14	0.14	3 Pixel	auto	aus	dynamisch	-15,15

Spektrale Korrekturen... (keine)

IEC-Faktoren... (keine)

Öffnen... Speichern... OK Übernehmen Abbrechen

Tabellenspalte	Beschreibung
Nr.	Reihenfolge der ausgewählten Linien in der Tabelle
Linie	Bezeichnung der Analyselinie
Bereich	unt. Untere Grenze des Wellenlängenbereichs für die Spektrenauswertung relativ zur Messwellenlänge ob. Obere Grenze des Wellenlängenbereichs relativ zur Messwellenlänge
Poly.grd.	Auswahl des Polynomgrades der Regressionskurve bei statischer Untergrundkorrektur Zur Auswahl stehen Polynomgrade 0., 1., 2. und 3. Ordnung oder eine automatische Suche des Polynomgrades (Option auto).
Peakauswertung	Auswahl der Peakauswertung Pixel Anzahl Pixel, die zur Auswertung der Intensität herangezogen und aus denen schließlich die Messwerte gebildet werden. Die Intensitäten der Auswertepixel werden summiert. Auf diese Weise können Analysenungenauigkeiten durch Schwankungen der Peakposition verringert werden. Empfohlene Anzahl Auswahlpixel: 3 Höhe Interpolation des Peakmaximums Benutzerdef. Freie Auswahl der Auswertungspixel, z. B. für die Auswertung von Multipletts Eingabebeispiel: 50,120-130 bildet die Summe über die Messwerte der Pixel 50 und 120 bis 130
Korrektur	Algorithmus für die spektrale Korrektur (siehe unten). aus Keine spektrale Korrektur vornehmen LSM Spektrale Korrektur mit Methode der kleinsten Quadrate

Tabellenspalte	Beschreibung
	IEC Spektrale Korrektur mit Interelementkorrektur (Inter Element Correction)
Anpassung	Pixel für die Untergrundkorrektur anpassen aus Keine Untergrundkorrektur vornehmen dynamisch Die Pixel für die Untergrundkorrektur werden automatisch durch die Software gefunden. statisch Die Pixel für die Untergrundkorrektur werden durch den Nutzer in der Spalte UGK-Pixelpos. vorgegeben.
UGK-Pixelpos.	Lage der Pixel relativ zum Messpixel bei statischer Anpassung der Untergrundkorrektur Geben Sie die Pixelnummern für die Untergrundkorrektur ein.

Schaltflächen

Schaltflächen	Beschreibung
Spektrale Korrekturen	Analysenlinien ein Modell für die spektrale Korrektur zuweisen
IEC-Faktoren	Analysenlinien eine Interelementkorrektur zuweisen

Sehen Sie dazu auch

- Peak auswerten und Untergrundkorrektur bestimmen – Fenster Spektren bearbeiten | Auswertung [► 87]

3.2.4.1 Spektrale Korrekturen mit Methode der kleinsten Quadrate

Mit spektralen Korrekturen können strukturierte Untergrundemissionen, die z. B. durch die Überlagerung der Analysenlinie durch Linien der Matrixelemente verursacht werden, rechnerisch beseitigt werden. Voraussetzung ist, dass für die betreffende Analysenlinie die möglichen Störspektren in einem Korrekturmodell zusammengefasst wurden.

- Klicken Sie im Fenster **Methode | Auswertung** auf **Spektrale Korrekturen** und stellen Sie für jede Linie separat das geeignete Korrekturmodell ein.
 - ✓ Linien, denen ein Korrekturmodell zugewiesen ist, werden in der Spalte **Korrektur** mit **LSM** gekennzeichnet.

Sehen Sie dazu auch

- Spektrale Störungen beseitigen – Fenster Spektren bearbeiten | Spektrale Korrekturen [► 89]

3.2.4.2 Interelementkorrektur

Mit der Interelementkorrektur können direkte Linienüberlagerungen korrigiert werden. Voraussetzung dafür ist eine weitere, ungestörte Wellenlänge des Interferenten.

Mit einer Einzelementlösung (IEC-Lösung) wird das Verhältnis der beiden Linien des Interferenten (überlagerte Analysenlinie und ungestörte Linie) ermittelt. Der Quotient (IEC-Faktor) wird bei den nachfolgenden Probenmessungen verwendet, um die scheinbare Intensität oder Konzentration des Interferenten auf der Analytlinie zu subtrahieren.

Elemente im Fenster IEC-Elemente zuweisen

IEC-Elemente zuweisen

	Analytlinie	Interferent	IEC-Lösung	IEC-Blindwert	IEC-Faktor	manuell
1	AB96.152	Cr267.716	Cr-IEC-Lösung-Al	CR-IEC-Blindwert-Al		☐

Anhängen Einfügen Löschen IEC-Lösungen...

Interelementkorrektur basiert auf
☒ Intensitäten ☐ scheinbaren Konzentrationen
 Faktoren aus Ergebnissen extrahieren

OK Abbrechen

Bedienelement	Erläuterung
IEC-Lösungen	Eingabe von Bezeichnung, Konzentration, Einheit und Probengeberposition der für die Interelementkorrektur verwendeten IEC-Elementlösungen und -Blindwerte
Anhängen	Neue Zeile am Ende der Liste anhängen
Einfügen	Neue Zeile am markierten Listenplatz einfügen
Löschen	Markierte Zeile löschen
Interelementkorrektur basiert auf	Intensitäten Korrektur erfolgt durch Subtraktion der Intensitäten Konzentration Korrektur erfolgt durch Subtraktion der scheinbaren Konzentrationen
Faktoren aus Ergebnissen extrahieren	Berechnete IEC-Faktoren aus einer geladenen Ergebnisdatei extrahieren

Tabelleninhalte

Tabellenspalte	Beschreibung
Analytlinie	Bezeichnung der gestörten Analysenlinie
Interferent	Bezeichnung der Störlinie
IEC-Lösung	Bezeichnung der Einzelementlösung, die den Interferenten enthält. IEC-Lösungen werden über die Schaltfläche IEC-Lösungen spezifiziert.
IEC-Blindwert	Bezeichnung der Blindwertlösung, die von der Intensität bzw. Konzentration des Interferenten subtrahiert wird. Blindwertlösungen werden über die Schaltfläche IEC-Lösungen spezifiziert.
IEC-Faktor	IEC-Korrekturfaktor Berechnete Faktoren sind grau unterlegt.
manuell	Wenn aktiviert, kann ein IEC-Faktor manuell eingegeben werden. Es werden keine Messlösungen benötigt.

Interelementkorrektur zuweisen

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Methode | Auswertung** auf **IEC-Faktoren**.
 - ✓ Es erscheint das Fenster **IEC-Elemente zuweisen**.
- ▶ Spezifizieren Sie zunächst die IEC-Lösungen. Sie benötigen für jeden Interferenten einen Blindwert und eine IEC-Lösung (Einzelementlösung).
 - Klicken Sie auf **IEC-Lösungen**.

IEC-Lösungen spezifizieren

Typ	Name	Konz.	Einheit	Pos
IEC-Blindwert1	CR-IEC-Blindwert-Al	0	mg/L	1
IEC-Lösung1	Cr-IEC-Lösung-Al	1	mg/L	1

- Fügen Sie in der Tabelle im Fenster **IEC-Lösungen spezifizieren** für jeden Interferenten jeweils einen Blindwert und eine IEC-Lösung mit einem Klick auf **IEC-Blindwert hinzufügen** und **IEC-Lösung hinzufügen** ein.
- Geben Sie in den entsprechenden Tabellenzellen jeweils einen Namen für die Lösungen ein.
- Für die IEC-Lösungen geben Sie in der Spalte **Konzentration** jeweils die Konzentration des Interferenten in der IEC-Lösung ein.
- Bestätigen Sie die Eingaben mit **OK**.
- ▶ Zurück im Fenster **IEC-Elemente zuweisen** wählen Sie in der Tabellenspalte **Analytlinie** die gestörte Linie des Analyten.
- ▶ Wählen Sie in der Spalte **Interferent** die ungestörte Linie des Interferenten.
- ▶ Stellen Sie in den Spalten **IEC-Lösung** und **IEC-Blindwert** die dazugehörige Einzelementlösung und die Blindwertlösung ein.
- ▶ Wählen Sie die Art der Interelementkorrektur, entweder beruhend auf **Intensitäten** oder **scheinbaren Konzentrationen**.
- ▶ Bestätigen Sie die Eingaben mit **OK**.
 - ✓ Linien, denen eine Interelementkorrektur zugewiesen ist, werden in der Linientabelle des Fensters **Methode | Auswertung** in der Spalte **Korrektur** mit **IEC** gekennzeichnet.

Die Messung der IEC-Lösungen muss in der Sequenz nach der Messung der Kalibrierstandards bzw. Berechnung der Kalibrierung erfolgen.

Faktoren manuell eingeben

Statt die Faktoren für die Interelementkorrektur mit der Messung der Einzelementlösung zu bestimmen, können bekannte Faktoren direkt in die Tabelle eingetragen werden:

- ▶ Nach Eingabe der **Analytlinie** und des **Interferent** aktivieren Sie das Kontrollkästchen **manuell**.
- ▶ Tragen Sie in der Spalte **IEC-Faktor** den bereits ermittelten Faktor ein.

3.2.5 Kalibrierparameter eingeben (Fenster Methode | Kalibrierung)

Im Fenster **Methode | Kalibrierung** definieren Sie die Art der Kalibrierung und der Blindwertkorrektur. Im Allgemeinen werden für die Kalibrierung Mehrelementstandards verwendet, die Sie als Stockstandards eingeben können.

Fenster Methode | Kalibrierung

Methode

Linien Plasma Probenzufuhr Auswertung **Kalibrierung** Statistik QCS QCC Ausgabe

Kalibrierverfahren: Standard-Verfahren
 Blindwertkorrektur: auf Intensitätsbasis
 Std.-Herstellung: Manuell hergestellt

Nr.	Linie	Kalb.-Funktion	Achsenabs.	Wichtung	Prüfung	Einheit
1	Al396.152	linear	Berechnen	1/Konz	keine	µg/L
2	As188.979	linear	Berechnen	1/Konz	keine	µg/L
3	As193.698	linear	Berechnen	1/Konz	keine	µg/L
4	Cd214.441	linear	Berechnen	1/Konz	keine	µg/L
5	Cd226.502	linear	Berechnen	1/Konz	keine	µg/L
6	Cr267.716	linear	Berechnen	1/Konz	keine	µg/L
7	Cu324.754	linear	Berechnen	1/Konz	keine	µg/L
8	Fe259.940	linear	Berechnen	1/Konz	keine	µg/L
9	Mn257.610	linear	Berechnen	1/Konz	keine	µg/L
10	Ni231.604	linear	Berechnen	1/Konz	keine	µg/L

Stocks... Kalibriertabelle...

Öffnen... Speichern... OK Übernehmen Abbrechen

Kalibrierverfahren auswählen

Wählen Sie in der Liste **Kalibrierverfahren** das Verfahren aus:

Kalibrierverfahren	Beschreibung
Keine Kalibrierung	Die Probenergebnisse werden ausschließlich als Intensität ausgegeben. Eine Kalibrierung ist für diese Messungen nicht erforderlich. Auf der Karte Kalibrierung sind keine weiteren Einträge erforderlich. Die Sequenzliste sollte sinnvollerweise nur aus Proben bestehen.
Standard-Verfahren	Die Kalibrierung erfolgt mit Proben, die den Analyten in bekannter Konzentration enthalten (Standards). Die Proben unbekannter Konzentration werden gegen diese Kalibrierung gemessen.
Standard-Additions-Verfahren	Die unbekannte Probe wird mit unterschiedlichen Mengen einer bekannten Probe aufgestockt und gemessen. Als Ergebnis einer Ausgleichung ergibt sich die Konzentration des Analyten in der Probe.
Additions-Kalibrieren	Die Kalibrierkurve, mit deren Hilfe weitere Konzentrationen bestimmt werden können, wird durch Standard-Addition erzeugt. Gleichzeitig wird damit die Konzentration der ersten Probe ermittelt.

Herstellung der Standards

Option	Beschreibung
Manuell hergestellt	Die Kalibrierstandardlösungen werden manuell bereitgestellt.
durch Verdünnungssystem	Nur bei Verwendung des Probengebers Cetac SDXHPLD mit automatischer Verdünnungsfunktion Die Herstellung der Standards erfolgt durch Verdünnung eines Stocks im Vortexer (Mischgefäß) des Probengebers.

Blindwertkorrekturen

Standardadditionsverfahren und Additionskalibrieren erfordern eine Blindwertkorrektur. Wählen Sie in der Liste **Blindwertkorrektur** das Verfahren:

Korrektur	Beschreibung
auf Intensitätsbasis	Bei jeder Standardaddition wird der Blindwert mitgemessen und der gemessene Intensitätswert vor der Berechnung der Ausgleichsgeraden von allen Messwerten subtrahiert. Dieses Verfahren war lange Zeit üblich, führt aber bei vielen Realproben zu fehlerhaften Ergebnissen.
auf Konzentrationsbasis	Mit der Blindwertlösung wird zunächst eine eigene Standardaddition mit den gleichen Konzentrationszugaben wie bei der Probe durchgeführt. Die ermittelte Konzentration wird automatisch von allen anderen durch Standardaddition bestimmten Konzentrationen (Konz. 2) subtrahiert.

Linien-spezifische Kalibrierparameter

Die linien-spezifischen Parameter werden in der Tabelle eingestellt:

Tabellenspalte	Beschreibung
Nr.	Reihenfolge der ausgewählten Linien in der Tabelle
Linie	Bezeichnung der Analyselinie
Kalib.-Funktion	Nur für Kalibrierung nach Standardverfahren linear Linearer Verlauf der Kalibrierfunktion $y = a + bx$ nichtlinear ratio. Nichtlinearer Verlauf der Kalibrierfunktion beschrieben durch eine gebrochenrationale Funktion $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$ nichtlinear quadr. Nichtlinearer Verlauf der Kalibrierfunktion beschrieben durch eine quadratische Funktion $y = a + bx + cx^2$ automatisch Für die Kalibrierung wird jeweils eine lineare und eine nichtlineare Funktion berechnet. Die Summen der quadrierten Residuen werden verglichen (Mandel-Test). Ist die Summe für die nichtlineare Funktion signifikant geringer als jene für die lineare Funktion, wird der nichtlineare Verlauf der Kalibrierkurve gewählt, anderenfalls wird der lineare Verlauf der Kalibrierkurve gewählt. Die nichtlineare Funktion wird im Fenster Optionen Kalibrierung gewählt. Als Standardeinstellung ist hier die gebrochen rationale Funktion vorgesehen. Hinweis: Für das Standardadditionsverfahren und die Additionskalibrierung sind nur lineare Kurvenverläufe zugelassen.
Achsenabs.	Null setzen Die Kalibrierkurve wird exakt durch den gemessenen Nullwert-Punkt gelegt. Berechnen Der Nullwert wird wie jeder andere Kalibrierpunkt in die Berechnung einbezogen.
Wichtung	keine Alle Kalibrierpunkte gleich berücksichtigen. 1/Konz Kalibrierpunkte mit kleineren Konzentrationen stärker berücksichtigen.

Tabellenspalte	Beschreibung
	1/SD Punkte mit geringeren Abweichungen innerhalb der mehrfach wiederholten Messungen eines Standards stärker berücksichtigen (Voraussetzung: Mittelwert-Statistik aktiviert). 1/(SD*Konz) Kombination aus den Berechnungsverfahren 1/Konz und 1/SD
Prüfung	Die Software ermöglicht eine automatische Überprüfung von ermittelten Kalibrierkurven anhand eines Prognosebandes, das auf der Basis einer manuell gewählten statistischen Sicherheit berechnet wird. keine Alle gemessenen und nicht gelöschten Kalibrierpunkte werden zur Kurvenberechnung genutzt. Kalibrierpunkte werden weder gekennzeichnet noch eliminiert. Ausreißer elim. Wenn Kalibrierpunkte außerhalb des berechneten Prognosebandes liegen, wird eine Ausreißereliminierung mittels F-Test durchgeführt (Prüfung, ob die Nichtberücksichtigung eines Punktes zu einer signifikanten Verbesserung der Reststreuung führt): ■ Mit dem Kalibrierpunkt, der am weitesten außerhalb des Prognosebandes liegt, wird ein F-Test durchgeführt. Sofern die Nichtberücksichtigung dieses Punktes zu keiner signifikanten Verbesserung der Reststreuung führt, wird der Punkt berücksichtigt und die Kalibrierkurve nicht weiter optimiert. ■ Führt die Nichtberücksichtigung zu einer signifikanten Verbesserung, wird der Kalibrierpunkt zum Ausreißer erklärt (in der Tabelle mit "!", in der Grafik rot gekennzeichnet) und die Kalibrierkurve ohne diesen Punkt neu berechnet. ■ Für den nunmehr am stärksten vom Prognoseband abweichenden Punkt wird erneut ein F-Test durchgeführt. Das Verfahren wird so lange wiederholt, bis alle Ausreißer entfernt sind. ■ Alle außerhalb des neuen Prognosebandes liegenden Kalibrierpunkte, die nicht als Ausreißer eliminiert wurden, werden in der Tabelle mit einem "?" und in der Grafik blau gekennzeichnet.
Einheit	Einheiten für die Konzentration für jedes Element separat eingeben.

Mit  übernehmen Sie den Wert der aktuellen Zelle in alle nachfolgenden Zellen der Tabellenspalte. Mit der Schaltfläche **Kalibriertabelle** öffnen Sie die Tabelle zur Eingabe der Standardkonzentration.

Sehen Sie dazu auch

 Optionen zum Analysenablauf [ 141]

3.2.5.1 Stockstandards spezifizieren

Wenn Sie Stockstandards verwenden, können Sie statt der Konzentrationen jeweils die Verdünnungsfaktoren für die einzelnen Standards eingeben. Dafür müssen Sie die Stockstandards vor Ausfüllen der Kalibriertabelle spezifizieren, wobei mehrere Stocks mit verschiedenen Elementen und Konzentrationen verwendet werden können.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Methode | Kalibrierung** auf **Stocks**.
 - ✓ Es öffnet sich das Fenster **Stock standards**.
- ▶ Fügen Sie mit Klick auf **Neu** oder **Einfügen** eine neue Zeile in die Stock-Liste ein. Max. Anzahl Stockstandards: 20

- ▶ Bei der Option **Aus Stock-Datenbank** wählen Sie in der Liste die Bezeichnung des Stocks. Die Stock-Datenbank wird im Fenster **Daten | Stock-Std/QC-Proben** verwaltet.
- ▶ Wählen Sie die Option **Manuell eingeben**, wenn Sie keinen Stock aus der Datenbank verwenden.
- ▶ Zurück im Fenster **Stock standards** tragen Sie die Daten des Stocks direkt in die Tabelle ein:

Tabellenspalte	Beschreibung
Name	Name des Standards
Elemente und Konzentrationen	Elemente und dazugehörige Konzentrationen des Standards Mit Konzentrationen öffnen Sie eine Liste zur Eingabe der Konzentrationen. Alternativ geben Sie die Werte in folgendem Eingabeformat direkt in die Zeile im Format <i>Elementsymbol-Leerzeichen-Konzentration</i> ein, z. B. Nickel mit einer Konzentration von 0,5 mg/L: Ni 0.5 Weitere Elemente und ihre Konzentrationen werden einfach durch Semikolon getrennt angefügt. Ein Beispiel für das Eingabeformat ist unter der Stock-Liste aufgeführt.
Einheit	Konzentrationseinheit der Elemente im Standard

Sehen Sie dazu auch

📖 Datenbanken für Stocks und QC-Proben verwalten [▶ 135]

3.2.5.2 Kalibriertabelle eingeben

Die Standarddaten geben Sie in der Kalibriertabelle ein.

Fenster Kalibriertabelle

Kalibriertabelle

— □ ×

Anzahl der Standards
Kalibrier-Null-Standards:
Kalibrier-Standards:

☐ Deaktivierte Linien erlauben
Deaktivieren von einzelnen Linien aus Stockverdünnungen durch Löschen des Felds. Reaktivieren mit Plus-Taste (+).

Name	Einheit	Kal.-Null1	Kal.-Std.1	Kal.-Std.2
Position		101	102	103
Stock				
Verd.faktor				
Recal.				
Ar420.068				
As188.979	µg/L	0	37.5	112.5
Cd214.441	µg/L	0	12.5	37.5
Hg184.886	µg/L	0	75	225
Pb220.353	µg/L	0	12.5	37.5
Co237.863	µg/L	0	125	375
Ni231.604	µg/L	0	500	1500
V292.464	µg/L	0	250	750
Ag328.068	µg/L	0	375	1125
Se196.028	µg/L	0	375	1125
Tl190.796	µg/L	0	20	60
Au242.795	µg/L	0	250	750

Markierte Spalte verschieben:

◀ ▶

↕

↕

☐ inc.

OK

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Methode | Kalibrierung** auf **Kalibriertabelle**.
- ▶ Geben Sie in den Eingabefeldern zunächst die Anzahl Standards ein. In Abhängigkeit vom gewählten Kalibrierverfahren sind verschiedene Standards zu wählen.

Beim Standardverfahren sind die Anzahl der Kalibrierstandards (**Kalibrier-Standards**) und Kalibrier-Nullstandards (**Kalibrier-Null-Standards**) einzugeben. Es können dabei mehrere Nullstandards eingegeben werden, z. B. wenn die zu untersuchenden Elemente in verschiedenen Lösungsmitteln vorliegen. In diesem Fall ist die Konzentration bei den betreffenden Elementlinien "0" zu setzen, die anderen Spalten bleiben leer.

Für **Standard-Additions-Verfahren** und **Additions-Kalibrieren** muss jeweils die Anzahl **Additions-Standards** eingegeben werden.

- ▶ Für die Herstellung der Standards durch ein angeschlossenes Verdünnungssystem müssen Sie für jeden Kalibrierstandard in der Zeile **Stock** den verwendeten Stockstandard und in der Zeile **Verd.faktor** den Verdünnungsfaktor wählen.
Für die Verdünnung können folgende Faktoren gewählt werden: 1, 2, 5, 10, 15, 20, 25, 50, 75, 100, 200, 250, 500, 1000, 1500, 2000, 2500, 5000. Die Anzahl der Verdünnungsfaktoren wird entsprechend den Bereichseinstellungen im Fenster **Probengeber | Verdünnung** eingeschränkt. Für die Verdünnungsfaktoren 1 ... 100 erfolgt die Verdünnung einstufig, bei höheren Werten zweistufig.
- ✓ Nach Auswahl von Stockstandard und Verdünnungsfaktor berechnet die Software automatisch die Konzentration für jeden Kalibrierstandard und jede Analysenlinie.
- ▶ Nicht zu messende Standardkonzentrationen können nach Aktivierung von Kontrollkästchen **Flexible Auswahl** manuell aus der Tabelle gelöscht werden.
Zur Reaktivierung der gelöschten Einträge, geben Sie in die betreffenden Felder ein Plus (+) ein und bestätigen dies mit der Eingabetaste oder durch Zellenwechsel mit der Maus.
- ▶ Wenn Sie die Kalibrierstandards manuell herstellen, können Sie die Konzentrationen der Kalibrierstandards ebenfalls durch Auswahl eines Stockstandards und Eingabe eines Verdünnungsfaktors von der Software berechnen lassen.
Alternativ geben Sie für jeden Standard in der Tabelle die Konzentration für jede Analysenlinie ein.
- ▶ Bei manuell hergestellten Standards können Sie in der Zeile **Pos** die Position der Standards im Probengeber festlegen.
Wird der Probengeber nicht verwendet, bleiben die Einträge in dieser Zeile unberücksichtigt.
Bei Probengebern mit Verdünnungsfunktion wird die Position des Stocks aus der Stock-Datenbank übernommen.
Die Belegung der Probengeberpositionen kann in der Sequenz eingegeben oder verändert werden.
- ▶ Für Rekalibrierungen, die als Sequenzaktion oder als Folge von QC-Aktionen spezifiziert wurden, müssen mindestens ein Kalibrier-Nullstandard und ein Kalibrierstandard oder mindestens zwei Kalibrierstandards in der Zeile **Rekal.** ausgewählt werden. Wenn mehr als zwei Rekalibrierstandards für eine Linie ausgewählt wurden, wird jeweils der niedrigste und der höchste Rekalibrierstandard verwendet.

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Stockstandards spezifizieren [▶ 43]
- 📖 Verdünnungsfunktion [▶ 119]

3.2.6 Statistische Auswertungen spezifizieren (Fenster Methode | Statistik)

Im Fenster **Methode | Statistik** wählen Sie die statistischen Verfahren, die auf die Kalibrierung und die Probenmessung anzuwenden sind. Die Einstellungen sind unabhängig vom gewählten Kalibrierverfahren und bleiben bei jedem Verfahrenswechsel erhalten.

Fenster Methode | Statistik

Art der Statistik

Option	Beschreibung
Mittelwert-Statistik	Mittelwert und Standardabweichung berechnen Fehlerstatistik nach dem arithmetischen Mittel: Die Probe wird nach den Leerzyklen mehrfach gemessen. Aus den Messergebnissen werden das arithmetische Mittel sowie die Standardabweichung und die relative Standardabweichung berechnet.
Median-Statistik	Median und Spannweite (R) berechnen. Fehlerstatistik nach dem Medianverfahren: Die Probe wird nach den Pseudomessungen mehrfach gemessen, die Messwerte werden nach Größe sortiert. Der angezeigte Medianwert ist dann: ■ Bei ungerader Anzahl von Messzyklen der Wert in der Mitte der sortierten Liste ■ Bei gerader Anzahl von Messzyklen der Mittelwert aus den beiden Messwerten in der Mitte der sortierten Liste Da die kleinsten und größten Einzelmesswerte keinen Einfluss auf das Messergebnis haben, ist die Medianstatistik für die Eliminierung von Ausreißerwerten geeignet.

Anzahl Wiederholmessungen

Option	Beschreibung
Wiederholungen/Probe	Anzahl Messwiederholungen je Probe
Wiederholungen/Kalib.-Probe	Anzahl Messwiederholungen je Kalibrierprobe
Wiederholungen/QC	Anzahl Messwiederholungen je QC-Messung
Pseudomessungen	Anzahl der Wiederholung von Pseudomessungen Pseudomessungen sind Messungen mit Probe, die vor der Statistikserie eingeschoben werden und nicht für die Berechnung des Ergebnisses herangezogen werden.

Grubbs-Ausreißertest

Für Mittelwert-Statistik mit mindestens 3 Messwiederholungen je Probe

Status	Beschreibung
Deaktiviert	Alle Werte der Statistikserie für die Berechnung des Mittelwerts heranziehen.
Aktiviert	Ausreißer werden eliminiert und nicht zur Berechnung der Statistikgrößen herangezogen. Die so ermittelten Mittelwerte werden in der Ausgabetafel mit "!" markiert.

Vertrauensbereichs-Berechnung

Grundlage für die Berechnung des Vertrauensbereichs ist die gewählte statistische Sicherheit, siehe unten. In den Vertrauensbereich gehen neben dem Fehler bei der Probenmessung vor allem der Fehler der Kalibrierung ein, so dass auch bei ausgeschalteter Statistikfunktion ein Wert angegeben wird.

Einstellung	Beschreibung
aus	Vertrauensbereich nicht berechnen
absolut	Vertrauensbereich in absoluten Werten anzeigen (in der Maßeinheit der Konzentration)
relativ	Vertrauensbereich in relativen Werten anzeigen (in Prozent des Konzentrationswertes)

Wahrscheinlichkeit

Die **Wahrscheinlichkeit** (wählbar zwischen 68,3 ... 99,9%) wird zur Berechnung des Vertrauensbereichs der Proben und der Prognosebänder der Kalibrierkurven verwendet.

Sehen Sie dazu auch

📖 Qualitätskontrolle spezifizieren (Fenster Methode | QCS) [► 47]

3.2.7 Qualitätskontrolle spezifizieren (Fenster Methode | QCS)

Im Fenster **Methode | QCS** spezifizieren Sie die Qualitätskontrollproben (QC-Proben). Im Verlauf der Sequenz werden dann an vorbestimmten Stellen Kontrollmessungen mit Proben eingeschoben, die bekannte Messergebnisse liefern sollten. Dabei ist entweder der Absolutwert (Extinktion/Konzentration) oder die Konzentrationsdifferenz zur vorangegangenen Probe bekannt. Sie können für die Qualitätskontrolle verschiedene Probentypen definieren.

Die Ergebnisse der Kontrollmessungen können auf Qualitätskontrollkarten (QC-Karten) automatisch dokumentiert werden. Das System der QC-Karten dient der Qualitätsüberwachung über einen längeren Zeitraum. Die QC-Karten werden mit der Methode gespeichert und bei jeder Messung mit der Methode fortgeführt.

Methode

Linien Plasma Probenzufuhr Auswertung Kalibrierung Statistik **QCS** QCC Ausgabe

Typ: Name: Reaktion:

☐ Blindwertkorrektur

Nr.	Linie	Erw. Konz.	Untere Abweich. [%]	Obere Abweich. [%]	QC-Karte	Reakt.I	Einheit
1	Ar420.068						
2	As188.979	112.5	20	20	-	-	µg/L
3	Cd214.441	37.5	20	20	-	-	µg/L
4	Hg184.886	225	20	20	-	-	µg/L
5	Pb220.353	37.5	20	20	-	-	µg/L
6	Co237.863	375	20	20	-	-	µg/L
7	Ni231.604	1500	20	20	-	-	µg/L
8	V292.464	750	20	20	-	-	µg/L
9	Ag328.068	1125	20	20	-	-	µg/L
10	Se196.028	1125	20	20	-	-	µg/L
11	Ti190.796	60	20	20	-	-	µg/L

Elemente im Fenster
Methode | QCS

Elemente	Beschreibung
Typ	Diese QC-Probe wird in der Linientabelle angezeigt. Die Parameter der QC-Probe können hier editiert werden.
Name	Name der angezeigten QC-Probe
Reaktion	So wird verfahren, wenn die Ergebnisse der QC-Probe die vereinbarten Grenzen überschreiten oder unterschreiten
Neu/Ändern	Neue QC-Probe definieren oder eine bereits vorhandene QC-Probe ändern
Löschen	Angezeigte QC-Probe löschen
Blindwertkorrektur	Optional kann für alle QC-Proben, mit Ausnahme von QC-Standards und QC-Blindwerten, eine Blindwertkorrektur aktiviert werden
Einheit	Angabe der Konzentrationseinheit
Übersicht QC-Proben	Eine Liste mit den linienspezifischen Parametern aller QC-Proben öffnen
Linientabelle	In der Tabelle werden die Parameter der im Listenfeld Typ ausgewählten QC-Probe angezeigt

Typen der QC-Proben

Folgende Typen der QC-Proben können Sie spezifizieren:

Option	Beschreibung
QC-Probe	Eine Probe als QC-Probe definieren Die Konzentrationen der QC-Probe können Sie entweder aus der Datenbank laden oder direkt eingeben. aus Datenbank Im danebenstehenden Listenfeld die betreffende QC-Probe auswählen. Die Datenbank der QC-Proben verwalten Sie im Fenster Methode QCS. manuell eintragen Die Konzentrationen der QC-Probe direkt in die Tabelle eintragen Max. Anzahl QC-Proben: 50

Option	Beschreibung
QC-Std.	Einen Standard als QC-Probe definieren Als QC-Standard kann jeder in der Kalibriertabelle definierte Standard verwendet werden. Mögl. Anzahl QC-Standards = Anzahl Standards in der Kalibriertabelle (max. 65)
QC-Blindwert	Die Blindprobe als QC-Probe definieren
QC-Stock	Eine aufgestockte Probe als QC-Probe definieren Bei dieser Option werden die Messergebnisse einer definierten Konzentrationszugabe zu einer oder mehreren Proben kontrolliert. Dazu ist nach einer beliebigen Probe in der Probentabelle eine QC-Stock-Probe zu definieren (QC-Stock-Probe = Probe + Aufstockung mit einer Lösung bekannter Konzentration). Nach der Messung wird die Konzentrationsdifferenz (Konz1 von Probe und QC-Stock-Probe) mit dem hier spezifizierten erwarteten Konzentrationszuwachs (Erw.Konz.-Zuwachs) verglichen und die Wiederfindungsrate berechnet.

Wenn keine zertifizierten Kontrollproben zur Verfügung stehen, kann die Qualitätskontrolle auch mit Hilfe von Doppelbestimmungen durchgeführt werden:

Option	Beschreibung
QC-Trend	Der gemessene Konzentrationswert wird beim ersten Auftauchen der Kontrollprobe im Analysenablauf gespeichert. Beim nächsten Auftreten wird die Konzentrationsdifferenz gebildet und ausgewertet. Zweckmäßigerweise sollten diese Kontrollproben am Anfang und Ende einer Probenserie gemessen werden.
QC-Matrix	Eine Analysenprobe wird vor der Probenvorbereitung gesplittet. Die beiden Teile durchlaufen getrennt alle Schritte der Probenvorbereitung und werden getrennt als QC-Trend und QC-Matrix auf dem Probengeber platziert. Die Differenz zwischen den Konzentrationen wird ausgewertet.

Verfahrensweise bei Überschreitung der Fehlergrenzen

Für die QC-Probentypen können Sie verschiedene Verfahren als Reaktion auf die Überschreitung der Fehlergrenzen auswählen:

Option	Beschreibung
QC-Probe	nur markieren
QC-Std.	Der gemessene Wert wird in der Probentabelle gekennzeichnet, das Messprogramm fährt mit der nächsten Probe fort. rekalib. + fortsetzen Es erfolgt eine Rekalibrierung. Anschließend wird die QC-Probe erneut gemessen. Liegt die QC-Probe nun im Bereich, wird die Messung mit der nächsten Probe fortgesetzt, anderenfalls das Messprogramm unterbrochen. kalib. + fortsetzen Es erfolgt eine neue Kalibrierung. Anschließend wird die QC-Probe erneut gemessen. Liegt die QC-Probe nun im Bereich, wird die Messung mit der nächsten Probe fortgesetzt, anderenfalls das Messprogramm unterbrochen. rekalib. + neu messen Es erfolgt eine Rekalibrierung. Anschließend wird die QC-Probe erneut gemessen. Liegt die QC-Probe außerhalb des Bereichs wird das Messprogramm unterbrochen. Liegt sie im Bereich, werden alle Pro-

Option	Beschreibung
	ben nach der letzten QC-Probe bzw. der letzten (Re-) Kalibrierung neu gemessen. Liegt die QC-Probe dann erneut außerhalb der Fehlergrenze, wird das Messprogramm unterbrochen. kalib. + neu messen Es erfolgt eine neue Kalibrierung. Anschließend wird die QC-Probe erneut gemessen. Liegt die QC-Probe außerhalb des Bereichs, wird das Messprogramm unterbrochen. Liegt sie im Bereich, werden alle Proben nach der letzten QC-Probe bzw. der letzten (Re-) Kalibrierung neu gemessen. Liegt die QC-Probe dann erneut außerhalb der Fehlergrenze, wird das Messprogramm unterbrochen. nächste Methode Das aktuelle Messprogramm wird abgebrochen und das Messprogramm der nächsten Methode gestartet, wenn die Sequenz eine weitere Methode enthält. Stopp Das aktuelle Messprogramm wird abgebrochen.
QC-Stock	nur markieren rekalib. + fortsetzen kalib. + fortsetzen nächste Methode Stopp
QC-Blindwert	nur markieren nächste Methode Stopp
QC-Trend	Keine Reaktion
QC-Matrix	

Linien-spezifische Parameter
der QC-Probentypen

Die linien-spezifischen Parameter der QC-Probentypen tragen Sie in der Linientabelle ein.

Option	Beschreibung
Linie	Namen der Analyselinie
Erw. Konz.	Für QC-Probe und QC-Std. Erwartete Konzentration in der QC-Probe
Erw.Konz.-Zuwachs	Für QC-Stock Erwarteter Konzentrationszuwachs von Probe zu aufgestockter Probe Wert entsprechend aufgestockter Menge und Konzentration der Stocklösung eingeben.
Erw.Ints.	Für QC-Blindwert Erwartete Intensität in QC-Blindwert
Unt. Grenze	Unterer Bereich der Fehlergrenze in Prozent
Ob. Grenze	Oberer Bereich der Fehlergrenze in Prozent
QC-Karte	Wenn mit "+" markiert, so wird das Ergebnis der Qualitätskontrolle für diese Linie auf der QC-Karte der Ergebnisliste ausgegeben.
Reakt.	Diese Verfahrensweise soll zur Anwendung kommen, wenn die Fehlerbereichsgrenze überschritten ist. Wenn mehrere Linien mit "+" markiert sind, reicht es aus, dass für eine dieser Linien die Fehlergrenzen überschritten sind, um die Reaktion auszulösen (ODER-Logik).

Option	Beschreibung
Einheit	Für QC-Std. Einheit der erwarteten Konzentration

Parameter für QC-Proben eingeben

- ▶ Klicken Sie auf **Neu/Ändern**, um einen neuen Parametersatz für einen QC-Probentyp anzulegen oder den ausgewählten Probentyp zu editieren.
 - ✓ Es öffnet sich das Fenster **QC Probentyp hinzufügen/ändern**.
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** den Probentyp aus.
- ▶ Nur QC-Proben: Wenn Sie mehrere QC-Proben definieren, vergeben Sie im Listefeld eine fortlaufende Nummer.
- ▶ Nur QC-Std.: Wählen Sie im Listefeld die Nummer des Standards entsprechend der Reihenfolge in der Kalibriertabelle.
- ▶ Tragen Sie in der Tabelle die linienspezifischen Parameter ein.
 - ✓ Die QC-Proben sind in der Methode definiert.

Sehen Sie dazu auch

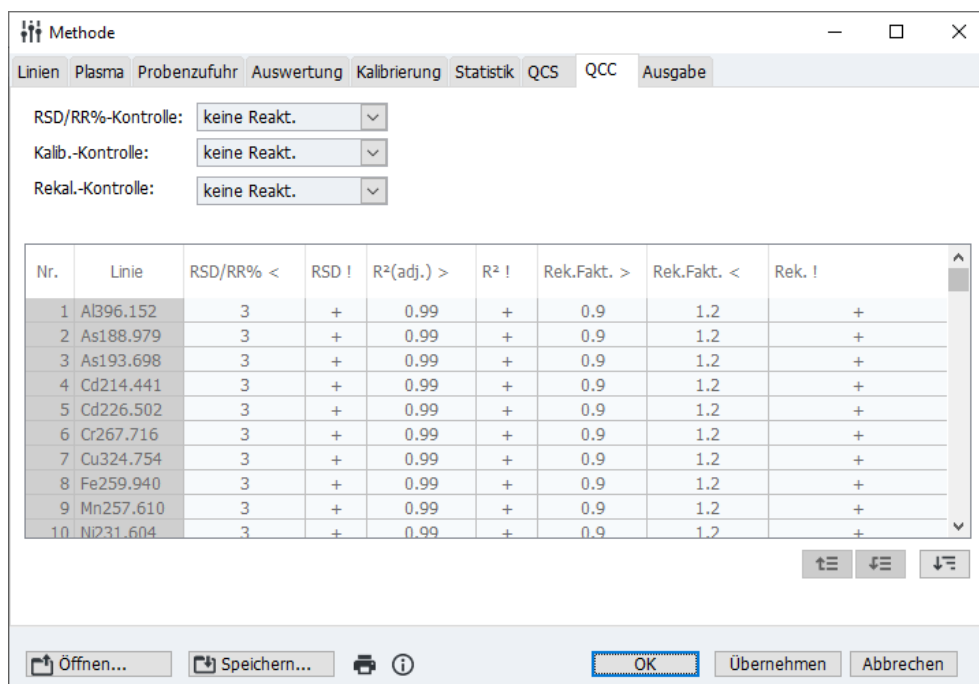
 Datenbanken für Stocks und QC-Proben verwalten [► 135]

3.2.8 Qualitätskontrolle spezifizieren (Fenster Methode | QCC)

Im Fenster **Methode | QCC** spezifizieren Sie die Parameter für die Qualitätskontrolle während des Sequenzablaufs:

- Relative Standardabweichung (Mittelwertstatistik) bzw. relative Spannweite (Medianstatistik)
- Die Kalibrierkontrolle
- Rekalibrierkontrolle
- Verfahrensweise bei Überschreitung der Fehlergrenzen

Sie können verschiedene Kontrollen mit verschiedenen Reaktionen gleichzeitig wählen.



Methode

Linien Plasma Probenzufuhr Auswertung Kalibrierung Statistik QCS **QCC** Ausgabe

RSD/RR%-Kontrolle: ▼

Kalib.-Kontrolle: ▼

Rekal.-Kontrolle: ▼

Nr.	Linie	RSD/RR% <	RSD !	R ² (adj.) >	R ² !	Rek.Fakt. >	Rek.Fakt. <	Rek. !
1	Al396.152	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
2	As188.979	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
3	As193.698	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
4	Cd214.441	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
5	Cd226.502	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
6	Cr267.716	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
7	Cu324.754	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
8	Fe259.940	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
9	Mn257.610	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
10	Ni231.604	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+

Öffnen... Speichern...   OK Übernehmen Abbrechen

Arten der Qualitätskontrolle

Kontrolltyp	Beschreibung
RSD/RR%-Kontrolle	Kontrolle der relativen Standardabweichung bzw. relativen Spannweite
Kalib.-Kontrolle	Kontrolle des Bestimmtheitsmaßes der Kalibrierung
Rekal.-Kontrolle	Kontrolle des Rekalibrierfaktors

Reaktionen bei der Überschreitung von Fehlergrenzen

Reaktion	Beschreibung
keine	Betreffende Kontrolle nicht vornehmen
nur markieren	Bei Überschreiten der Fehlergrenzen die betreffende Probe, Kalibrierung oder Rekalibrierung in der Probentabelle markieren
wiederh. + fortsetzen	Nur bei RSD/RR%-Kontrolle Bei Überschreitung der seriellen Präzisionsgrenze die Messung der betreffenden Probe wiederholen, bevor die nächste Probe gemessen wird
kalib. + fortsetzen	Nur Kalib.-Kontrolle und Rekal.-Kontrolle Bei Überschreitung der Fehlergrenzen für die Kalibrierung bzw. des Rekalibrierfaktors eine neue Kalibrierung vornehmen und anschließend die Messung mit der nächsten Probe fortsetzen
nächste Methode	Nur Kalib.-Kontrolle und Rekal.-Kontrolle Bei Überschreitung der Fehlergrenzen wird das aktuelle Messprogramm abgebrochen und das Messprogramm der nächsten Elementlinie in der Methode gestartet. Diese Option ist nur wählbar, wenn mehr als eine Elementlinie in der Methode spezifiziert wurde.
Stopp	Nur Kalib.-Kontrolle und Rekal.-Kontrolle Bei Überschreitung der Fehlergrenzen die Messung der aktuell laufenden Methode beenden.

Linien spezifische Parameter der Qualitätskontrollen

In der Tabelle tragen Sie die linien spezifischen Parameter der verschiedenen Qualitätskontrollen ein. Für jede analysierte Linie wird festgelegt, ob sie zur Kontrolle herangezogen wird. Wenn eine oder mehrere der kontrollierten Linien die Fehlergrenzen überschreiten, wird die oben vereinbarte Reaktion ausgelöst.

Qualitätskontrolle	Parameter / Bedeutung
RSD/RR%-Kontrolle	RSD/RR% < Bei relativen Standardabweichungen bzw. Spannweiten größer oder gleich dem eingegebenen Wert wird mit der vereinbarten Verfahrensweise reagiert. RSD ! Bei mit "+" markierten Linien wird RSD% bzw. RR% kontrolliert.
Kalib.-Kontrolle	R²(adj.) Das Bestimmtheitsmaß der Regression R ² (adj.) muss größer oder gleich dem eingegebenen Wert sein. Im anderen Fall wird mit der vereinbarten Verfahrensweise reagiert. R² ! Bei mit "+" markierten Linien wird R²(adj.) kontrolliert.
Rekal.-Kontrolle	Rek.Fakt. > Obere Grenze des Rekalibrierfaktors Rek.Fakt. < Untere Grenze des Rekalibrierfaktors Bei Kalibrierfaktoren außerhalb dieser vorgegebenen Grenzwerte, wird die Reaktion ausgelöst.

Qualitätskontrolle	Parameter / Bedeutung
	Rek. ! Bei mit "+" markierten Linien wird der Rekalibrierfaktor geprüft.

Sehen Sie dazu auch

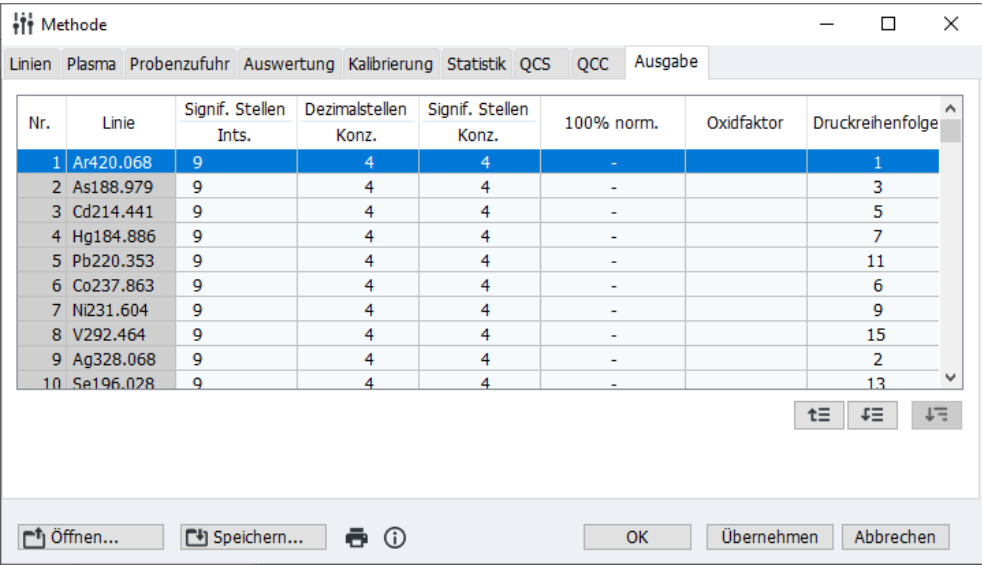
📖 Statistische Auswertungen spezifizieren (Fenster Methode | Statistik) [► 45]

3.2.9 **Ausgabeformate für Ergebnisse spezifizieren (Fenster Methode | Ausgabe)**

Im Fenster **Methode | Ausgabe** spezifizieren Sie die Dezimalstellenanzahl der Ergebnisse in der Anzeige auf dem Bildschirm und im Ausdruck, zusätzliche Ausgabetypen sowie die Linienfolge bei einer Mehrelementanalyse im Ausdruck.

Die Anzahl Dezimalstellen für die Anzeige und den Druck von Intensität und Konzentration sowie die Druckreihenfolge legen Sie in der Liste separat für jedes Element fest.

Elemente im Fenster Methode | Ausgabe



Elemente	Beschreibung
Signif. Stellen Ints.	Anzahl der signifikanten Stellen der Intensitätswerte
Dezimalstellen Konz.	Anzahl der Nachkommastellen der Konzentrationswerte
Signif. Stellen Konz.	Anzahl der signifikanten Stellen der Konzentrationswerte
100% norm.	Die Ausgabekonzentration Konz. 2 wird auf den Prozentanteil bezogen auf die Gesamtkonzentration umgerechnet. Die Gesamtkonzentration ist die Summe der Konzentrationen der mit "+" markierten Linien.
Oxidfaktor	Die Ausgabekonzentration Konz. 2 wird auf die Konzentration/Gehalt des Oxids umgerechnet, wenn ein Oxid ausgewählt wurde. Der Oxidfaktor ist in Klammern angegeben, z. B. wird Ti durch Multiplikation mit 1.6681 in TiO ₂ umgerechnet.
Druckreihenfolge	Reihenfolge, in der die Linien im Report angezeigt werden

4 Sequenzen

Die Sequenz definiert, in welcher Reihenfolge Proben und Aktionen innerhalb der Messroutine abzuarbeiten sind. Einige probenbeschreibende Daten wie Probenbezeichnung und Position auf dem Probenrack können ebenfalls direkt eingegeben werden. Diese Daten werden mit der Sequenz gespeichert.

Eine Sequenz basiert auf einer geladenen Methode, welche die Informationen über Art der Kalibrierung, statistische Auswertungen, Qualitätskontrollen usw. enthält.

4.1 Sequenzen erstellen, speichern, öffnen

Sequenzen werden wie Methoden in einer Datenbank gespeichert. Sie können Sequenzen neu erstellen, ändern, speichern und laden. Weitere Funktionen zur Verwaltung von Sequenzen finden Sie im Fenster **Daten | Datenverwaltung**.

Sehen Sie dazu auch

 Methoden und Sequenzen verwalten [► 127]

4.1.1 Neue Sequenz erstellen

Erstellen oder laden Sie zunächst eine Methode. Auf Grundlage der Methode können Sie eine neue Sequenz aus Probenmessungen und Aktionen spezifizieren.

- ▶ Wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Neue Sequenz**.
- ▶ Alternativ öffnen Sie das Fenster mit den aktuellen Sequenzparametern durch Klick auf  oder über den Menüpunkt **Methodenentwicklung | Sequenz**.
 - ✓ Das Fenster **Sequenz** erscheint. Sie können jetzt Messungen und Aktionsfolgen definieren.

4.1.2 Sequenz speichern

Nach Eingabe der Messungen und Aktionen speichern Sie die Sequenz im Fenster **Sequenz speichern** in der Datenbank. Damit können Sie die Sequenz für spätere Messungen wiederverwenden. Beim Speichern der Sequenz können Sie weitere Daten hinzufügen, um die Sequenz zu kategorisieren und leichter auffindbar zu machen.

Elemente im Fenster Sequenz speichern

Sequenz speichern

Name:

Kat.:

Name	Vers.	Datum	Zeit	Kat.	Anwender
multi_element_ground	3	22.03.2021	16:17		Admin
Semiquant all	1	09.06.2020	14:43		Analytik Jena
Test_sequence	2	03.11.2020	9:29		Admin
USP 232/233	1	09.06.2020	14:48		Analytik Jena

Sortieren nach

Name/Vers. ▾

☒ Aufsteigend
☐ Absteigend

☒ Nur aktuelle Versionen anzeigen

Beschreibung:

OK

Abbrechen

Option	Beschreibung
Name	Sequenzname
Kat.	Kategorie (drei Zeichen) für eine weitere Kennzeichnung und Sortierung der Sequenzen Diese Eingabe ist optional.
Tabelle	Übersicht vorhandener Sequenzen
Sortieren nach	Mit den Optionen in dieser Gruppe können Sie die Sequenzliste sortieren. Wenn die Option Nur aktuelle Versionen anzeigen aktiviert ist, wird bei gleichnamigen Sequenzen jeweils nur die neueste Version angezeigt.
Beschreibung	Optional nähere Erläuterungen zur Sequenz eingeben Mit Klick auf ... wird die Liste mit vordefinierten Bemerkungen geöffnet. Diese Bemerkungen verwalten Sie im Fenster Daten Vordefinierte Bemerkungen .

Sequenz speichern

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Sequenz** auf **Speichern** oder wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Speichern | Sequenz**.
- ▶ Geben Sie im Fenster **Sequenz speichern** den Namen für die Sequenz ein und wählen Sie weitere Parameter.
- ▶ Bestätigen Sie die Einstellungen mit **OK**.
 - ✓ Die Sequenz ist in der Datenbank gespeichert. Bei Verwendung eines vorhandenen Sequenznamens wird die vorhandene Sequenz nicht überschrieben, sondern eine neue Version in der Datenbank angelegt.

Sehen Sie dazu auch

 Vordefinierte Bemerkungen erstellen [▶ 136]

4.1.3 Sequenz laden

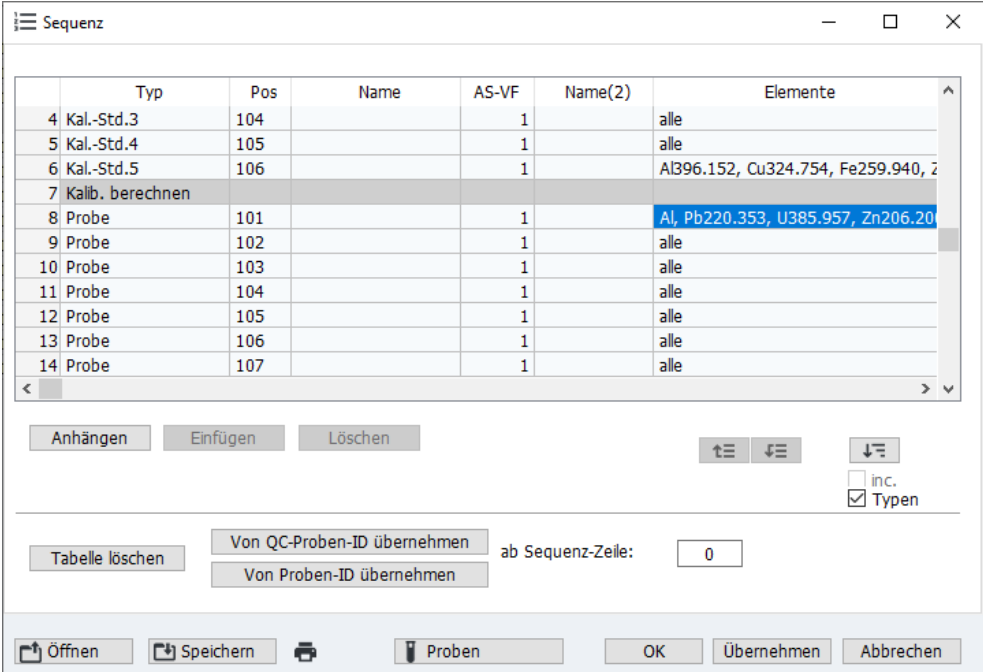
Sie können gespeicherte Sequenzen laden und auf ihrer Grundlage zusammen mit einer Methode eine Messroutine starten.

- ▶ Öffnen Sie das Datenbankfenster der Sequenzen mit einer der folgenden Alternativen:
 - Klicken Sie in der Werkzeugleiste auf das Symbol  neben dem Feld **Sequ.**
 - Wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Sequenz öffnen.**
 - Klicken Sie im Fenster **Sequenz** auf **Öffnen.**
- ▶ Sie können optional im Feld **Kat.** die Anzeige der Sequenzen mit Auswahl einer Kategorie einschränken. Wenn Sie die Sequenzen aus allen Kategorien sehen möchten, löschen Sie den Eintrag im Feld **Kat..**
- ▶ Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Nur aktuelle Versionen anzeigen**, wenn Sie bei gleichnamigen Sequenzen jeweils nur die Sequenz mit der höchsten Versionsnummer sehen möchten.
- ▶ Markieren Sie in der Tabelle die Sequenz und klicken Sie auf **OK.**
 - ✓ Das Fenster Sequenz mit gespeicherten Parametern erscheint.

4.2 Fenster Sequenz

Im Fenster **Sequenz** spezifizieren Sie die Reihenfolge der Messungen und weitere Aktionen während der Analyse.

Das Fenster **Sequenz** öffnen Sie mit einem Klick auf .



The screenshot shows the 'Sequenz' window with a table of sequence steps. The table has columns: Typ, Pos, Name, AS-VF, Name(2), and Elemente. The steps are numbered 4 to 14. Step 7 is 'Kalib. berechnen' and step 8 is 'Probe'. Below the table are buttons for 'Anhängen', 'Einfügen', and 'Löschen'. There are also icons for moving steps up and down, and a checkbox for 'inc. Typen'. At the bottom, there are buttons for 'Tabelle löschen', 'Von QC-Proben-ID übernehmen', 'Von Proben-ID übernehmen', 'ab Sequenz-Zeile:' with a value of 0, and a 'Proben' button. The bottom bar contains 'Öffnen', 'Speichern', 'Proben', 'OK', 'Übernehmen', and 'Abbrechen'.

	Typ	Pos	Name	AS-VF	Name(2)	Elemente
4	Kal.-Std.3	104		1		alle
5	Kal.-Std.4	105		1		alle
6	Kal.-Std.5	106		1		Al396.152, Cu324.754, Fe259.940, 2
7	Kalib. berechnen					
8	Probe	101		1		Al, Pb220.353, U385.957, Zn206.20
9	Probe	102		1		alle
10	Probe	103		1		alle
11	Probe	104		1		alle
12	Probe	105		1		alle
13	Probe	106		1		alle
14	Probe	107		1		alle

Tabelle für Proben- und Aktionsfolgen

In der Tabelle sind die gewählten Proben- und Aktionsfolgen in der Reihe ihrer Abarbeitung aufgeführt.

Tabellenspalte	Erläuterung
Typ	Probentyp bzw. Analysenschritt
Pos	Probenposition im Probengeber (falls verwendet)
Name	Probenname Diese Eingabe ist optional. Für Kalibrier- und QC-Proben wird dieser Probenname aus der Methode übernommen, falls dort ein Probenname spezifiziert wurde. Für Analysen- und QC-Proben können die Namen aus der Probeninformationsdatei übertragen werden.
Name (2)	Weitere Bezeichnung zur Probenidentifikation (optional)
Elemente	Elemente auswählen, die in einer Probe analysiert oder für die Sonderaktionen ausgeführt werden. ■ keine Aktuelle Auswahl wird gelöscht. ■ alle Alle in der Methode festgelegten Elemente werden bestimmt (Standardeinstellung). ■ Elementsymbol Nur die genannten Elemente werden bestimmt, z. B. "Cu, Pb". ■ Elementlinie (Symbol + Wellenlänge) Nur die genannten Elementlinien werden bestimmt, z. B. "Mn 257.610, Ca 315.887". ■ nicht Elementsymbol oder nicht Elementlinie Die genannten Elemente bzw. Elementlinien werden nicht bestimmt, z. B. "nicht Cu, Pb", "nicht Mn 257.610, Ca 315.887"

Schaltflächen

Mit den Schaltflächen können Sie der Sequenzliste Proben und Aktionen hinzufügen, löschen oder vorhandene Probeninformationsdaten übernehmen.

Schaltfläche	Erläuterung
Anhängen	Neue Zeile am Ende der Liste anhängen und das Fenster Sequenz bearbeiten öffnen
Einfügen	Neue Zeile oberhalb des markierten Listenplatzes einfügen
Löschen	Markierte Zeilen löschen
Tabelle löschen	Gesamte Sequenzliste löschen
Von QC-Proben-ID übernehmen	Informationen über Namen von QC-Proben und deren Position im Probengeber aus dem Fenster Proben-ID QC-Probeninformation übernehmen Die Informationen aus der QC-Proben-ID-Tabelle werden in die Sequenztabelle eingetragen. Die erste Zeile mit neuer Probenidentifikation wird im Feld ab Sequenz-Zeile festgelegt.
Von Proben-ID übernehmen	Informationen über Probennamen, Position im Probengeber und die zu analysierenden Elemente aus dem Fenster Proben-ID übernehmen Die Informationen aus der Proben-ID-Tabelle werden in die Sequenztabelle eingetragen. Die erste Zeile mit neuer Probenidentifikation wird im Feld Proben-ID festgelegt.
Proben	Fenster Proben-ID öffnen

Sehen Sie dazu auch

📖 Häufig verwendete Bedienelemente [► 15]

📖 Elemente/Linien für eine Probenanalyse/Aktion auswählen [► 60]

4.3 Messungen und Aktionen in einer Sequenz spezifizieren

Im Fenster **Sequenz bearbeiten** spezifizieren Sie die Abfolge von Messungen und Aktionen für eine Analyse. Das Fenster erscheint, wenn Sie im Fenster **Sequenz** auf **Anhängen** oder **Einfügen** klicken.

Sequenz bearbeiten

Auswahl Tabellenplatz Nr.: 18

☐ Proben
☐ QC
☐ Reag.-Blindwert
☐ Leerw.-NWG
☒ Kalibrierung
☐ Rekalibrierung
☐ IEC-Lösungen
☐ Sonderaktion
☐ Methode laden

Kalibrierverfahren: Standard-Verfahren
 Std.-Herstellung: Manuell hergestellt
 Anzahl der Std.: 5

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

Mögliche Messungen und Aktionen

In Abhängigkeit von den Methodeneinstellungen können Sie verschiedene Messungen und Aktionen für eine Analyse spezifizieren.

Probe/Aktion	Beschreibung
Proben	Die unter Anz. eingegebene Anzahl Proben messen
QC-Proben	Eine QC-Probe messen und entsprechend der Spezifikation in der Methode auswerten In der Liste wählen Sie eine in der Methode spezifizierte QC-Probe aus. Die Parameter der QC-Probe werden im danebenstehenden Feld angezeigt.
Reag.-Blindwert	Den Blindwert ohne Analyten messen
Leerw.-NWG	Leerwert zur Bestimmung der Nachweis- und Bestimmungsgrenzen nach dem Leerwertverfahren messen
Kalibrierung	Die Kalibrierproben messen und entsprechend der Spezifikation in der Methode die Kalibration berechnen
Rekalibrierung	Die für die Rekalibration vorgesehene Kalibrierprobe messen und eine Rekalibration berechnen
Proben-Addition	Für das Kalibrierverfahren Additions-Kalibrieren Diese Probe aufstocken und die Kalibrierkurve und Probenkonzentration ermitteln
Blindwert-Addition	Für das Kalibrierverfahren Additionskalibrieren und die Blindwertkorrektur auf Konzentrationsbasis Diese Blindwertprobe aufstocken und den Blindwert ermitteln
IEC-Lösungen	Nur für Peakkorrekturen mit IEC Die IEC-Lösungen messen

Probe/Aktion	Beschreibung
Sonderaktion	Diese Aktionen betreffen nicht direkt die Messung der Proben (siehe unten).
Methode laden	Eine gespeicherte Methode laden, z. B. um innerhalb der Sequenz eine andere Analyse zu starten Mit  öffnen Sie das Datenbankfenster mit den gespeicherten Methoden. Wählen Sie eine der gespeicherten Methoden aus.

Sonderaktionen

Aktion	Beschreibung
Plasma löschen	Plasma löschen
Dunkelmessung	Zusätzliche Dunkelmessung ausführen Bei dieser Messung des Dunkelstroms wird das Signal mit geschlossenem Shutter bestimmt. Die Dunkelmessung erfolgt immer automatisch, auch wenn sie nicht in die Sequenz eingefügt wurde.
Wartezeit	Die im Feld eingegeben Zeit (in Minuten) warten und dann die Analyse fortsetzen Bei Verwendung eines Probengebers bleibt die Kanüle in der Spülposition und es wird weiter Spülflüssigkeit angesaugt.
Pause	Die Analyse stoppen Die Sequenz kann anschließend mit Klick auf  oder dem Menüpunkt Routine Fortsetzen fortgesetzt werden.
Beep	Einen Signalton vom PC erzeugen lassen, z. B. um das Ende der Kalibrierung anzuzeigen
Wiederhole / Solange	Eine Schleife (Wiederholung) in der Sequenz definieren. Der zwischen dem Startpunkt Wiederhole und dem Endpunkt Solange eingeschlossene Teil der Sequenz wird bis zum Erfüllen des Abbruchkriteriums wiederholt. Als Abbruchbedingung kann eine Anzahl von Schleifendurchläufen oder eine Zeit in Minuten angegeben werden. Bei einer Onlinemessung (im Rahmen einer Fernwartung) muss die Option autom. aktiviert werden. Dies verhindert im manuellen Betrieb die Nachfrage zur Probendosierung.
Kalib. anzeigen	Während der laufenden Sequenz die Kalibrierkurve anzeigen, bis die Wartezeit (in Minuten) abgelaufen ist. Nach Ablauf der Wartezeit bzw. nach Klick auf OK setzt die Software die Messung fort. Bei Aktivierung der Aktion Kalib. anzeigen , ohne Eingabe einer Wartezeit setzt die Software die Messung erst fort, nachdem Sie die Kalibrierung mit OK bestätigt haben. Bei Klick auf die Schaltfläche Stopp im Fenster Kalibrierung schließt die Software das Fenster und unterbricht den Analysenablauf, unabhängig von der eingestellten Wartezeit.
System spülen	Probenwege bis zur Torch mit Spüllösung im Normallauf spülen Spülzeit im Eingabefeld eingeben.

Sequenz spezifizieren

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Sequenz** mit Klick auf .
- ▶ Klicken Sie auf **Anhängen**.
 - ✓ Das Fenster **Sequenz bearbeiten** erscheint.
- ▶ Aktivieren Sie der Reihe nach die benötigten Aktionen und übertragen Sie diese jeweils mit **Übernehmen** in die Sequenztabelle.
- ▶ Bestätigen Sie die letzte Aktion **OK**.

- ✓ Sie kehren in das Fenster **Sequenz** zurück. Die Sequenztabelle enthält nun alle Aktionen in der Reihenfolge der Auswahl.
- ▶ Als Voreinstellung der zu analysierenden Elemente ist in der Sequenztabelle für jede Probe/Aktion die Option **alle** gewählt. Mit einem Klick auf die Tabellenzelle **Elemente** der betreffenden Probe/Aktion können Sie diese Einstellung im Fenster ändern.
- ▶ Bei Verwendung des Probengebers:
Legen Sie die Position **Pos** der Proben im Probengeber fest. Die Positionen von Kalibrier- und QC-Proben werden automatisch aus der Methode übernommen. Sie können jedoch hier die Positionen ändern, die in der Sequenz eingestellten Positionen haben immer Vorrang.

Die Daten der zu untersuchenden Proben geben Sie am besten im Fenster **Proben-ID** ein und übertragen Sie anschließend in die Sequenzliste.

4.4 Elemente/Linien für eine Probenanalyse/Aktion auswählen

In der Sequenz sind alle Elemente für die Analyse von Proben oder das Ausführen von Aktionen in der Voreinstellung aktiviert. Möchten Sie Elemente für die Analyse einer Probe oder eine Aktion ausschließen, gehen Sie folgendermaßen vor:

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Sequenz** auf die Tabellenzelle der entsprechenden Probe oder Aktion. Es erscheint das Fenster **Elemente und Linien auswählen**. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Elemente/Linien der aktuell geladenen Methode anzeigen**.
 - ✓ In der Liste **Elemente** werden alle in der Methode eingestellten Elemente/Linien blau markiert.
- ▶ Um ein Element völlig auszuschließen, entfernen Sie die Markierung mit einem Klick auf das entsprechende Element. Zur Aktivierung des Elements klicken Sie erneut auf das Element.
- ▶ Wenn in der Methode für ein Element mehrere Linien eingestellt sind und Sie möchten davon nur ausgewählte Linien verwenden, markieren Sie in der Liste **Linie** die gewünschte Linie per Mausklick.
- ▶ Mit den Schaltflächen **alle** und **keine** aktivieren Sie jeweils alle Elemente bzw. schließen alle Elemente völlig für die Analyse/Aktion aus.
- ▶ Mit der Option **Nicht (Auswahl invertieren)** werden alle markierten Elemente/Linien von der Analyse/Aktion ausgeschlossen. Analysiert werden nur die nichtmarkierten Elemente/Linien. Vor der Aufzählung der Elemente/Linien erscheint ein "**nicht**".

Im Ausgabefeld werden alle ausgewählten Elemente/Linien aufgeführt. Die Elemente/Linien können nach der Rückkehr in das Sequenzfenster direkt in der Tabellenzelle editiert werden.

Fenster Elemente und Linien
auswählen

Elemente und Linien auswählen

Elemente	Linien
Al	Al396.152
As	As188.979
Cd	As193.698
Cr	Cd214.441
Cu	Cd226.502
Fe	Cr267.716

☐ Nicht (Auswahl invertieren)

☒ Elemente/Linien der aktuell geladenen Methode anzeigen

Cu, Fe, As188.979, Cd226.502

Beispiele: (1) Cu123.56, 55, Cu, Fe123.34 (2) nicht Fe (3) alle

5 Probeninformationsdaten (Proben-ID)

Die Probeninformationsdaten (Proben-ID) enthalten für die aktuellen Analysenproben und die QC-Proben die spezifischen Daten wie Probenname, Position auf dem Probengeber, Einwaage, Verdünnung oder Konzentrationseinheit. Probennamen und Positionen können in die Sequenztabelle per Mausklick übernommen werden. Die Probeninformationsdaten werden als Tabelle im CSV-Format gespeichert und können auch in einem Tabellenkalkulationsprogramm, z. B. Excel, editiert werden. Auch der umgekehrte Weg ist möglich, extern erstellte Probentabellen können in ASpect PQ importiert werden.

Das Fenster **Proben-ID** öffnen Sie mit einem Klick auf  in der Symbolleiste.

5.1 Probeninformationsdaten erstellen, speichern und öffnen

Einen neuen Satz Proben-ID erstellen

- ▶ Klicken Sie in der Symbolleiste auf  oder wählen Sie die Menüpunkte **Methodenentwicklung | Proben-ID** oder **Datei | Neue Probeninformations-Daten**.
 - ✓ Das Fenster **Proben-ID** erscheint.
- ▶ Spezifizieren Sie die Daten für Proben und QC-Proben.
- ▶ Übernehmen Sie den Datensatz mit Klick auf **Nach Sequenz übertragen** in eine Sequenz.
 - ✓ Die Proben sind aktiviert und werden für die nächste Analyse verwendet. Sie können die Proben-ID auch für eine spätere Analyse speichern.

Proben-ID speichern

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Proben-ID** auf **Speichern** oder wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Speichern | Probeninformation**.
- ▶ Speichern Sie den Datensatz im Standardfenster **Speichern unter**.
 - ✓ Die Proben-ID wird im CSV-Format gespeichert. Sie können die Daten für weitere Analysen laden oder in einem Tabellenprogramm editieren.

Probeninformationsdaten öffnen

- ▶ Eine Proben-ID können Sie mit einer der folgenden Alternativen öffnen:
 - Klicken Sie in der Werkzeugleiste auf das Symbol  neben dem Feld **Proben**.
 - Wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Probeninformations-Datei öffnen**.
 - Klicken Sie im Fenster **Proben-ID** auf **Öffnen**.
- ▶ Wählen Sie im Standardfenster **Öffnen** die Datei aus.
 - ✓ Die Proben-ID wird im Fenster **Proben-ID** angezeigt und kann für die nächste Analyse verwendet werden.

Sehen Sie dazu auch

 Probeninformationen spezifizieren [► 64]

5.2 Fenster Proben-ID | Probeninformation

Im Fenster **Proben-ID** spezifizieren Sie die Proben und QC-Proben. Neben dem Namen und der Position im Probengeber können Sie für die Analyse wichtige Parameter eingeben. Das Fenster **Proben-ID | Probeninformation** öffnen Sie mit Klick auf .

Proben-ID

Probeninformation

QC-Probeninformation

	Pos	Name	Vor-VF	Einheit	Einw. g	Vol. mL	Ges.einw. g	Name(2)	AS-VF	BW-Korr.	Pr
1	101		1.000	mg/L					1	aus	Pro
2	102		1.000	mg/L					1	aus	Pro
3	103		1.000	mg/L					1	aus	Pro
4	104		1.000	mg/L					1	aus	Pro
5	105		1.000	mg/L					1	aus	Pro
6	106		1.000	mg/L					1	aus	Pro
7	107		1.000	mg/L					1	aus	Pro
8	108		1.000	mg/L					1	aus	Pro
9	109		1.000	mg/L					1	aus	Pro
10	110		1.000	mg/L					1	aus	Pro

Anhängen

Einfügen

Löschen

Anz.: 1

↑

↓

☐ inc.

Tabelle löschen

Nach Sequenz übertragen

Von Sequenz übernehmen

ab Sequenz-Zelle: 1

Öffnen

Speichern

Sequenz

Schließen

Karte Probeninformation

Die Karte **Probeninformation** enthält eine Liste der Proben und ihre Eigenschaften.

Tabellenspalte	Beschreibung
Pos	Probenposition im Probengeber
Name	Probenname Diese Eingabe ist optional. Max. Anzahl Zeichen: 20
Vor-VF	Für Einheitentyp flüssig und fest Der Vorverdünnungsfaktor der Probe bezeichnet den Faktor, mit dem die Originalprobe verdünnt wurde, bevor sie im Probengeber platziert bzw. bei der Arbeit ohne Probengeber dem Plasma zugeführt wird. Der Faktor ist zur Berechnung der Konzentration der Originalprobe (Konz. 2) notwendig.
Einheit	Einheit für die Konzentration der Probe
Einw.	Einwaage in Gramm (nur für den Einheitentyp fest) Masse der Originalprobe, die in der Probenvorbehandlung in Lösung gebracht wurde. Die Einwaage ist zur Berechnung der Konzentration der Originalprobe (Konz. 2) notwendig.
Vol.	Gesamtvolumen bzw. Auffüllvolumen in mL (nur für den Einheitentyp fest)
Ges.einw.	Gesamteinwaage der Probe und des Lösungsmittels in Gramm (nur für den Einheitentyp flüssig grav. , z. B. für Öle).
Name (2)	Weiterer Probenname Diese Eingabe ist optional. Max. Anzahl Zeichen: 20
AS-VF	Verdünnungsfaktor des Probengebers
BW-Korr.	Blindwertkorrektur (nur für Probenotyp Proben) aus Es wird keine Blindwertkorrektur durchgeführt. ein Für Berechnung der Konzentration der Originalprobe wird der zuletzt in der Sequenz gemessene Blindwert subtrahiert. Das Verfahren der Blindwertkorrektur wählen Sie im Fenster Optionen Kalibrierung .

Tabellenspalte	Beschreibung
Probentyp	Auswahl zwischen Proben und Blindwert
Elemente	In der Probe zu analysierende Elemente oder Linien Nach einem Klick auf die Tabellenzelle erscheint das Fenster Elemente und Linien auswählen , in dem diese Einstellungen vorgenommen werden.

Schaltflächen

Schaltflächen	Beschreibung
Anhängen	Anzahl neue Zeilen am Ende der Liste einfügen.
Einfügen	Anzahl neue Zeilen vor dem markierten Listenplatz einfügen.
Löschen	Markierte Zeile löschen.
Anz.	Eingabefeld für die Anzahl einzufügender Zeilen.
Tabelle löschen	Die gesamte Liste der Probeninformationen löschen.
Nach Sequenz übertragen	Probennamen, Positionen im Probengeber und zu analysierende Elemente in die Sequenzliste übertragen. Die erste Zeile der Sequenzliste, ab welcher die Probeninformationen zu übertragen sind, ist im Eingabefeld ab Sequenz-Zeile festzulegen.
Von Sequenz übernehmen	Probennamen, Positionen im Probengeber und zu analysierende Elemente aus der Sequenzliste in die Proben-ID-Tabelle übertragen. Die erste Zeile der Sequenzliste, ab welcher die Probeninformationen zu übertragen sind, muss im Eingabefeld ab Sequenz-Zeile festgelegt werden.

Karte QC-Probeninformation

Analog zur Karte **Probeninformation** sind auf dieser Karte die QC-Proben aufgeführt. Zusätzlich enthält die Spalte **Typ** die Informationen über den QC-Typ. Die Spalte **Einheit** entfällt, da die Einheit in der Methode definiert ist. Die Blindwertkorrektur wird bei QC-Proben in der Methode festgelegt und ist hier nicht wählbar.

Schaltfläche

Schaltfläche	Beschreibung
Nach Sequenz übertragen	QC-Probennamen und Positionen im Probengeber in die Sequenzliste übertragen

Sehen Sie dazu auch

- ☞ Optionen zum Analysenablauf [► 141]
- ☞ Elemente/Linien für eine Probenanalyse/Aktion auswählen [► 60]
- ☞ Einheiten spezifizieren [► 134]

5.3 Probeninformationen spezifizieren

Wenn Sie für die Analyse weitere Daten zu Proben oder QC-Proben benötigen, wie z. B. die Einwaage oder den Vorverdünnungsfaktor, müssen Sie die Daten im Fenster **Proben-ID** festlegen. Hier spezifizierte Probennamen und Positionen im Probengeber können Sie in die Sequenz übertragen.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Proben-ID | Probeninformation** mit Klick auf .
- ▶ Geben Sie im Feld **Anz.** die Anzahl zu analysierender Proben ein. Klicken Sie anschließend auf **Anhängen**, um die Zeilen in die Tabelle einzufügen.
- ▶ Tragen Sie in der Tabelle für jede Probe die benötigten Informationen ein.

- ▶ Wenn die Eingaben in einer Spalte gleich sind, können Sie mit  den Eintrag der markierten Zelle auf alle nachfolgenden Zellen der Spalte kopieren. Wenn Sie das Kontrollkästchen **inc.** (steht für Inkrement) aktivieren, wird beim Übertragen der Information in die nächste Zelle der Wert jeweils um 1 erhöht. So können Sie auf einfache Weise z. B. aufeinanderfolgende Plätze im Probengeber belegen oder einen Probenamen fortlaufend nummerieren.
- ▶ Texte aus Eingabefeldern können Sie in die Zwischenablage kopieren und wieder einfügen. Verwenden Sie dazu die Tastenkombination Strg+C und Strg+V oder nutzen Sie nach Rechtsklick auf die Tabellenzelle die Kontextmenübefehle.
- ▶ Wenn alle Informationen eingetragen sind, geben Sie im Feld **ab Sequenz-Zeile** die Zeile in der Sequenz an, ab welcher Sie die Probeninformationen in die Sequenz übernehmen möchten. Übertragen Sie die Information mit Klick auf **Nach Sequenz übertragen**.
- ▶ Spezifizieren Sie die QC-Probeninformationen analog im Fenster **Proben-ID | QC-Probeninformation**. Übernehmen Sie die QC-Probeninformationen mit Klick auf **Nach Sequenz übertragen** in die Sequenz.
 - ✓ Die Probeninformationen werden für die nächste Analyse verwendet.

6 Analysen durchführen und Ergebnisse berechnen

6.1 Übersicht der Menübefehle und Schaltflächen zum Starten der Analysen im Hauptfenster

Messroutinen (Analysenabläufe auf Grundlage einer Sequenz) werden mit den Symbolen der Werkzeugleiste oder über das Menü **Routine** gestartet.

Sym- bol	Menüpunkt	Funktion
	Routine Sequenz starten	Eine Messroutine starten
	Routine Zeile(n) der Sequenz aus- führen...	Die markierte(n) Zeile(n) in der Sequenz ausführen. Mit Hilfe der Maus und gedrückter Strg- bzw. Umschalttaste können mehrere Zeilen markiert werden.
	Routine Stopp	Eine Messroutine stoppen
	Routine Fortsetzen	Einen gestoppte Messroutine fortsetzen

6.2 Spektrometer einschalten und Plasma zünden



VORSICHT

Vergiftungsgefahr durch Ozon und nitrose Gase

- Vor Zünden des Plasmas die Absaugeinrichtung einschalten.
- Während des Betriebs Absaugeinrichtung eingeschaltet lassen.

Um einen sicheren Plasma-Betrieb zu gewährleisten, überwacht das Gerät die folgenden Bedingungen durch Sicherheitskreise.

- Die Plasmaraumtür ist geschlossen.
- Die Plasmafackel (Torch) befindet sich in der Arbeitsposition.
- Die Kühlung läuft ausreichend.
- Die Abluftabsaugung ist aktiv.
- Die Argonzufuhr ist gewährleistet.

Sie können das Plasma nur zünden, wenn alle Bedingungen eingehalten werden. Wenn einer der Sicherheitskreise im Betrieb eine Störung meldet, löscht das Gerät das Plasma.

Plasma zünden

- ▶ Schalten Sie den PC am Netzschalter ein und warten Sie das Initialisieren des Betriebssystems ab.
- ▶ Schalten Sie das ICP-OES Gerät am Netzschalter ein.
- ▶ Öffnen Sie die Argonzufuhr. Stellen Sie den Vordruck auf 500 ... 700 kPa (5 ... 7 bar) ein.
- ▶ Schalten Sie die Absaugvorrichtung ein.
- ▶ Schalten Sie den Umlaufkühler am Netzschalter ein.

- ▶ Öffnen Sie die Tür zum Plasmaraum. Prüfen Sie, ob die Torch in der Start-Position ist. Dabei muss sich die Injektorspitze ca. 1 bis 2 mm unterhalb der Unterkante der Induktionsspule befinden.
- ▶ Den Konus des Fensters für axiale Beobachtung auf Verschmutzung und Verschleiß untersuchen. Mit dem mitgelieferten Hakenschlüssel prüfen, ob der Konus festsitzt.
i HINWEIS! Wenn der Konus locker sitzt, wird er nicht ausreichend gekühlt und korrodiert.
- ▶ Schließen Sie die Tür zum Plasma-Raum.
- ▶ Bei PlasmaQuant 9200 Elite: Schalten Sie die optionale Probenraumbeleuchtung ein.
- ▶ Überprüfen Sie die Pumpschläuche. Tauschen Sie die Schläuche aus, wenn sie nicht mehr elastisch sind oder starken Abrieb zeigen.
- ▶ Spannen Sie die Pumpschläuche jeweils zwischen den Stoppfern in die Pumpe am ICP-OES Gerät.
- ▶ Legen Sie die Klemmbügel über die Schläuche und befestigen Sie die Führungen mit den Andruckhebeln. Achten Sie darauf, dass die Andruckhebel einrasten!
i HINWEIS! Beachten Sie dabei die Pumprichtung. Diese Pumpe dreht sich entgegen dem Uhrzeigersinn.
- ▶ Stellen Sie sicher, dass für die Analyse genügend Spüllösung in der Flasche ist.
i HINWEIS! Die Spüllösung sollte den gleichen Säuregehalt wie die Proben und Standards aufweisen. Wenn es keine anderen Vereinbarungen gibt, verwenden Sie 2 %ige Salpetersäure.
- ▶ Überprüfen Sie den Füllstand der Abfallflasche und leeren Sie die Flasche, wenn nicht genügend Reservoir für die Analyse zur Verfügung steht.
- ▶ Beim manuellen Betrieb ohne Probengeber tauchen Sie den Probenansaugschlauch in die Spüllösung. Während des Zündvorgangs des Plasmas darf keine Luft nachströmen.
- ▶ Starten Sie das Programm ASpect PQ.
- ▶ Im Fenster **Quickstart** die folgenden Einstellungen vornehmen:
 - Option **Routine** oder **Methodenentwicklung** wählen.
 - Wählen Sie bei Verwendung des HF-Kits unter **Torchmaterial** die Option **Keramik** aus, um die Empfindlichkeit des optischen Plasmasensors anzupassen.
 - Optional: Wählen Sie im Bereich **Worksheet** für den Quickstart vorbereitete Arbeitsblätter aus, z. B. für die Untersuchung elementarer Verunreinigungen in pharmazeutischen Produkten gemäß USP 232/233. Die Arbeitsblätter enthalten Methodeneinstellungen und vorbereitete Sequenzen.
- ▶ Wenn Sie die Software mit Worksheet starten, schließen Sie den Schnellstart im Fenster **Quickstart** mit **OK** ab.
- ▶ Wenn Sie die Software ohne Worksheet starten, klicken Sie auf **Quickstart überspringen** und gelangen zur Oberfläche von ASpect PQ.
- ▶ Wenn das System längere Zeit außer Betrieb oder die Zerstäuberkammer abgebaut war, spülen Sie Zerstäuberkammer und Torch mit Zerstäubergas, um die Luft aus dem System zu treiben. Öffnen Sie mit Klick auf **!** das Fenster **Plasma | Kontrolle** und klicken Sie auf **Sprühkammer spülen**.
- ▶ Zünden Sie das Plasma. Klicken Sie im Fenster **Plasma | Kontrolle** auf die Schaltfläche **Plasma zünden**.
 - ✓ Es folgt eine Anfangsphase, in der die Torch mit Argon gespült und die Sicherheitskreise des ICP-OES Gerätes geprüft werden. Wenn alles OK ist, wird das Plasma gezündet.

- ▶ Beobachten Sie, ob sich das Plasma richtig ausgebildet hat. Das Plasma muss kegelförmig sein, über die Induktionsspule hinausgehen und nach oben spitz zulaufen.
- ▶ Wenn sich ein Ringplasma bildet, bildet sich das Plasma nur innerhalb der Induktionsspule oder es ertönt ein knatterndes Geräusch. Betätigen Sie dann den roten Plasma-Aus-Knopf des Gerätes.
- ▶ Prüfen Sie vor dem nächsten Zündversuch, ob der Probenschlauch in die Spüllösung taucht und die Gaszufuhr und Umlaufkühlung in Ordnung sind.
 - ✓ Erst nach erfolgreicher Zündung und stabiler Plasmabildung wird das Spektrometer gekühlt. Nach 1 ... 2 min ist die Zündroutine abgeschlossen und die Schlauchpumpe startet. Das Emissionsspektrometer ist messbereit.
- ▶ Erst jetzt weitere Einstellungen am Analysensystem vornehmen und die Messroutine starten.

Sehen Sie dazu auch

 ASpect PQ starten [▶ 7]

6.3 Plasma löschen und Spektrometer ausschalten

- ▶ Nach Analysenende lassen Sie ca. 3 min Spüllösung und anschließend 1 min Wasser durch das System pumpen. Lassen Sie das Gerät danach trocken laufen. Falls Sie die Schläuche wechseln müssen, befindet sich dann keine Säure mehr in den Schläuchen!
- ▶ Löschen Sie das Plasma im Programm ASpect PQ mit einem Klick auf  in der Werkzeugleiste.
Alternativ öffnen Sie mit  das Fenster **Plasma** und klicken Sie auf **Plasma löschen**.
- ▶ Beenden Sie das Programm ASpect PQ mit **Datei | Beenden**.
- ▶ Quittieren Sie die Abfrage zum Abschalten des Spülgases für den Detektor mit **Ja**, wenn Sie das Spülgas abschalten wollen.
Wenn Sie die Arbeit nur für kurze Zeit unterbrechen (bis 30 min) oder im UV-Bereich arbeiten, schalten Sie das Spülgas nicht ab. Dadurch ersparen Sie sich die Wartezeit beim Zündvorgang, bis der Detektor ausreichend gespült ist. Lassen Sie das Gerät während der Messpause eingeschaltet.
- ▶ Warten Sie, bis die Meldung erscheint, dass Gerät und Kühlung abgeschaltet werden können.
- ▶ Schalten Sie das ICP-OES Gerät und ggf. den Probengeber an den Netzschaltern aus.
- ▶ Im täglichen Messbetrieb können Sie das ICP-OES Gerät alternativ über den Standby-Schalter auf der Gerätefrontseite abschalten. Am Gerät liegt weiterhin Netzspannung an. Die Gaszufuhr wird im Standby abgeschaltet.
- ▶ Entspannen Sie die Pumpschläuche am ICP-OES Gerät. Lösen Sie die Anpresshebel, sodass die Klemmbügel nicht mehr auf die Schläuche drücken, und ziehen Sie die Schlauchstopper auf einer Seite der Pumpe aus der Arretierung.
- ▶ Bei Verwendung des Probengebers entspannen Sie den Pumpschlauch auf die gleiche Weise.
- ▶ Schließen Sie nach dem Ausschalten der Geräte die Gasversorgung.
- ▶ Schalten Sie den Umlaufkühler am Netzschalter aus.
- ▶ Schalten Sie die Absaugeinheit ab.
- ▶ Beenden Sie Windows und schalten Sie den PC aus.

✓ Der Analysator ist damit ausgeschaltet.



HINWEIS

Vor Ausschalten des ICP-OES Gerätes Abkühlphase abwarten!

Warten Sie nach Löschen des Plasmas noch mindestens 30 s, bevor Sie das Gerät am Netzschalter ausschalten.

6.4 Messroutine starten

Messung starten

Erstellen Sie als Vorbereitung für eine Messung eine Methode und eine Sequenz oder verwenden Sie eines der vorbereiteten Worksheets.

Bereiten Sie gegebenenfalls eine Proben-ID vor, die weitere Probeninformationen wie Verdünnungen enthält.

Stellen Sie die Proben für die Messung bereit, z. B. auf dem Tablett des Probengebers.

- ▶ Schalten Sie den PC ein. Schalten Sie das Emissionsspektrometer und das Zubehör ein.
- ▶ Zünden Sie das Plasma.
- ▶ Laden Sie eine Methode:
 - Klicken Sie in der Werkzeugleiste auf das Ordner-Symbol neben dem Feld **Meth.** Wählen Sie die Methode im Fenster **Methode öffnen** aus.
- ▶ Erstellen Sie eine neue Sequenz oder laden Sie eine bestehende Sequenz:
 - Führen Sie am Beginn der Sequenz eine Kalibrierung aus.
 - Achten Sie beim Laden der Sequenz darauf, dass die Kalibrierung zur Methode passt.
Die Analysenlinien der Kalibrierstandards müssen mit den Analysenlinien übereinstimmen, die Sie in der Methode auf der Registerkarte **Kalibrierung** gewählt haben.
 - Messen Sie nach der Kalibrierung eine QC-Probe, um die Richtigkeit der Kalibrierung zu überprüfen.
- ▶ Erstellen Sie bei Bedarf eine Proben-ID-Tabelle mit weiteren Informationen zu den Proben.
- ▶ Starten Sie die Messroutine mit einem Klick auf  oder mit dem Menüpunkt **Routine | Sequenz starten**.
- ▶ Wählen Sie im Fenster **Messstart** einen Dateinamen für die Ergebnisdatei aus. Sie können das Ergebnis in einer neuen Datei speichern oder an eine bereits vorhandene Datei anhängen. Das Überschreiben einer bereits vorhandenen Datei ist nicht möglich.
 - ✓ Nach Wahl des Dateinamens startet die Messroutine entsprechend den Einstellungen in Methode und Sequenz. Bei Verwendung des Probengebers läuft die Messung automatisch ab.
- ▶ Bei manueller Probenzuführung ohne Probengeber folgen Sie den Anweisungen zur Probenbereitstellung auf dem Bildschirm.

Sehen Sie dazu auch

 Optionen zum Analysenablauf [► 141]

6.5 Anzeige und Speicherung der Ergebnisse während des Analysenlaufs

Anzeige während des Analysenablaufs

Während der Messroutine werden die Ergebnisse in Echtzeit im Hauptfenster angezeigt. Zusätzlich können weitere Fenster mit dem aktuellen Ergebnis eingeblendet werden.

- **Spektrendarstellung:** Ansicht der Analysenlinie
- **Signalverlauf:** Verlauf des Messsignals
- **Bargraph:** Messwerte in einem Balkendiagramm
- **Report-Fenster:** Plasmareport
- **Probenkonz. in Bezugskurve:** Probenwerte in der Kalibrierkurve

Die Auswahl dieser Anzeigefenster nehmen Sie im Fenster **Optionen | Analysenablauf** vor. Die Anzeigefenster können während der Analyse ein- und ausgeblendet werden.

- ▶ Mit dem Menübefehl **Ansicht | Ergebnisanzeigen öffnen** oder der Funktionstaste F7 öffnen Sie die Fenster.
- ▶ Mit dem Menübefehl **Ansicht | Ergebnisanzeigen schließen** oder der Funktionstaste F8 blenden Sie die Fenster aus.
- ▶ Mit  können die Fenster auch während der Analyse geöffnet werden.

In der Sequenzliste des Hauptfensters wird der Messfortschritt dokumentiert. Die Zeilen mit den aufeinanderfolgenden Aktionen sind mit folgenden Symbolen in der Spalte gekennzeichnet:

Symbol	Bedeutung
-	Noch nicht gemessen/abgearbeitet.
O	Wird gerade gemessen.
+	Wurde bereits gemessen/abgearbeitet.

Schaltflächen in der Symbolleiste

In der Symbolleiste werden während der Messung folgende Schaltflächen eingeblendet:

Schaltfläche	Beschreibung
	Anzeigefenster öffnen und schließen
	Methodenfenster anzeigen Methode kann nur gelesen, jedoch nicht geändert werden.
	Sequenzfenster anzeigen Die Sequenz kann während der laufenden Analyse erweitert werden. Das Sequenzfenster enthält die Schaltfläche Proben mit der das Fenster Proben-ID zur Ergänzung der Probandaten geöffnet wird.

Ergebnisdaten während des Analysenablaufs speichern

Analysenergebnisse werden direkt während der Messung in einer Datenbank im voreingestellten Standardpfad bzw. in selbstdefinierten Unterordnern gespeichert. Dabei werden sie wahlweise in einer neuen Datenbank abgelegt oder an eine vorhandene Datenbank angehängt. Es ist jedoch nicht möglich, eine Ergebnisdatenbank durch Wahl des gleichen Namens zu überschreiben.

Das Ziel für die Ergebnisse wird automatisch beim Start einer Messroutine gefordert. Es öffnet sich dafür das Fenster **Messstart** mit folgenden Optionen für die Ergebnisdatei:

Messstart Sequenz: multi_element_ground

Ergebnisdatei Name: multi_element_ground ... Ordner: (Standard) ▾ Beschreibung: ☒ Datei neu beginnen ☐ an Datei anhängen ☐ Bei Fehlerabbruch Plasma löschen	Aktuelle Methode: Method_Ground Version: 1 geladen von: Datenbank Weitergemessen wird mit Methode: Method_Ground Version: 1 Datum: 05.06.2020 17:15
---	---

Analysendauer (ca.): 1h 44min Ende: Heute, 11:04

"Datum/Zeit an Ergebnisdateinamen anhängen" ist aktiv ("Optionen").

OK Abbrechen

Option	
Name	Dateinamen für die Ergebnisdatenbank eingeben Datei neu beginnen Wenn aktiviert, muss ein neuer Dateiname eingegeben werden. Es wird geprüft, ob der Dateiname bereits vorhanden ist. Vorhandene Dateien können nicht überschrieben werden. an Datei anhängen Neue Ergebnisse werden an eine vorhandene Ergebnisdatei angehängt. Mit einem Klick auf ... öffnen Sie ein Auswahlfenster, aus dessen Liste Sie eine vorhandene Ergebnisdatei auswählen können.
Ordner	Speicherpfad für die Ergebnisdatei auswählen Wenn im Fenster Optionen Analysenablauf die Option Datum/Zeit an Ergebnisdateinamen anhängen aktiviert ist, wird der Ergebnisname automatisch um diese Angaben erweitert. Eine Meldung über die Aktivierung der Option erscheint in diesem Fenster.
Beschreibung	Zusätzliche Notiz eingeben, die mit den Analysenergebnissen gespeichert wird Über die Schaltfläche ... können benutzerdefinierte Beschreibungen ausgewählt werden.
Bei Fehlerabbruch Plasma löschen	Bei Abbruch der Messung durch eine Fehlermeldung das Plasma löschen

Die Datei enthält die Mess- und Auswerteergebnisse sowie die Informationen der Proben-ID. Zusätzlich werden die Methodenparameter in der Ergebnisdatenbank gespeichert.

Die Ergebnisdatenbank wird mit den Erweiterungen ".tps" (Methodenparameter, Intensitäten und Konzentrationen) und ".spk" (Spektrenrohdaten) gespeichert.

6.6 Analysenablauf unterbrechen und fortsetzen

Ein Analysenablauf kann unterbrochen und anschließend wieder fortgesetzt werden.

- ▶ Mit dem Menüpunkt **Routine | Stopp** oder mit einem Klick auf  unterbrechen Sie den Analysenablauf sofort.
- ▶ Mit **Routine | Fortsetzen** oder  setzen Sie eine unterbrochene Routine fort.

- ✓ Es öffnet sich das Fenster **Fortsetzen Sequenz**, in dem der Aktionsstatus vor der Unterbrechung ausgegeben wird.
- ✓ Bei Änderung der Methode aktivieren Sie die Option **Mit geänderter Methode fortsetzen**. Dadurch erfolgt ein neuer Methodeneintrag in die Ergebnisdatei und von der Methode wird eine weitere Version gespeichert. Die Messung kann in folgender Weise fortgesetzt werden:

Option	Beschreibung
Fortsetzen	Bei aktueller Probe, aktueller Linie und aktueller Statistikmessung fortsetzen
Erste Statistik-Messung	Bei aktueller Probe, aktueller Linie und erster Statistikmessung fortsetzen
Erste Linie	Bei aktueller Probe, erster Linie und erster Statistikmessung fortsetzen
Ab Tabellenplatz ->	Sequenz ab dem nebenstehenden Tabellenplatz fortsetzen

6.7 Aktionen der Sequenz wiederholen

Einzelne Aktionen in einer Sequenz können wiederholt werden.

- ▶ Markieren Sie im Hauptfenster auf der Karte **Sequenz** oder **Sequenz/Ergebnisse** die Zeile(n) mit der zu wiederholenden Aktion.
Mehrfachmarkierungen nehmen Sie mit Mausklick auf die betreffenden Zeilen bei gedrückter Strg- oder Umschalttaste vor.
- ▶ Starten Sie die Messroutine mit einem Klick auf  oder mit dem Menübefehl **Routine | Zeile(n) der Sequenz ausführen...** ausführen.
- ▶ Wählen Sie im Fenster **Messstart** einen Dateinamen aus, in dem das Ergebnis für die Wiederholungsmessung gespeichert werden soll.
Wahlweise kann das Ergebnis in einer neuen Datei gespeichert oder an eine bereits vorhandene Datei angehängt werden. Das Überschreiben bereits vorhandener Ergebnisse durch Wahl des gleichen Dateinamens ist nicht möglich.
 - ✓ Danach startet die Wiederholung der ausgewählten Aktion.



HINWEIS

Falls zwischenzeitlich Änderungen in der Methode vorgenommen wurden, wird bei Wiederholung der Sequenz oder einzelner Zeilen die geänderte Methode verwendet und diese als neue Version mit den Ergebnissen gespeichert.

6.8 Analysenergebnisse Neuberechnen

Die Neuberechnung von Analysenergebnissen dient dazu, Änderungen der Auswertebedingungen, z. B. Änderung der Kalibrierfunktion oder der Methode, in der Analyse wirksam werden zu lassen. Die Änderung von Probeninformationsdaten, z. B. Probenamen, Verdünnungsfaktoren erfordert ebenfalls eine Neuberechnung, um sie in der Ausgabe der Analysenergebnisse zu berücksichtigen.

Die Neuberechneten Daten können wahlweise an die aktuelle Ergebnisdatei angehängt oder in eine neue Datei gespeichert werden. Eine Manipulation der Ursprungsdaten ist ausgeschlossen. Wird in einer Ergebnisdatei die Neuberechnung mit verschiedenen Parametern mehrfach wiederholt, so wird bei jeder Neuberechnung auf die Ursprungsdaten der Ergebnisdatei zurückgegriffen.

i HINWEIS! Mit jeder Neuberechnung wird eine neue Methodenversion gespeichert.

Eingabeoptionen im Fenster
Analysenergebnisse Neuberechnen

Option/Feld	Beschreibung
Eingangsdaten	Auswahl der Eingangsdaten
Name	Anzeige des Namens der Ergebnisdatei, deren Daten Neuberechnet werden
Probeninformation geändert	Aktivieren, wenn Daten in der Probeninformationsdatei, z. B. der Verdünnungsfaktor, geändert wurden. Wenn die Option nicht aktiviert ist, werden Änderungen in der Probeninformationsdatei bei einer Neuberechnung der Ergebnisse nicht berücksichtigt.
Ergebnisanzeigen aktualisieren	Die Ergebnisfenster, z. B. Spektren darstellen , werden wie bei der Messung aktualisiert.
	Hinweis: Die Neuberechnung dauert hierdurch länger.
Ergebnisdatei Ziel	Ort wählen, an dem die Neuberechneten Ergebnisdaten abgelegt werden.
	Datei neu beginnen Ergebnisdaten in einer neuen Datei speichern Für die Ergebnisdatei wählen Sie unter Ordner und Name den Speicherort für die berechneten Daten.
	an Datei anhängen Die Neuberechneten Daten werden an die vorhandene Ergebnisdatei angefügt.

Option/Feld	Beschreibung
Beschreibung	Diese zusätzliche Notiz wird mit den nachberechneten Analysenergebnissen gespeichert. Der Eintrag ist erforderlich, wenn das optionale 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul installiert ist. In der Liste können benutzerdefinierte Beschreibungen ausgewählt werden.
Einträge Neuberechnen	Zeilen, die Neuberechnet werden, auswählen. alle Alle Einträge in der Ergebnisliste Neuberechnen. Einträge auswählen Nur ausgewählte Sequenzzeilen Neuberechnen. Auf klicken  und im Fenster Einträge auswählen alle Sequenzzeilen markieren, die Neuberechnet werden sollen. Linien der aktuell geladenen Methode In der Liste alle Linien markieren, die Neuberechnet werden sollen. Mit Alles auswählen werden alle Linien markiert. Mit Auswahl aufheben werden alle Markierungen in der Linienliste entfernt.
Temporäre Änderungen	Temporäre Änderungen für die Neuberechnung (Wellenlängenoffsets, Löschemarkierungen) speichern (Dateierweiterung ".rep"). Die Daten werden anschließend automatisch mit der zugehörigen (gleichnamigen) Ergebnisdatei geladen.
in QC-Karte eintragen	Wenn aktiviert, werden Ergebnisse von QC-Probentypen bei der Neuberechnung in die QC-Karte eingetragen.

Neuberechnung ausführen

- ▶ Nehmen Sie die Änderungen in den Methodenparametern bzw. im Fenster **Proben-ID** vor.
- ▶ Klicken Sie auf  oder wählen Sie den Menüpunkt **Routine | Neuberechnen**. Es öffnet sich das Fenster **Analysenergebnisse Neuberechnen**.
- ▶ Spezifizieren Sie die Eingangsdaten (Name, geänderte Probeninformation, geänderte Ergebnisanzeige), den Speicherort und den Namen der Zieldatei.
Hinweis: Wenn Sie die Neuberechnung aufgrund von Änderungen in der Probeninformation vornehmen, dann aktivieren Sie die Option **Probeninformation geändert**. Sonst werden diese Änderungen nicht berücksichtigt.
- ▶ Wählen Sie die Zeilen/Linien für die Neuberechnung aus.
- ▶ Starten Sie die Neuberechnung mit **OK**. Bei nicht spezifizierter Zieldatei erscheint die Abfrage "Soll Neuberechnung ohne Speichern der Ergebnisdaten erfolgen?".

Einen Kalibrierstandard ersetzen

Ein vorhandener Kalibrierstandard kann durch einen später gemessenen ersetzt werden. Gehen Sie dazu folgendermaßen vor:

- ▶ Markieren Sie im Hauptfenster auf der Karte **Sequenz** oder **Sequenz/Ergebnisse** die Zeile des zu ersetzenden Kalibrierstandards.
- ▶ Starten Sie die Messung der Sequenzzeile mit einem Klick auf .
- ▶ Vereinbaren Sie im Fenster **Messstart**, dass das Ergebnis an die bereits vorhandene Datei angehängt wird.
Danach startet die Messung des Kalibrierstandards.
- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Analysenergebnisse Neuberechnen** mit einem Klick auf .
- ▶ Aktivieren Sie die Option **Einträge auswählen** und öffnen Sie mit einem Klick auf  das gleichnamige Fenster.
- ▶ Markieren Sie den zuletzt gemessenen Standard und verschieben Sie ihn mit den Pfeiltasten an die Position des Standards, der ersetzt werden soll.

- ▶ Markieren Sie alle Zeilen, die Neuberechnet werden sollen. Deaktivieren Sie dabei den alten Standard, der nicht mehr in die Berechnung einbezogen werden soll.
- ▶ Kehren Sie mit **OK** in das Fenster **Analysenergebnisse Neuberechnen** und spezifizieren Sie die Eingangsdaten, den Speicherort und den Namen der Zielfeile.
- ▶ Starten Sie die Neuberechnung mit **OK**.
 - ✓ Die Daten werden für die ausgewählten Zeilen Neuberechnet.

Einzelne Linien eines Kalibrierstandards ersetzen

Alternativ können Sie den Standard auch auf folgende Weise ersetzen:

- ▶ Markieren Sie im Hauptfenster auf der Karte **Sequenz** oder **Sequenz/Ergebnisse** die Zeile des zu ersetzenden Kalibrierstandards.
- ▶ Starten Sie die Messung der Sequenzzeile mit einem Klick auf .
- ▶ Vereinbaren Sie im Fenster **Messstart**, dass das Ergebnis an die bereits vorhandene Datei angehängt wird. Danach startet die Messung des Kalibrierstandards.
- ▶ Führen Sie in der Ergebnisliste einen Rechtsklick auf den Standard (die Linie) aus, den Sie ersetzen wollen. Wählen Sie im Kontextmenü den Punkt **Probeneinzelwerte**.
- ▶ Aktivieren Sie im Fenster **Probeneinzelwerte** das Kontrollkästchen **Ersetzen durch Eintrag Nr.** und geben Sie im Eingabefeld die Zeilennummer des zu ersetzenden Standards ein.
- ▶ Starten Sie die Neuberechnung wie oben beschrieben.
 - ✓ Die Daten werden für die ausgewählten Zeilen Neuberechnet.

Sehen Sie dazu auch

-  Vordefinierte Bemerkungen erstellen [▶ 136]
-  Qualitätskontrolle spezifizieren (Fenster Methode | QCS) [▶ 47]

6.9 Messungen parallel zur laufenden Analyse auswerten (Offline-Modus)

Im laufenden Messbetrieb kann keine weitere Ergebnisauswertung vorgenommen werden. Jedoch kann bei bereits laufender Anwendung eine weitere Programminstanz der Anwendung im Offline-Modus geöffnet werden. In diesem Modus besteht keine Verbindung zum Gerät. Alle weiteren Funktionen wie das Erstellen von Methoden oder das Laden und Auswerten von Ergebnissen können jedoch parallel zum laufenden Messbetrieb der ersten Programminstanz verwendet werden.

- ▶ Starten Sie ASpect PQ in der zweiten Programminstanz mit dem Menüpunkt **Datei | Offline-Programminstanz starten**.
- ▶ Öffnen Sie die Ergebnisdatei der aktuell laufenden Messung mit dem Menüpunkt **Datei | Ergebnisdatei öffnen**. Bisher gemessene Ergebnisse werden in das Ergebnisfenster geladen.
- ▶ Weitere Ergebnisse aus der laufenden Messung laden Sie mit einem Klick auf  in der Werkzeugleiste oder dem Menüpunkt **Ansicht | Ergebnisliste aktualisieren**.
 - ✓ Die Ergebnisanzeige wird aktualisiert. Die Ergebnisse können weiterbearbeitet werden.

 **HINWEIS!** Bei einer Neuberechnung werden die Neuberechneten Ergebnisse in einer neuen Datenbank gespeichert. Ein Zugriff auf die Ursprungsdatei ist nicht möglich.

6.10 Anzeige der Ergebnisse und des Analysenfortschritts im Hauptfenster

Die Messergebnisse und die Sequenz werden großflächig im Hintergrund der Arbeitsoberfläche im Hauptfenster angezeigt. Die Darstellung auf verschiedenen Karten im Hauptfenster bietet eine gute Übersicht über die Messergebnisse und statistische Auswertungen.

Folgende Karten können angewählt werden:

- **Sequenz/Ergebnisse** (Inhalt der Karten **Sequenz** und **Ergebnisse** auf einer Karte)
- **Sequenz** (Anzeige der aktuellen Sequenz)
- **Ergebnisse** (Darstellung der Messergebnisse)
- **Übersicht** (Zusammenfassung der Messergebnisse)

In der Statusleiste des Ergebnisfensters steht der Dateiname der aktuellen Ergebnisdarstellung.

Hauptfenster von ASpect PQ mit Ergebnisanzeige

Nr.	Probenname	Name	Pos.	Nr.	Name	Line	Typ	Ints.	SD(Ints.)	RSD%	Datum	Zeit	Einzelwerte(Ints.)
1	Kal.-Std.1		101	1	Kal.-Null	A167.022		14	2	10.84	13.01.2016	10:22	15 14 12
2	Kal.-Std.1		102	2	A096.152			129	72	55.67	13.01.2016	10:22	50 189 147
3	Kal.-Std.2		103	3	G0214.441			16	3	21.03	13.01.2016	10:22	12 18 17
4	Kal.-berechnen			4	G0226.502			9	3	28.79	13.01.2016	10:22	12 9 7
5	Probe		101	5	OZ67.716			40	33	82.69	13.01.2016	10:22	35 10 76
6	Probe		102	6	CU327.396			46	13	27.13	13.01.2016	10:22	35 44 60
7	Probe		103	7	Fe259.940			47	9	19.19	13.01.2016	10:22	58 43 41
8	Probe		104	8	N231.604			198	34	16.98	13.01.2016	10:22	184 -174 -237
9	Probe		105	9	Pb220.353			24	4	16.54	13.01.2016	10:22	19 26 26
10	Probe		106	10	Zn213.856			105	23	21.89	13.01.2016	10:22	87 98 131
11	Probe		107	11	Zn206.200			30	9	30.63	13.01.2016	10:22	23 41 27
12	Probe		108	12	A167.022			485	2	0.35	13.01.2016	10:22	488 483 486
13	Probe		109	13	A096.152			3988	93	2.34	13.01.2016	10:22	4087 3976 3901
14	Probe		110	14	G0214.441			4614	8	0.17	13.01.2016	10:22	4606 4613 4622
15				15	G0226.502			5385	32	0.59	13.01.2016	10:22	5350 5396 5410
16				16	OZ67.716			8831	44	0.49	13.01.2016	10:22	8808 8804 8882
17				17	CU327.396			3982	45	1.13	13.01.2016	10:22	3932 4020 3993
18				18	Fe259.940			3948	38	0.95	13.01.2016	10:22	3912 3946 3987
19				19	N231.604			3405	17	0.49	13.01.2016	10:22	3396 3424 3393
20				20	Pb220.353			345	3	1.00	13.01.2016	10:22	341 346 347
21				21	Zn213.856			5600	60	1.06	13.01.2016	10:22	5643 5626 5532
22				22	Zn206.200			3735	12	0.31	13.01.2016	10:22	3723 3726 3746
23	Kal.-Std.2			23	A167.022			2411	30	1.25	13.01.2016	10:22	2385 2405 2444
24	A096.152			24	A096.152			19736	283	1.43	13.01.2016	10:22	20039 19691 19478
25	G0214.441			25	G0214.441			22999	213	0.93	13.01.2016	10:22	22767 23009 23192
26	G0226.502			26	G0226.502			27072	106	0.39	13.01.2016	10:22	27083 26961 27172
27	OZ67.716			27	OZ67.716			45323	225	0.50	13.01.2016	10:22	45469 45435 45064
28	CU327.396			28	CU327.396			19450	104	0.53	13.01.2016	10:22	19481 19534 19334
29	Fe259.940			29	Fe259.940			19575	159	0.81	13.01.2016	10:22	19757 19460 19598
30	N231.604			30	N231.604			17495	190	1.10	13.01.2016	10:22	17445 17706 17333
31	Pb220.353			31	Pb220.353			1632	14	0.83	13.01.2016	10:22	1640 1640 1617
32	Zn213.856			32	Zn213.856			28289	153	0.54	13.01.2016	10:22	28197 28466 28205
33	Zn206.200			33	Zn206.200			18746	250	1.33	13.01.2016	10:22	18522 18699 19016
34	Kal.-Std.3			34	A167.022			4820	32	0.66	13.01.2016	10:22	4786 4849 4824
35	A096.152			35	A096.152			38550	324	0.84	13.01.2016	10:22	38924 38349 38376
36	G0214.441			36	G0214.441			46168	53	0.11	13.01.2016	10:22	46216 46175 46111
37	G0226.502			37	G0226.502			54897	473	0.86	13.01.2016	10:22	54343 54716 54540
38	OZ67.716			38	OZ67.716			80138	460	0.57	13.01.2016	10:22	80663 80847 80804

6.10.1 Karte Sequenz/Ergebnisse

Die Karte **Sequenz/Ergebnisse** enthält die Daten der beiden Tabellen **Sequenz** und **Ergebnisse**.

Sehen Sie dazu auch

- Karte Sequenz [► 76]
- Karte Ergebnisse [► 77]

6.10.2 Karte Sequenz

Auf der Karte **Sequenz** wird die aktive Sequenz aufgelistet.

Während der Analyse kann hier der Analysenfortschritt verfolgt werden. Die verschiedenen Proben und Sonderfunktionen sind in der 1. Spalte folgendermaßen gekennzeichnet:

Symbol	Bedeutung
-	Noch nicht gemessen / abgearbeitet.
O	Wird gerade gemessen.

Symbol	Bedeutung
+	Wurde bereits gemessen / abgearbeitet.

i HINWEIS! Nach der Messung kann eine Neumessung einer ausgewählten Probe erfolgen.

Dafür muss die Probenzeile in der Sequenz markiert und anschließend  in der Werkzeugleiste betätigt werden.

6.10.3 Karte Ergebnisse

Die Karte **Ergebnisse** enthält alle Messergebnisse und statistischen Auswertungen. Zur besseren Übersicht sind die Werte in weiteren Tabellen verteilt. Die Reiter für diese Tabellen befinden sich an der Unterkante des Fensters.

Die Werte sind nach Reihenfolge der Probenmessung geordnet. Für jede Probe sind die jeweils analysierten Elemente aufgeführt.

Tabelle Ints./Zeit

Die Tabelle enthält die Intensitäten und die statistischen Auswertungen entsprechend der Methodeneinstellungen (Fenster **Methode** | **QCC**).

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer in der Analysenfolge
Name	Name der Probe, des Standards oder der QC-Probe/Standard
Linie	Elementlinie
Typ	Interner Standard oder Analyt
Ints.	Mittelwert der gemessenen Einzelintensitäten der Probe
SD(Ints.)	Standardabweichung (Mittelwertstatistik)
RSD%	Relative Standardabweichung (Mittelwertstatistik)
Datum/Zeit	Messzeitpunkt der Messung
Einzelwerte (Ints.)	Einzelwerte der Intensitätsmessungen

Tabelle Konz.1

Die Tabelle **Konz.1** zeigt die analysierte Konzentration der Probe, wie sie dem ICP-OES Gerät zugeführt wurde, an. Als Einheit wird die in der Methode eingestellte Einheit der Kalibrierung verwendet.

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer in der Analysenfolge
Name	Name der Probe, des Standards oder der QC-Probe/Standard
Linie	Elementlinie
Typ	Interner Standard oder Analyt
Einheit	Konzentrationseinheit
Konz.1	Konzentration des Analyten in der Probe / Konzentration des Analyten im Standard
SD1	Standardabweichung der Konz.1 (Mittelwertstatistik)
RSD%	Relative Standardabweichung der Konz.1 (Mittelwertstatistik)
R	Spannweite der Konz.1 (Medianstatistik)
R%	Relative Spannweite der Konz.1 (Medianstatistik)
VB	Vertrauensbereich

Spalte	Beschreibung
VF	Vorverdünungsfaktor der Probe Faktor, mit dem die Originalprobe verdünnt wurde, bevor sie im Proben- geber platziert bzw. bei der Arbeit ohne Probengeber dem Plasma zuge- führt wird
Bem.	Besonderheiten bei der Wertermittlung
Ints.	Mittelwert der gemessenen Einzelintensitäten der Messwiederholungen
SD(Ints.)	Standardabweichung der Intensität (Mittelwertstatistik)
Datum/Zeit	Messzeitpunkt
Einzelwerte (Ints.)	Einzelwerte der Intensitäten der Messwiederholungen

Tabelle Konz.2

Die Tabelle **Konz.2** zeigt die Konzentration der Originalprobe an. Bei der Berechnung von Konz.2 werden die Probeninformationsdaten berücksichtigt:

- Vorverdünnung
- Einwaage bei Feststoffen und Lösungsvolumen
- Umrechnungsfaktoren für andere Einheiten

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer in der Analysenfolge
Name	Name der Probe, des Standards oder der QC-Probe/Standard
Linie	Elementlinie
Typ	Interner Standard oder Analyt
Einheit	Konzentrationseinheit
Konz.	Konzentration der Originalprobe unter Berücksichtigung der Probeninfor- mationsdaten
SD2	Standardabweichung der Konz.2 (Mittelwertstatistik)
RSD%	Relative Standardabweichung der Konz.2 (Mittelwertstatistik)
VB	Vertrauensbereich der Konz.2
100% norm.	Auf Prozentanteil normierte Konz.2
Ints.	Mittelwert aus den ermittelten Einzelintensitäten
SD(Ints.)	Standardabweichung der Intensität (Mittelwertstatistik)
R(Ints.)	Spannweite der Intensität (Medianstatistik)
Datum / Zeit	Messzeitpunkt
Einzelwerte (Ints.)	Einzelwerte der Intensitätsmessungen

Tabelle QC-Erg.

In der Tabelle **QC-Erg.** werden die Ergebnisse der QC-Proben ausgegeben:

- Sollwert und Istwert der Konzentration
- Wiederfindungsraten (alle Typen außer Blindwert)
- Reaktionen auf eventuelle Abweichungen (alle Typen außer Blindwert).

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer in der Analysenfolge
Name	Name der Probe, des Standards oder der QC-Probe/Standard
Linie	Elementlinie
Typ	Interner Standard oder Analyt

Spalte	Beschreibung
QC (für Kalibrierfunktionen)	R²(adj.) bzw. R Anstieg BEC Background Equivalent Concentration
QC(für QC-Proben, nicht für QC-Blindwert)	Konz.1 Sollwert WfR Wiederfindungsrate Bei QC-Proben und QC-Std. wird die Wiederfindungsrate der Konzentration bestimmt. Bei QC-Stock, QC-Trend und QC-Matrix wird die Wiederfindungsrate der durch die Aufstockung verursachten Konzentrationserhöhung ermittelt.
QC (für Leerwert-NWG)	SD Standardabweichung der Leerwertmessungen NWG Nachweisgrenze BG Bestimmungsgrenze
Bem.	Bemerkungen zu QC-Ereignisse (z. B. >Kal.)
Ints.	Mittelwert der gemessenen Einzelintensitäten
SD	Standardabweichung der Intensität (Mittelwertstatistik)
Datum / Zeit	Messzeitpunkt
Einzelwerte (Ints.)	Einzelwerte der Intensitätsmessungen

Tabelle Fehler

Treten innerhalb der Messung Fehler auf, so werden die entsprechenden Messungen in allen Tabellen rot markiert. In der Tabelle **Fehler** wird der aufgetretene Messfehler inklusive Fehlernummer in Schriftform dokumentiert.

Tabelle Einzelwerte

Die Tabelle **Einzelwerte** enthält die gemessenen Einzelwerte der Intensität und die dazugehörige Untergrundintensität.

Tabelle Proben-ID

Die Tabelle **Proben-ID** enthält die Probeninformationsdaten.

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer in der Analysenfolge
Name	Name der Probe, des Standards oder der QC-Probe/Standard
Linie	Elementlinie
Pos	Position der Probe im Probenwechsler
Vor-VF	Vorverdünnungsfaktor Faktor mit dem die Originalprobe verdünnt wurde, bevor sie im Probengeber platziert bzw. bei der Arbeit ohne Probengeber dem Spektrometer zugeführt wird. Der Faktor ist zur Berechnung der Konzentration der Originalprobe notwendig.
Einw.	Einwaage in Gramm Masse der Originalprobe, die in der Probenvorbehandlung in Lösung gebracht wurde (in g). Die Masse ist zur Berechnung der Konzentration der Originalprobe (Konz.2) notwendig.
Vol.	Volumen des Lösungsmittels, in dem die jeweilige Einwaage gelöst wurde (in mL). Der Wert ist zur Berechnung der Konzentration der Originalprobe (Konz.2) erforderlich.

Spalte	Beschreibung
Ges.einw.	Gesamteinwaage, beinhaltet Probe und Verdünnungsmittel (nur für Einheitentyp flüssig, flüssig grav.)
Name(2)	Weiterer Probenname aus der Probeninformationstabelle
AS-VF	Verdünnungsfaktor des Probengebers
BW-Korr.	Blindwertkorrektur aus Es wurde keine Blindwertkorrektur durchgeführt. ein Für Berechnung der Konzentration der Originalprobe wurde der zuletzt in der Sequenz gemessene Blindwert subtrahiert.

Tabelle Benutzerdefiniert

In der Tabelle **Benutzerdefiniert** können Sie die Parameter für die Ergebnisausgabe und deren Reihenfolge in der Tabelle selbst auswählen.

- ▶ Klicken Sie auf die Schaltfläche **Spalten auswählen** in der rechten unteren Ecke der Tabelle.
- ▶ Markieren Sie im Fenster **Spalten auswählen** die gewünschten Parameter per Mausklick.
- ▶ Um die Reihenfolge in der Anzeige zu ändern, markieren Sie den Parameter, dessen Position Sie ändern wollen, und verschieben ihn mit den Tasten  und  in der Liste.
- ▶ Nach der Rückkehr ins Hauptfenster werden die Ergebnisse angezeigt. Die Breite der Tabellenspalten können Sie verändern, in dem Sie den Mauszeiger auf die Tabellenlinie im Kopf der Tabelle führen (der Zeiger wandelt sich dabei in einen Doppelpfeil) und mit gedrückt gehaltener Maustaste die Tabellenspalte auf die gewünschte Breite aufziehen.

Hinweis:

Die Spaltenbreite wird in dieser Ansicht gespeichert. Bei den anderen Tabellen im Hauptfenster werden Änderungen der Spaltenbreite beim Verlassen zurückgesetzt.

Sehen Sie dazu auch

-  Optionen zum Analysenablauf [[▶ 141](#)]
-  Übersicht über Markierungen in der Werteanzeige [[▶ 163](#)]
-  Probeninformationsdaten (Proben-ID) [[▶ 62](#)]

6.10.4 Karte Übersicht

Auf der Karte **Übersicht** werden die Analysenergebnisse zusammengefasst. Dabei kann zwischen verschiedenen Ausgaben gewählt werden:

Wert	Beschreibung
Konz.1	Konzentration 1
Konz.(RSD%)	Konzentration 1 (relative Standardabweichung)
Konz.2	Konzentration 2
Konz.2(RSD%)	Konzentration 2 (relative Standardabweichung)
Ints.	Intensität
Ints.(RSD%)	Intensität (relative Standardabweichung)
Ints.(SD)	Intensität (Standardabweichung)
NWG	Nachweisgrenze

Wert	Beschreibung
BG	Bestimmungsgrenze
WfR(Sollw.)	Wiederfindungsrate (Sollwert)
R ² / Rekal.Faktor	Bestimmtheitsmaß / Rekalibrierfaktor
100% norm.	auf Prozentanteil normierte Konz. 2

Durch Aktivieren der Kontrollfelder können die folgenden Proben typen angezeigt werden:

- Probe
- QC-Probe
- Kal.-Std.
- Sonstige

Mit  öffnen Sie das Fenster **Drucken Übersicht**, aus dem Sie den Ausdruck der in der aktuellen Übersicht angezeigten Daten starten können.

Sehen Sie dazu auch

 Druckfunktionen in ASpect PQ [► 121]

6.11 Probeneinzelwerte anzeigen und bearbeiten

Sie können sich die Einzelwerte einer Probe anzeigen lassen und Einzelwerte aus der Berechnung der Probenkonzentration ausschließen.

- Führen Sie einen Rechtsklick auf die Zeile in der Ergebnistabelle aus und wählen Sie im Kontextmenü den Punkt **Probeneinzelwerte**.
Alternativ markieren Sie die Probenzeile und wählen Sie den Menübefehl **Ansicht | Probeneinzelwerte**.

Fenster Probeneinzelwerte

Probeneinzelwerte - [Sample 1]

Cu324.754

Nr.	Ints.	Konz.1 µg/L	Bem.
1	543587	33.10	
2	527508	31.49	
3	535970	32.34	

<

>

Löschen

Nr.:

95

Typ:

Probe

Name:

Sample 1

Datum/Zeit:

09.06.2020 10:07

Ints.(Mw.):

535688

SD:

8043

RSD:

1.5

<<

<

>

>>

[Spektren bearbeiten](#)

Schließen

Anzeige der Einzelwerte (Tabelle)

Die Probeneinzelwerte werden in der Tabelle angezeigt.

Tabellenspalte	Beschreibung
Nr.	Nummer des Einzelwertes innerhalb der Probenmessung
Ints.	Intensität des Einzelwertes
Konz.1	Konzentration des Analyten in der analysierten Probe
Bem.	keine Der Einzelwert geht in die Berechnung des Probenmittelwerts ein. #MAN Der Wert wurde manuell aus der Berechnung des Probenwerts herausgenommen. #KOR Der Wert wurde auf Grund des Grubbs-Ausreißertests automatisch aus der Berechnung des Probenwerts ausgeschlossen.

Angabe zur Probe

Feld	Beschreibung
Nr.	Nummer der Messung in der Ergebnistabelle
Typ	Probentyp (Probe, Standard oder QC-Probentyp)
Name	Probenname
Datum / Zeit	Datum und Zeit der in der Tabelle markierten Messung
Ints. (Mw.)	Intensität gemittelt über alle Einzelwerte
SD	Standardabweichung (Mittelwertstatistik). Die Anzeige erfolgt unabhängig von der für die Messung gewählten Statistikmethode (Mittelwert/Median).
RSD	relative Standardabweichung (Mittelwertstatistik) Die Anzeige erfolgt unabhängig von der für die Messung gewählten Statistikmethode (Mittelwert/Median).

Weitere Schaltflächen und Optionen im Fenster Probeneinzelwerte

Option / Schaltflächen	Beschreibung
Löschen / Reaktiv.	Probeneinzelwert aus der Mittelwertberechnung herausnehmen bzw. wieder für die Berechnung reaktivieren
Spektren bearbeiten	Wellenlängenabhängige Linienspektren anzeigen
Ersetzen durch Eintrag Nr.	Nur für Kalibrierstandards Aktuelle Probe soll bei einer Nachberechnung durch die Probe an Position Anr. der Ergebnistabelle ersetzt werden
	Zwischen den Linien einzelner Proben und von einer Probe zur nächsten in der Ergebnistabelle wechseln

Probeneinzelwerte ausschließen

Ein Einzelwert kann aus der Berechnung des Probenmittelwerts manuell ausgeschlossen werden.

- ▶ Markieren Sie den auszuschließenden Einzelwert in der Tabelle.
- ▶ Mit **Löschen** deaktivieren Sie den Wert für die Berechnung des Probenmittelwerts bei einer Nachberechnung der Ergebnisse.
- ▶ Mit **Reaktiv.** schließen Sie den markierten Einzelwert wieder in die Berechnung ein.

i HINWEIS! Mit dem Grubbs-Ausreißertest können Ausreißer unter den Einzelwerten während der Analyse automatisch gesucht und eliminiert werden.

Sehen Sie dazu auch

 Intensitätsspektren anzeigen und bearbeiten [► 83]

6.12 Intensitätsspektren anzeigen und bearbeiten

Die Darstellung der Intensitätsspektren im Fenster **Spektren bearbeiten** nutzen Sie für folgende Aufgaben:

- Peakschwerpunkt einer Analysenlinie ermitteln und in der Liniendatei speichern
- Untergrundkorrektur unter Berücksichtigung der Probenmatrix ermitteln und in die Methode übernehmen
- Spektrale Korrekturen erstellen
- Linien neben der Analysenlinie identifizieren

Zu jeder Messung im Ergebnisfenster können die Intensitätsspektren angezeigt und bearbeitet werden.

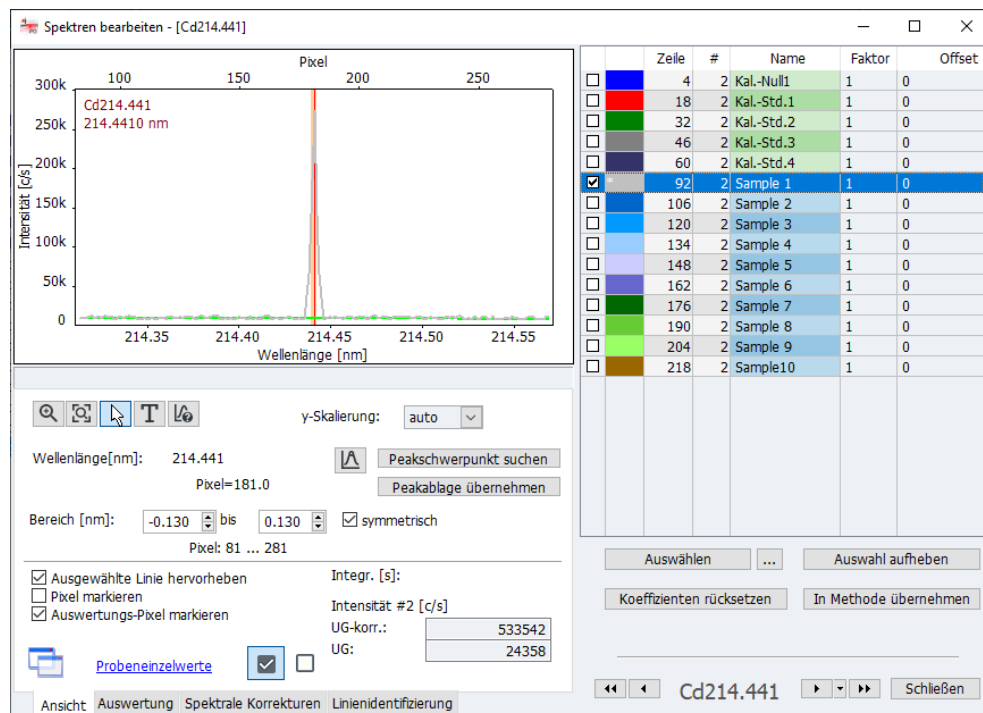
- Öffnen Sie das Fenster **Spektren bearbeiten** durch einen Doppelklick auf die entsprechende Probenzeile in der Ergebnistabelle.
Alternativ führen Sie einen Rechtsklick auf die Zeile in der Ergebnistabelle aus und klicken Sie im Kontextmenü auf **Spektren bearbeiten**. Sie können auch eine Probenzeile markieren und den Menübefehl **Ansicht | Spektren bearbeiten** wählen.

Im Fenster **Spektren bearbeiten** werden für jeweils eine Analysenlinie alle gemessenen Proben mit allen Einzelwerten aufgelistet. Zwischen den einzelnen Analysenlinien kann gewechselt werden.

Auf der linken Seite des Fensters **Spektren bearbeiten** befindet sich die grafische Darstellung des Intensitätsspektrums der gewählten Proben oder Proben und vier Registerkarten zur Auswertung und Bearbeitung des Spektrums. Auf der rechten Seite werden die anzuzeigenden Probeneinzelwerte in der Übersicht ausgewählt.

6.12.1 Spektren anzeigen – Fenster Spektren bearbeiten / Ansicht

Das Fenster **Spektren bearbeiten | Ansicht** zeigt eine Übersicht der Probenspektren an. Sie können die Lage eines Peaks bestimmen und die gefundenen Parameter in die Linien-/Wellenlängendatei und die Methode übernehmen.

Fenster Spektren bearbeiten |
AnsichtSpektren auswählen / Proben-
liste

In der Probenliste auf der rechten Seite werden alle Probeneinzelwerte der Analyselinie aufgelistet.

- ▶ Aktivieren Sie die Kontrollkästchen der Einzelwerte, die Sie in der Grafik anzeigen wollen.
Die Spektren der Probeneinzelwerte werden überlagert dargestellt. Den einzelnen Spektren ist dabei die Farbe des Feldes vorn in der Tabelle zugeordnet.
- ▶ Die mit der Maus markierte Einzelprobe (blauer Balken in der Tabelle) ist in der Grafik dick hervorgehoben, wenn die Option **Ausgewählte Linie hervorheben** in der linken unteren Ecke des Fensters aktiviert ist.
- ▶ Die Anzeige der Proben/Wiederholmessungen in der Probenliste und die Auswahl für die grafische Anzeige der Spektren (Aktivierung des Kontrollkästchens in der Probenliste) können Sie mit den Schaltflächen unter der Tabelle filtern:
 - Klicken Sie neben **Auswählen** auf ...
 - Im Fenster **Auswahl** nehmen Sie folgende Einstellungen vor:

Option	Beschreibung
alle	Alle Zeilen der Ergebnisliste im Hauptfenster für die grafische Anzeige auswählen (Kontrollkästchen für die grafische Anzeige aktivieren).
von/bis	Nur die Spektren zwischen den eingestellten Zeilen von/bis der Ergebnisliste auswählen.
Wiederholmessung	Probeneinzelwerte einer Probe auswählen: - alle Alle Probeneinzelwerte einer Probe auswählen. - Ordnungszahl, z. B. "2." Nur den ausgewählten Einzelwert einer Probe auswählen
nur ausgewählte Wiederholmessung(en) anzeigen	Wenn aktiv, werden in der Probenliste nur die Einträge für die ausgewählte Wiederholmessung angezeigt. Wenn inaktiv, werden alle Einzelspektren angezeigt und die oben ausgewählten Einträge (alle bzw. von/bis) des Hauptfensters geladen.

- Mit einem Klick auf **Auswählen** nehmen Sie die Spektrenanzeige und -auswahl mit den oben eingestellten Parametern vor.
- Mit **Auswahl aufheben** deaktivieren Sie alle Kontrollkästchen für die Anzeige der Einzelwerte.

Faktor und Offset eingeben

- Für jedes Spektrum können Sie einen Faktor und/oder einen Offset in der Proben-tabelle eingeben. Ein so manipuliertes Spektrum wird gespreizt/gestaucht und entlang der y-Achse verschoben.
- Mit einem Klick auf **Koeffizienten rücksetzen** werden der Faktor und der Offset wieder zurückgesetzt und das Spektrum in seinem Ausgangszustand dargestellt.

Anzeige der Linienspektren

Auf der linken Seite werden die ausgewählten Spektren angezeigt. Dabei wird die Intensität in Counts/Sekunde gegen die Wellenlänge in Nanometer aufgetragen. Am oberen Rand der Grafik ist die Pixelzuordnung abgebildet. Das Spektrometer ist so justiert, dass auf dem Messpixel, z. B. 180, der Peakschwerpunkt abgebildet ist. Ablagen des Peak-schwerpunktes müssen für jede Analysenlinie korrigiert werden, siehe unten.

Die Schaltflächen haben für die Spektrenansicht folgende Funktionen:

Option / Schaltfläche	Beschreibung
	Grafikzoom aktivieren. Nach Anklicken mit gedrückter linker Maustaste den zu vergrößernden Spektrenausschnitt markieren.
	Nach Zoom ursprüngliche Koordinaten wiederherstellen.
	Markierungsmodus in Darstellungen des Signalverlaufs oder Spektren aktivieren. Mit der linken Maustaste werden Messpunkte ausgewählt. Die Werte des ausgewählten Messpunkts werden im Ausgabefeld unter den Schaltflächen angezeigt.
	Textmodus aktivieren. Bei gedrückter linker Maustaste kann ein Bereich für ein Fenster ausgewählt werden, mit dem Text zur Grafik hinzugefügt werden kann. Ein Doppelklick auf bestehenden Text öffnet das Fenster, um Text zu ändern oder zu löschen. Mit Strg + rechte Maustaste kann bestehender Text verschoben werden.
	Modus zur Linien-Identifikation aktivieren. Durch Klicken oder Ziehen mit der Maus wird in einer Liniendatenbank nach Elementlinien bei der ausgewählten Wellenlängenposition gesucht. Die gefundene Linie wird unter der Grafik angezeigt.
y-Skalierung	Skalierung der Grafik wählen: auto. Autoskalierung: Das Spektrum wird mit optimaler Ordinaten-dehnung dargestellt. Wert Manuelle Skalierung. Die obere Ordinatengrenze ist in der Liste auszuwählen.
Wellenlänge	Wellenlänge der Analysenlinie anzeigen.
	Peakschwerpunkt manuell setzen.
Peakschwerpunkt suchen	Peak automatisch suchen und Ablage korrigieren.
Peakablage übernehmen	Peakablage in der Linienbibliothek speichern. Die Ablage wird ab diesem Zeitpunkt für jede Messung dieser Elementlinie verwendet.

Option / Schaltfläche	Beschreibung
Bereich [nm]	Wellenlängenbereich unter- und oberhalb der Analysenlinie wählen. Dieser Wellenlängenbereich steht zur Spektralauswertung, z. B. der Untergrundkorrektur, zur Verfügung. Ist das Kontrollkästchen symmetrisch aktiviert, ist der Wellenlängenbereich unter- und oberhalb der Wellenlänge gleich groß. Unter den Eingabefeldern wird der entsprechende Pixelbereich angezeigt. Die Einstellungen zum Wellenlängenbereich der ausgewählten Linie übertragen Sie mit einem Klick auf In Methode übernehmen in die aktuelle Messmethode. Dieser Bereich wird für die dynamische Untergrundanpassung (oder automatische Untergrundkorrektur) zur Berechnung verwendet. Die Daten werden auch im Methodenfenster auf der Karte Auswertung geändert.
Ausgewählte Linie hervorheben	Das in der rechten Übersicht markierte Einzelspektrum wird mit einer dicken Linie in der Grafik hervorgehoben.
Pixel markieren	Pixel werden in der Grafik mit einem Kreis markiert.
Auswertungs-Pixel markieren	Der zentrale Auswertungs-Pixel am Peakschwerpunkt wird mit einer roten Linie hervorgehoben. Werden mehrere Pixel zur Auswertung herangezogen, ist deren Bereich hellrot markiert.
Intensität	UG-korr. untergrundkorrigierte Intensität UG Intensität des Untergrundes
Probeneinzelwerte	Link zum Fenster Probeneinzelwerte
	Wenn das Symbol auf diese Weise markiert ist, wird die Linie in der Methode verwendet. Auf diese Weise können Sie im Fenster Spektren bearbeiten während der Methodenentwicklung geeignete Linien auswählen.
	Linie nicht in der Methode verwenden.

Peakschwerpunkt automatisch setzen

Während der Methodenentwicklung müssen Sie gerätebedingte Peakablagen und Ablagen, die durch die Linieninterferenzen verursacht werden, z. B. Dubletten, korrigieren.

- ▶ Klicken Sie auf **Peakschwerpunkt suchen**. Mit der automatischen Bestimmung des Peakschwerpunkts können die meisten Peaks sehr gut bestimmt werden.
Alternativ klicken Sie auf  und markieren den Peakschwerpunkt manuell im Spektrum.
- ▶ Optional können Sie die Ergebnisse neu berechnen, um die neue Peakablage zu beurteilen.
Wechseln Sie zum Ergebnisfenster und starten Sie mit einem Klick auf  die Neuberechnung.
- ▶ Speichern Sie die gefundene Peakablage mit **Peakablage übernehmen** in die Linien/Wellenlängendatei des Gerätes.
 - ✓ Die Daten stehen nun für jede weitere Auswertung der Analysenlinie zur Verfügung.

Sehen Sie dazu auch

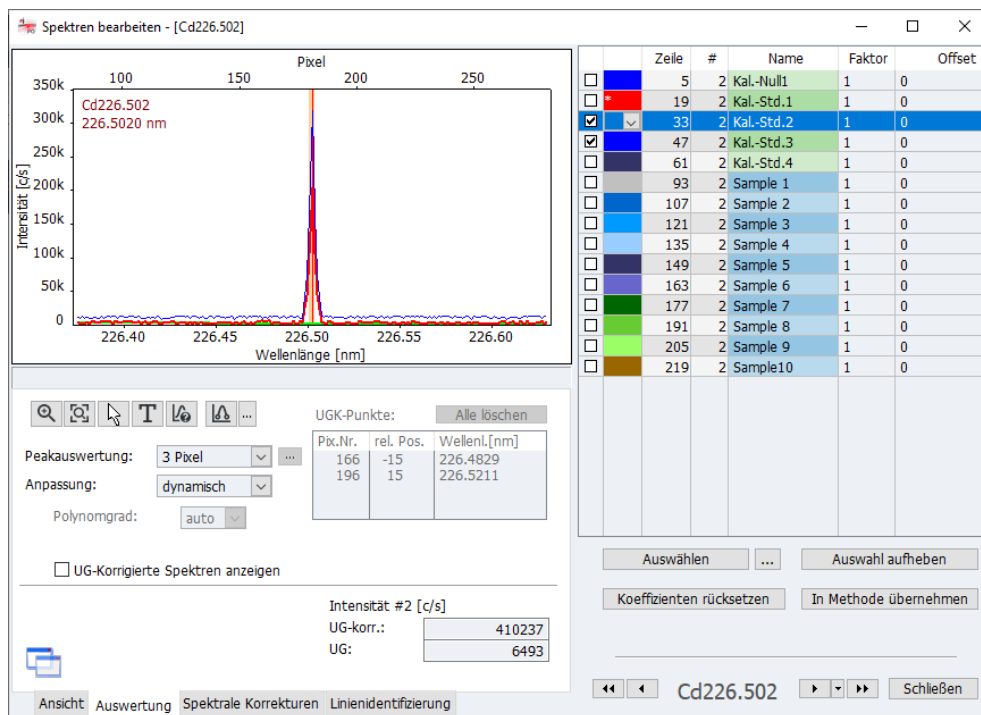
- Analysenlinien spezifizieren (Fenster Methode | Linien) [► 26]
- Analyseergebnisse Neuberechnen [► 72]
- Linien finden – Fenster Spektren bearbeiten | Linienidentifizierung [► 91]

6.12.2 Peak auswerten und Untergrundkorrektur bestimmen – Fenster Spektren bearbeiten | Auswertung

Kontinuierliche Untergrundemissionen, die Intensitätsschwankungen über einen breiten spektralen Bereich um eine Analysenlinie verursachen, können mit der Untergrund-Korrektur kompensiert werden. Dabei werden Pixel (Untergrundkorrektur-Punkte) auf beiden Seiten der Analysenlinie ausgewählt, eine Regression durch die Punkte berechnet und die Regressionskurve für die Untergrundkorrektur verwendet.

Im statischen Verfahren zur Auswahl der Untergrundkorrektur-Punkte werden die Punkte manuell gesetzt und der Polynomgrad der Regressionskurve selbst bestimmt. Im dynamischen Verfahren wird die Regressionskurve mit dem ABC-Algorithmus (ABC = automatic baseline correction) automatisch berechnet.

Eine diskontinuierliche Untergrundstörung, z. B. durch Linienüberlagerung mit einem Matrixelement, kann mit Hilfe von Korrekturspektren minimiert werden.



Übersicht der Elemente zur Peakauswertung und Untergrundkorrektur

Die Schaltflächen zur Spektrenansicht, einige Wertausgaben sowie die Auswahl der Probe einzelwerte sind im Abschnitt über das Fenster **Spektren bearbeiten | Ansicht** beschrieben.

Option/ Schaltfläche	Beschreibung
Peakauswertung	Anzahl Pixel für die Peakauswertung einstellen. 1 Das Messsignal wird nur am Pixel ermittelt, auf dem der Peakschwerpunkt liegt. Wert > 1 Anzahl Pixel, über welche das Messsignal ermittelt wird Die Einzelsignale der Pixel werden summiert. Das Ergebnis ist daher größer als das Peakmaximum. Der Pixel mit dem Peakschwerpunkt liegt in der Mitte des Bereiches. Höhe Die Peakhöhe wird zur Auswertung herangezogen. Benutzerdef. Der Auswertebereich wird vom Nutzer festgelegt. Diese Option wird bevorzugt für die Auswertung von Dubletten verwendet. Nach einem Klick auf  aktivieren Sie in der Liste alle Pixel, die zur Auswertung herangezogen werden.
Anpassung	Art der Untergrundkorrektur wählen: dynamisch Die Untergrundkorrektur wird automatisch mit einem mathematischen Algorithmus berechnet. Weitere Einstellungen sind bei dieser Option nicht nötig. statisch Die Untergrundkorrektur-Punkte werden manuell per Mausklick im Spektrum gesetzt. Für die Korrekturfunktion ist zusätzlich der Polynomgrad auszuwählen.
	Bei statischer Anpassung die Untergrundkorrektur-Punkte setzen bzw. löschen Beim Überfahren der Spektrengrafik mit der Maus wird ein Kreuz angezeigt. Ein Klick auf  öffnet die Funktionsliste: Untergrundkorrektur-Punkte setzen Setzen Sie per Mausklick die Korrekturpunkte an die gewünschte Wellenlänge auf das Spektrum. Wenn Sie mit gedrückter Maustaste über einen Bereich fahren, markieren Sie den gesamten Bereich. Untergrundkorrektur-Punkte löschen Ein Klick auf einen bereits ausgewählten Punkt löscht den betreffenden Untergrundkorrektur-Punkt. Durch Ziehen mit der Maus können Bereiche gelöscht werden. Alle Untergrundkorrektur-Punkte löschen Alle ausgewählten Punkte löschen
UGK-Punkte Alle löschen	Alle manuell gesetzten Untergrundkorrektur-Punkte löschen
Tabelle	Anzeige der manuell gesetzten Untergrundkorrektur-Punkte
Polynomgrad	Polynomgrad für die Regression der Untergrundkorrektur-Kurve wählen Bei der Option auto wird die Regression automatisch gewählt.
UG-Korrigierte Spektren anzeigen	Untergrundkorrigierte Spektren darstellen Der angepasste Untergrund (grüne Linie) wird vom Probenspektrum subtrahiert. Der Untergrund entspricht damit der Nulllinie.

Daten in die Methode übernehmen

Die Einstellungen zur Peakauswertung und zur Untergrundkorrektur der ausgewählten Linie übertragen Sie mit einem Klick auf **In Methode übernehmen** in die aktuelle Messmethode. Die Daten werden auch im Methodenfenster auf der Karte **Auswertung** geändert.

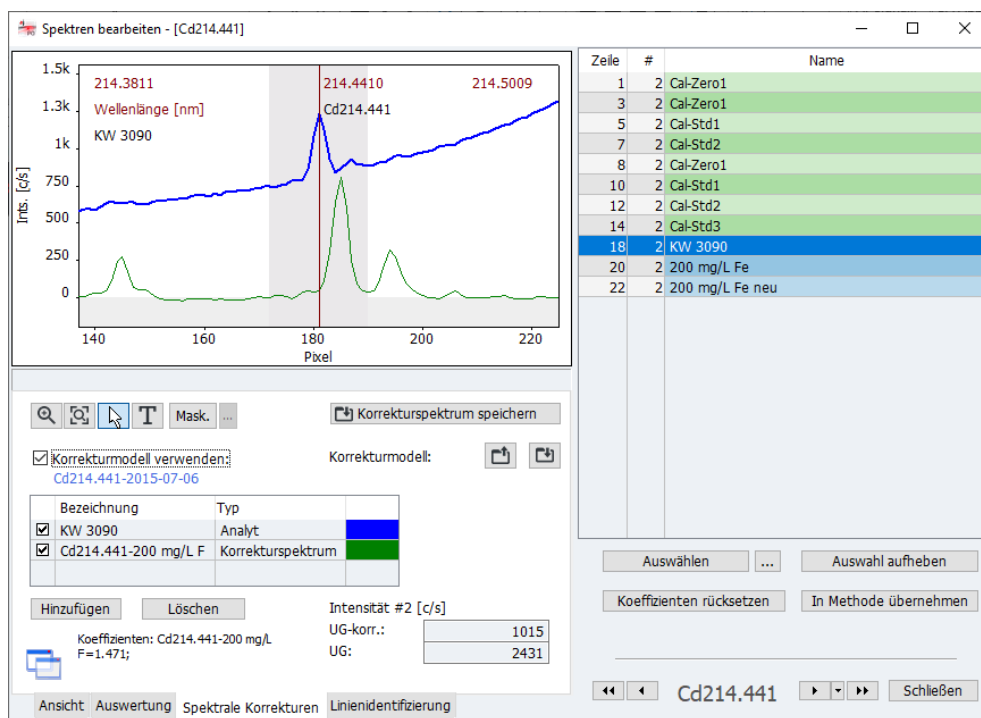
Sehen Sie dazu auch

-  Spektrale Störungen beseitigen – Fenster Spektren bearbeiten | Spektrale Korrekturen [► 89]
-  Spektren anzeigen – Fenster Spektren bearbeiten / Ansicht [► 83]

6.12.3 Spektrale Störungen beseitigen – Fenster Spektren bearbeiten | Spektrale Korrekturen

In der Routine wird versucht, möglichst Linien für die Analyse zu wählen, die ungestört sind und/oder einen einfach zu korrigierenden Untergrund besitzen. Sollte das nicht möglich sein, können mit Hilfe von Korrekturspektren die diskontinuierlichen Störungen, z. B. verursacht durch Linienüberlagerungen mit einem oder mehreren Matrixelementen, beseitigt werden. Die Korrekturspektren einer Matrix werden jeweils in einem Modell zusammengefasst und können dann mit der Linie in der Methode verknüpft werden.

Die Funktionen zum Speichern der einzelnen Korrekturspektren und zum Zusammenfassen des Korrekturmodells befinden sich im Fenster **Spektren bearbeiten | Spektrale Korrekturen**.



Option/Schaltfläche	Beschreibung
Korrekturspektrum speichern	Spektren der Reinkomponenten einer Matrix als Korrekturspektren speichern
Korrekturmodell verwenden	Wenn aktiviert, wird das Korrekturmodell auf den Analyten angewendet

Option/Schaltfläche	Beschreibung
Korrekturmodell	 Das aktuelle Korrekturmodell speichern
	 Ein vorhandenes Korrekturmodell laden

In der Linientabelle werden der Analyt und die im Modell verwendeten Korrekturspektren aufgelistet. Durch Aktivieren der Kontrollkästchen werden die einzelnen Spektren in der Grafik angezeigt. Mit **Hinzufügen** wird das Korrekturmodell um weitere Spektren ergänzt. Mit **Löschen** wird das mit der Maus markierte Spektrum aus dem Modell gelöscht.

i HINWEIS! Alle Korrekturspektren in der Linientabelle werden im Modell für die Berechnung herangezogen, unabhängig davon, ob das Kontrollkästchen zur Anzeige aktiviert ist oder nicht. Soll ein Korrekturspektrum nicht berücksichtigt werden, muss es gelöscht werden.

6.12.3.1 Ein Korrekturmodell für spektrale Korrekturen erstellen

Für die Erstellung und Verwendung eines Korrekturmodells für eine Analysenlinie müssen Sie folgende Schritte ausführen:

1. Identifizieren Sie mögliche Interferenzen.
2. Erstellen und speichern Sie die Korrekturspektren.
3. Erstellen Sie ein Korrekturmodell.
4. Übernehmen Sie die Parameter der Analysenlinie mit Korrekturmodell in die Methode.

Schritt 1: Interferenzen identifizieren

- Erstellen Sie eine Methode mit der Analysenlinie.
- Messen Sie den Analyt in der Matrix und laden Sie das Spektrum in das Fenster **Spektren bearbeiten** (Doppelklick auf die Probenzeile im Hauptfenster).
- Identifizieren Sie im Fenster **Spektren bearbeiten | Linienidentifizierung** die möglichen Störlinien.

Schritt 2: Korrekturspektren messen und speichern

- Fügen Sie der Sequenz die Messung der störenden Matrixkomponenten, die spektrale Überlagerung verursachen, hinzu und messen Sie diese Komponenten in Einzelelementlösungen.
Hinweis:
Die Konzentrationen der Matrixkomponenten müssen nicht mit denen in den Proben übereinstimmen, sondern müssen lediglich so hoch sein, dass die Spektren deutliche Intensitätswerte aufweisen. Für eine richtige Spektrenkorrektur messen Sie jeweils nur eine Komponente als Reinsubstanz.
- Laden Sie ein Spektrum einer Matrixkomponente in das Fenster **Spektren bearbeiten | Spektrale Korrekturen**.
- Klicken Sie auf **Korrekturspektrum speichern**.
✓ Das Datenbankfenster zum Speichern der Korrekturspektren erscheint.
- Vergeben Sie einen Namen und schließen Sie den Vorgang mit Klick auf **Speichern** ab.
- Speichern Sie auf diese Weise die Spektren der anderen Matrixkomponenten.

Schritt 3: Korrekturmodell erstellen

- ▶ Laden Sie erneut das Spektrum des Analyten in der Matrix.
- ▶ Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Korrekturmodell verwenden**.
- ▶ Öffnen Sie mit Klick auf **Hinzufügen** die Auswahl der bereits abgespeicherten Korrekturspektren.
- ▶ Markieren Sie ein Korrekturspektrum in der Liste und klicken Sie auf **Laden**.
- ▶ Fügen Sie auf diese Weise alle Korrekturspektren hinzu.
- ▶ Überprüfen Sie in der Spektrenansicht, ob das resultierende Probenspektrum nun frei von Überlagerungen ist.
- ▶ Mit der Schaltfläche **Mask** können Sie mit gedrückt gehaltener Maustaste Bereiche maskieren, die nicht zur Berechnung des Korrekturmodells herangezogen werden sollen.
Standardmäßig ist bereits der Bereich der Analysenlinie (± 9 Pixel) maskiert. Eine Maskierung weiterer Bereiche kann notwendig werden, wenn zur Aufnahme keine Reinsubstanzen zur Verfügung standen und diese Verunreinigungen in veränderlichen Anteilen vorkommen können.
- ▶ Zum Speichern des Korrekturmodells klicken Sie auf  und vergeben Sie einen Namen für das Modell. Schließen Sie den Vorgang mit **Speichern** ab.

Schritt 4: Analysenlinie mit Korrekturmodell in die Methode übernehmen

- ▶ Übertragen Sie die Parameter der Analysenlinie mit dem Korrekturmodell mit **In Methode übernehmen** in die aktuelle Methode.
 - ✓ Im Fenster **Methode | Auswertung** ist die Analysenlinie in der Spalte **Korrektur** mit **LSM** (Least Square Model) gekennzeichnet.

Nach dem Speichern der Methode werden die zukünftigen Messungen mit dieser Methode mit dem erstellten Korrekturmodell durchgeführt. Bereits erfolgte Messungen können mit der neuen Methodenversion nachberechnet werden, sodass eine Wiederholung der Messung nicht nötig ist.

Die spektralen Korrekturmodelle und Korrekturspektren werden mit den Ergebnisdaten gespeichert. Werden die Ergebnisdaten auf einen anderen Computer übertragen, auf welchem die Korrekturmodelle nicht gespeichert sind, so werden die Modelle nach Rückfrage importiert.

6.12.3.2 Linien finden –Fenster Spektren bearbeiten | Linienidentifizierung

Im Fenster **Spektren bearbeiten | Linienidentifizierung** können Sie Linien in den gemessenen Spektren basierend auf der Liniendatenbank identifizieren.

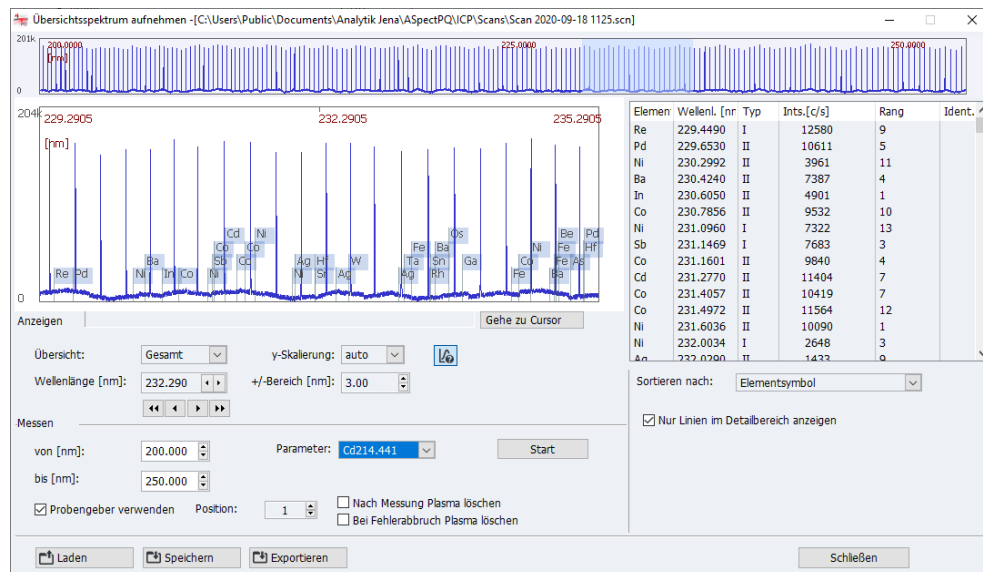


In der Tabelle unter dem Spektrum werden alle im Spektrabschnitt identifizierten Linien angezeigt.

- ▶ Aktivieren Sie die Schaltfläche
- ▶ Klicken Sie auf die interessierenden Peaks im Spektrum.
Die nächstgelegene Linie wird unter dem Spektrum angezeigt und in der Tabelle markiert.
- ▶ Umgekehrt können Sie auch eine Linie in der Tabelle wählen, die dann im Spektrum angezeigt wird.

6.13 Übersichtsspektrum aufnehmen

Mit dem Menüpunkt **Methodenentwicklung | Übersichtsspektrum** können Sie in einem vorgegebenen Wellenlängenbereich ein Übersichtsspektrum aufnehmen.



- ▶ Wählen Sie den Menüpunkt **Methodenentwicklung | Übersichtsspektrum**.
- ▶ Geben Sie im Bereich **Messen** den gewünschten Wellenlängenbereich (**von/bis**) ein.
- ▶ Wenn Sie eine Methode aktiviert haben, können Sie die Parameter einer Linie der Methode für den Spektren-Scan wählen. Wenn keine Methode geladen ist, werden voreingestellte Parameter verwendet.
- ▶ Stellen Sie die Probe bereit. Wenn Sie mit einem Probengeber arbeiten möchten, aktivieren Sie die Option **Probengeber verwenden** und wählen Sie die Position der Probe auf dem Probengeber aus.
- ▶ Starten Sie den Scan mit Klick auf **Start**.
Nach Abschluss des Scans wird das Übersichtsspektrum im oberen Bereich des Fensters angezeigt.
- ▶ Wenn Sie auf einen Abschnitt im Übersichtsspektrum klicken, wird ein Detailbereich mit der gewählten Linie in der Grafik angezeigt. Die Breite des Detailbereichs stellen Sie in der Liste **+/-Bereich** ein.
- ▶ Die gefundenen Linien werden in der Tabelle auf der rechten Seite ausgegeben. Die Anzeige können Sie auf den gezeigten Spektralbereich mit der Option **Nur Linien im Detailbereich anzeigen** eingrenzen.

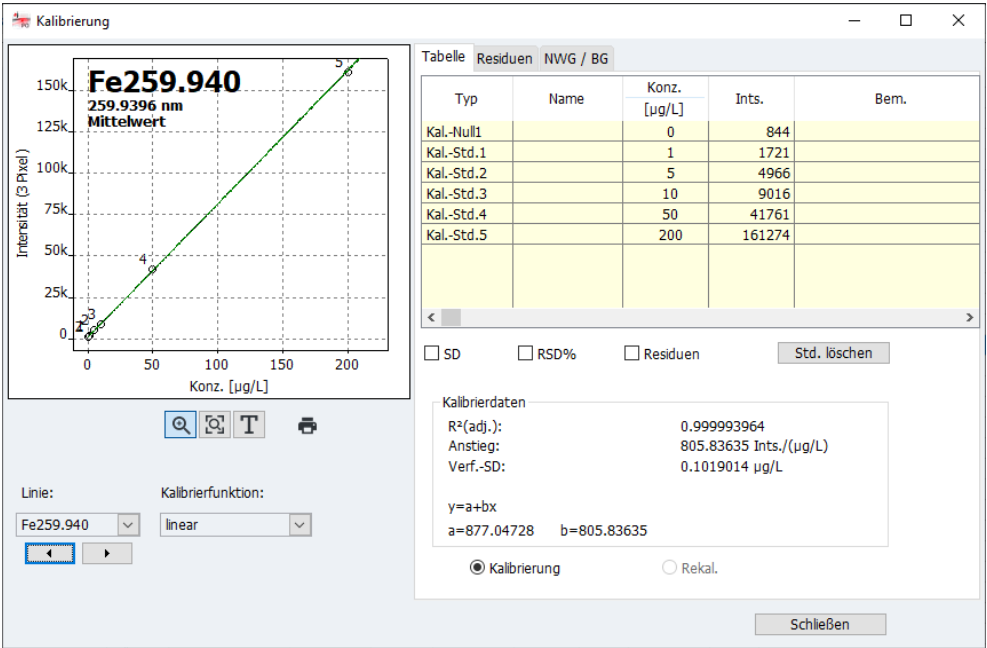
7 Kalibrierung

Die Kalibrierung erfolgt während der Messung entsprechend den Vereinbarungen in der Sequenz. Die Kalibrierkurven und -funktionen können nach der Messung angezeigt und bearbeitet werden.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Kalibrierung** mit einem Klick auf  in der Symbolleiste. Alternativ führen Sie einen Doppelklick auf eine der Sequenzzeilen **Kalib. berechnen** aus oder wählen Sie den Menüpunkt **Methodenentwicklung | Kalibrierung**.

Fenster Kalibrierung

Das Fenster **Kalibrierung** zeigt die unter Berücksichtigung der Kurvenparameter berechnete Kalibrierkurve.



Das Fenster enthält für jede in der Sequenz vereinbarte Analysenlinie:

- grafische Darstellung der Kalibrierkurve
- Kalibriertabelle
- Parameter
- Residuen
- Nachweis- und Bestimmungsgrenze

Linie auswählen

Im Listenfeld **Linie** wählen Sie die Analysenlinie für die Anzeige der Kalibrierung aus. Mit den Pfeiltasten unter der Liste wechseln Sie zwischen den Anzeigen der einzelnen Linien.

Kalibrierfunktion wählen

In der Liste **Kalibrierfunktion** können Sie zwischen den möglichen Regressionsberechnungen der Kalibrierkurve wählen:

Kalibrieroption	Beschreibung
linear	Linearer Verlauf der Kalibrierfunktion $y = a + bx$
nichtlinear ratio.	Nichtlinearer Verlauf der Kalibrierfunktion beschrieben durch eine gebrochenrationale Funktion $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$

Kalibrieroption	Beschreibung
nichtlinear quadr.	Nichtlinearer Verlauf der Kalibrierfunktion beschrieben durch eine quadratische Funktion $y = a + bx + cx^2$
automatisch	Für die Kalibrierung wird jeweils eine lineare und eine nichtlineare Funktion berechnet. Anschließend erfolgt ein Mandel-Test, bei welchem die Summen der quadrierten Residuen verglichen werden. Ist die Summe für die nichtlineare Funktion signifikant geringer als jene für die lineare Funktion, wird der nichtlineare Verlauf der Kalibrierkurve gewählt, anderenfalls wird der lineare Verlauf der Kalibrierkurve verwendet. Die nichtlineare Funktion wird im Fenster Optionen Kalibrierung gewählt. Als Standardeinstellung ist hier die gebrochen rationale Funktion vorgesehen.

Sehen Sie dazu auch

📖 Allgemeine Einstellungen für die Kalibration und Blindwertkorrektur [► 142]

7.1 Darstellung der Kalibrierkurve

In der grafischen Darstellung werden die Messpunkte, die berechnete Kalibrierkurve sowie die Residuen angezeigt. Die Nummern an den Messpunkten entsprechen jenen auf der Karte **Tabelle**. Der Kalibriernullpunkt ist mit Z (Zero) gekennzeichnet.

Farbige Kennzeichnung

Messpunkte sind auf folgende Weise gekennzeichnet:

Farbe	Bedeutung
Schwarz	Normaler Messpunkt
Hellgrau	Gelöscht/Ausreißer (nicht in Berechnung einbezogen)
Blau	Ausreißerverdächtig (in die Berechnung einbezogen)

Die Kurven sind ebenfalls farbig markiert:

Kurvenfarbe	Bedeutung
Schwarz	Kalibrierkurve im gültigen Kalibrierbereich
Blau	Kalibrierkurve außerhalb des gültigen Kalibrierbereichs
Grün	Untere und obere Grenze des Prognosebereichs im gültigen Kalibrierbereich
Hellgrau	Untere und obere Grenze des Prognosebereichs außerhalb des gültigen Kalibrierbereichs

Hinweis zum Prognose- bzw. Konfidenzbereich

Die Lage des Prognosebandes ist abhängig von der gewählten statistischen Sicherheit und ein Maß für die Güte der Kalibrierung, von der letztlich auch die statistische Sicherheit der Analysenproben-Messungen abhängt. Außerdem dient das Prognoseband zur Feststellung von ausreißerverdächtigen Kalibrierpunkten. Die statistische Sicherheit wählen Sie im Fenster **Methode | Statistik**. Im Fenster **Optionen | Kalibrierung** können Sie zwischen der Anzeige des Prognosebandes oder des Konfidenzbandes wählen.

Kalibrierkurve vergrößern

Nach einem Klick auf  kann mit gedrückter linker Maustaste ein Grafikbereich vergrößert werden.  macht die Vergrößerung wieder rückgängig.

Notiz einfügen

In die Grafik kann ein Textfeld für eine Notiz eingefügt werden.

- ▶ Klicken Sie auf **T**.
- ▶ Ziehen Sie mit gedrückter linker Maustaste den Rahmen für das Textfeld auf der Grafik auf.
- ▶ Wählen Sie im geöffneten Eingabefenster mit Klick auf **Font** den Schriftfont.
- ▶ Geben Sie den Text ein und klicken Sie auf **OK**.
 - ✓ Der Text wird auf der Grafik angezeigt.

Kalibrierkurve drucken

Die Kalibrierkurve und die Kalibrierdaten werden nach Klick auf  gedruckt.

Sehen Sie dazu auch

-  Allgemeine Einstellungen für die Kalibration und Blindwertkorrektur [▶ 142]
-  Statistische Auswertungen spezifizieren (Fenster Methode | Statistik) [▶ 45]
-  Analysenergebnisse drucken [▶ 121]

7.2 Kalibrierergebnisse anzeigen

Die Kalibrierergebnisse werden auf der rechten Seite des Fensters **Kalibrierung** auf 3 Karten angezeigt.

Sehen Sie dazu auch

-  Allgemeine Einstellungen für die Kalibration und Blindwertkorrektur [▶ 142]

7.2.1 Kalibrierung – Karte Tabelle

Im Fenster **Kalibrierung** werden auf der Karte **Tabelle** die Wertepaare der Standards (berechnete Konzentration / Messwert) ausgegeben.

Wurden die Standards mehrfach gemessen und eine statistische Auswertung in der Methode definiert, können durch Aktivieren der entsprechenden Kontrollfelder die Standardabweichung (SD) und die relative Standardabweichung (RSD%) bzw. die Spannweite (R) und die relative Spannweite (R%) ausgegeben werden.

Um einzelne Kalibrierstandards aus der Berechnung auszuschließen, markieren Sie den Standard mit Mausklick in der Tabelle und klicken dann auf **Std. löschen**.

Der Messwert wird dabei nicht endgültig gelöscht und kann jederzeit reaktiviert werden. Unter der Messwerttabelle erfolgt die Anzeige der Kalibrierdaten, soweit sie sinnvoll berechenbar sind:

Parameter	Bedeutung
R²(adj.)	Bestimmtheitsmaß
Anstieg	Anstieg der Kalibrierfunktion
Verf.-SD	Verfahrensstandardabweichung
BEC	Der BEC-Wert (background equivalent concentration) ist die Konzentration des Analyten, die eine dem Untergrund äquivalente Intensität erzeugt. Ein kleinerer Wert entspricht damit einer höheren Empfindlichkeit.

7.2.2 Kalibrierung – Karte Residuen

Im Fenster **Kalibrierung** werden auf der Grafik auf der Karte **Residuen** die Abweichungen der Kalibrierpunkte von der berechneten Kalibrierkurve sowie die Grenzen des Prognosebandes dargestellt.

7.2.3 Kalibrierung – Karte NWG/ BG

Im Fenster **Kalibrierung** werden auf der Karte **NWG/ BG** die Nachweis- und Bestimmungsgrenzen des ICP-OES Gerätes ausgegeben. Diese werden auf Basis der aktuellen Kalibrierergebnisse berechnet. Werte für das Leerwertverfahren und Kalibrierkurvenverfahren werden in diesem Bereich nur angezeigt, wenn das Gerät bereits kalibriert worden ist.

Parameter	Bedeutung
Nachweisgrenze	Die Masse (Konzentration) des zu analysierenden Elements, die mit einer vorgegebenen statistischen Sicherheit noch nachgewiesen werden kann.
Bestimmungsgrenze	Die kleinste Masse (Konzentration) des zu analysierenden Elements, die noch mit einer vorgegebenen statistischen Sicherheit bestimmt werden kann.
SD Leerw.-NWG	Nur bei Leerwert-Verfahren Gemessene Standardabweichung des Leerwerts (IDL-Probe)

Mit **Berechnen** starten Sie die Berechnung der Nachweis- und Bestimmungsgrenzen.

Kalibrierkurven-Verfahren

Für die Berechnung von Nachweis- und Bestimmungsgrenze nach dem Kalibrierkurvenverfahren ist eine lineare Kalibrierkurve erforderlich. Die Kalibrierung sollte im unteren Konzentrationsbereich erfolgen. Für das Rechenergebnis wesentliche Parameter der Kalibrierung sind:

- Anzahl und Lage der Kalibrierpunkte
- Anzahl der Wiederholungsmessungen pro Standard
- Qualität der Ausgleichung
- Anstieg der Kalibrierkurve
- Relative statistische Sicherheit (Wahrscheinlichkeits-Niveau)

Die Werte aus dem Kalibrierkurvenverfahren können nur dann als sinnvoll betrachtet werden, wenn im unteren Konzentrationsbereich kalibriert worden ist.

Leerwert-Verfahren

Die Standardabweichung des Leerwerts wird innerhalb der Messung bestimmt. Dazu wird in der Sequenz die Messung des Leerwerts (**Leerw.-NWG**) eingeordnet.

Für das Leerwert-Verfahren wird folgenden Berechnungsvorschrift verwendet:

- Der Leerwert wird 11 x gemessen.
- Aus diesen Werten wird die absolute Standardabweichung **SD** des Leerwerts bestimmt.
- Für Nachweis- und Bestimmungsgrenze gelten folgende Formeln:

Nachweisgrenze (**NWG**)

$$\text{NWG} = 3 * \text{SD} / (\text{Anstieg der Kalibrierkurve})$$

Bestimmungsgrenze (**BG**)

$$\text{BG} = 9 * \text{SD} / (\text{Anstieg der Kalibrierkurve})$$

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Messungen und Aktionen in einer Sequenz spezifizieren [► 58]

7.2.4 Kalibrierung – Karte NWG/ BG

Im Fenster **Kalibrierung** werden auf der Karte **NWG/ BG** die Nachweis- und Bestimmungsgrenzen des ICP-OES Gerätes ausgegeben. Diese werden auf Basis der aktuellen Kalibrierergebnisse berechnet. Werte für das Leerwertverfahren und Kalibrierkurvenverfahren werden in diesem Bereich nur angezeigt, wenn das Gerät bereits kalibriert worden ist.

Parameter	Bedeutung
Nachweisgrenze	Die Masse (Konzentration) des zu analysierenden Elements, die mit einer vorgegebenen statistischen Sicherheit noch nachgewiesen werden kann.
Bestimmungsgrenze	Die kleinste Masse (Konzentration) des zu analysierenden Elements, die noch mit einer vorgegebenen statistischen Sicherheit bestimmt werden kann.
SD Leerw.-NWG	Nur bei Leerwert-Verfahren Gemessene Standardabweichung des Leerwerts (IDL-Probe)

Mit **Berechnen** starten Sie die Berechnung der Nachweis- und Bestimmungsgrenzen.

Kalibrierkurven-Verfahren

Für die Berechnung von Nachweis- und Bestimmungsgrenze nach dem Kalibrierkurvenverfahren ist eine lineare Kalibrierkurve erforderlich. Die Kalibrierung sollte im unteren Konzentrationsbereich erfolgen. Für das Rechenergebnis wesentliche Parameter der Kalibrierung sind:

- Anzahl und Lage der Kalibrierpunkte
- Anzahl der Wiederholungsmessungen pro Standard
- Qualität der Ausgleichung
- Anstieg der Kalibrierkurve
- Relative statistische Sicherheit (Wahrscheinlichkeits-Niveau)

Die Werte aus dem Kalibrierkurvenverfahren können nur dann als sinnvoll betrachtet werden, wenn im unteren Konzentrationsbereich kalibriert worden ist.

Leerwert-Verfahren

Die Standardabweichung des Leerwerts wird innerhalb der Messung bestimmt. Dazu wird in der Sequenz die Messung des Leerwerts (**Leerw.-NWG**) eingeordnet.

Für das Leerwert-Verfahren wird folgenden Berechnungsvorschrift verwendet:

- Der Leerwert wird 11 x gemessen.
- Aus diesen Werten wird die absolute Standardabweichung **SD** des Leerwerts bestimmt.
- Für Nachweis- und Bestimmungsgrenze gelten folgende Formeln:

Nachweisgrenze (**NWG**)

$$\text{NWG} = 3 * \text{SD} / (\text{Anstieg der Kalibrierkurve})$$

Bestimmungsgrenze (**BG**)

$$\text{BG} = 9 * \text{SD} / (\text{Anstieg der Kalibrierkurve})$$

Sehen Sie dazu auch

- Messungen und Aktionen in einer Sequenz spezifizieren [► 58]

7.3 Kalibrierkurve bearbeiten

Eine vorhandene Kalibrierkurve können Sie im Fenster **Kalibrierung** auf folgende Weise bearbeiten:

- Verwendete Kalibrierfunktion wechseln
- Standards aktivieren/deaktivieren
- Einen gemessenen Standard ersetzen

Die Kalibrierfunktion ändern Sie, indem Sie im Listenfeld **Kalibrierfunktion** ein neues Modell wählen.

Einen Standard schließen Sie aus der Berechnung aus, indem Sie auf der Karte **Tabelle** den Standard markieren und anschließend **Std. löschen** betätigen. Der Messwert wird dabei nicht endgültig gelöscht und kann jederzeit reaktiviert werden.

Die geänderten Kalibrierparameter werden auf die Ergebnisse angewendet, wenn Sie die Ergebnisse Neuberechnen. Wählen Sie dafür den Menüpunkt **Routine | Analysenergebnisse Neuberechnen** oder klicken Sie in der Werkzeugleiste auf  klicken.

Ein Standard kann ebenfalls nachgemessen und die Ergebnisse Neuberechnet werden.

Sehen Sie dazu auch

-  Analysenergebnisse Neuberechnen [► 72]

8 Qualitätskontrolle

Die Qualitätskontrolle dient der Überwachung der Messergebnisse einer Methode über einen längeren Zeitraum. Zu diesem Zweck werden in einer Methode spezielle QC-Proben unterschiedlichen Typs definiert, die in einer Sequenz mitgeführt werden.

Die Auswertung wird auf Qualitätskontrollkarten (QC-Karten) ausgegeben und mit der Methode gespeichert. Mit jedem Aufruf der Methode stehen die QC-Karten zur Verfügung und werden beim nächsten Messstart aktualisiert.

Den Typ der QC-Proben und deren Parameter vereinbaren Sie im Fenster **Methode | QCS** und in der Sequenz das Mitführen der QC-Probe.

Die QC-Karten der geladenen (aktiven) Methode können Sie im Fenster **QC** ansehen. Dort werden auch die Parameter für Inhalt und Aussehen der QC-Karten festgelegt.

- Öffnen Sie das Fenster **QC** mit einem Klick auf  in der Symbolleiste oder wählen Sie den Menüpunkt **Methodenentwicklung | QC**.

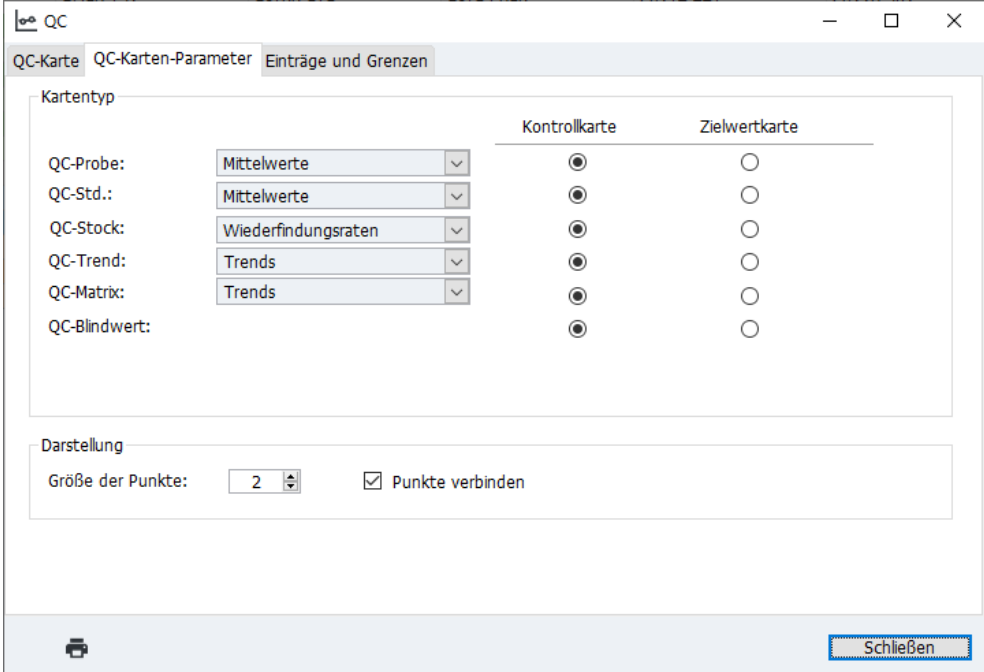
Sehen Sie dazu auch

- Qualitätskontrolle spezifizieren (Fenster Methode | QCS) [► 47]
- Messungen und Aktionen in einer Sequenz spezifizieren [► 58]

8.1 Parameter der QC-Karten

Der Typ und die Darstellung der QC-Karten wird im Fenster **QC | QC-Karten-Parameter** festgelegt.

Fenster QC | QC-Karten-Parameter



Kartentyp		Kontrollkarte	Zielwertkarte
QC-Probe:	Mittelwerte	☒	☐
QC-Std.:	Mittelwerte	☒	☐
QC-Stock:	Wiederfindungsraten	☒	☐
QC-Trend:	Trends	☒	☐
QC-Matrix:	Trends	☒	☐
QC-Blindwert:		☒	☐

Darstellung

Größe der Punkte: ☒ Punkte verbinden

 Schließen

QC-Probentypen und Auswertungen

Für die verschiedenen QC-Probentypen können Sie folgende Auswertungen wählen:

QC-Probentyp	Art der QC-Auswertung
QC-Probe	Mittelwerte
QC-Std.	Mittelw. (normiert) – nicht für die Zielwertkarte Wiederfindungsraten
QC-Stock	Wiederfindungsraten
QC-Trend	Trends
QC-Matrix	Spannweiten – nicht für die Zielwertkarte Präzisionen – nicht für die Zielwertkarte
QC-Blindwert	Keine Auswahl vorgesehen. Es wird die Intensität der Blindwerte angezeigt.

Für den Kartentyp **Kontrollkarte** (Prozessregelkarte) werden die Zielparameter und die Kontrollgrenzen (K) und Warngrenzen (W) aus dem Mittelwert und der Streuung der Werte der Vorperiode ermittelt. Für den Typ **Zielwertkarte** werden die Zielgrößen und Ausschlussgrenzen aus dem spezifizierten Erwartungswerten und Grenzen der Qualitätskontrollproben ermittelt.

Darstellung

Für die grafische Darstellung können Sie die Größe der Punkte sowie eine Verbindung der Punkte mittels Polygonzug vereinbaren.

Option	Beschreibung
Größe der Punkte	Die einzelnen Punkte werden als Kreise dargestellt. Mit höherem Wert wird der Kreis vergrößert.
Punkte verbinden	Grafikpunkte mit einem Polygonzug verbinden.

8.2 Einträge und Grenzen der QC-Karten

Der Inhalt der QC-Karten wird im Fenster **QC | Einträge und Grenzen** definiert und kann an die Erfordernisse des Labors bezüglich der Häufigkeit der Einträge angepasst werden.

QC

QC-Karte QC-Karten-Parameter **Einträge und Grenzen**

Eintragungsschema: Alle Werte

Kontroll- und Warngrenzen für Prozessregelkarte _____

Anzahl Werte Vorperiode: 30

Gültige Werte in Vorperiode: 30 (0 Eintrag elim.)

Ausschlussgrenzen für Zielwertkarten _____

Faktor: 1.00

Ausschlussgrenzen werden aus den unter Methode/QCS eingetragenen QC-Abweichungen und dem Faktor berechnet.

Angezeigte Karte erneuern

Vorperiode übernehmen, Rest löschen Ausführen

Schließen

Option	Beschreibung
Eintragsschema	Alle Werte Jede ausgeführte QC-Kontrolle eintragen. 1 Wert pro Tag Nur die letzte QC-Kontrolle des Tages eintragen. 2 Werte pro Tag Nur die erste und letzte QC-Kontrolle des Tages eintragen. Hinweis Ein "Tag" entspricht einem Tag laut PC-Uhr, d. h. während eines Tags wird ein vorangegangener Eintrag in der QC-Karte von einem neuen QC-Wert überschrieben, mit Beginn eines neuen Tags hingegen ein neuer Eintrag erzeugt.
Anzahl Werte Vorperiode	Für Kontrollkarte: Die Vorperiode ist eine Anzahl von QC-Karten-Einträgen, die zur Berechnung der Kontroll- (K) und Warngrenzen (W) herangezogen werden. Die Vorperiode enthält immer die älteren Karten-Einträge. Bei Wert 0 (keine Vorperiode) werden alle eingetragenen QC-Daten zur Berechnung der Kontroll- und Fehlergrenzen herangezogen.
Ausschlussgrenzen für Zielwertkarten	Nur Zielwertkarte: Die Ausschlussgrenzen werden aus den für die Qualitätskontrollproben spezifizierten Grenzen multipliziert mit dem Faktor (Voreinstellung ist 1) berechnet.

Karten erneuern

Treffen Sie eine Festlegung, wie mit (fast) vollen Karten weiter verfahren wird. Wählen Sie dazu eine der Optionen aus der Liste aus:

Option	Beschreibung
Vorperiode übernehmen, Rest löschen	Für Kontrollkarte: Die Vorperiode wird übernommen und bildet die Vorperiode der neuen Karte.
Letzte Werte -> Neue Vorperiode	Für Kontrollkarte: Die zuletzt gemessenen Werte der alten Karte bilden die Vorperiode der neuen Karte, alle anderen Werte werden aus der Karte gelöscht. Neue Messwerte werden mit der neugebildeten Vorperiode ausgewertet.
Alles löschen, neue Vorperiode	Alle Werte werden gelöscht. Für Kontrollkarte: Neue Messwerte füllen zuerst die Vorperiode.

Mit einem Klick auf **Ausführen** erneuern Sie die QC-Karten entsprechend oben gewählter Option.

8.3 QC-Karten anzeigen

Die QC-Karten werden im Fenster **QC | QC-Karte** angezeigt. Für jeden in der Methode vereinbarten QC-Probentyp und jede dort berücksichtigte Elementlinie existiert eine separate Karte.

Optionen/Anzeigen

Optionen/Anzeigen	Beschreibung
Kontrollprobe	QC-Probentyp für die Anzeige auswählen.
Linie	Elementlinie für die Anzeige auswählen.
Angezeigte Werte	Anzahl der angezeigten Werte und Datum des ersten und letzten angezeigten Wertes

Optionen/Anzeigen	Beschreibung
Gespeicherte Werte	Gesamtanzahl der Einträge auf der aktuellen QC-Karte und Datum des ersten und letzten Wertes
x(min) / x(max)	Starteintrag und Anzahl der Einträge einstellen, welche in der Grafik dargestellt werden sollen.
y-Skalierung	Einträge Maximum der y-Achse wird nach dem höchsten Eintrag skaliert. Kontrollgrenzen Maximum der y-Achse wird nach der Kontrollgrenze bzw. Ausschlussgrenze skaliert.
	QC-Grafik einschließlich der alphanumerischen Daten und Messwerte drucken.

Grafikbereich

Farbe/Markierung	Bedeutung
Gelber Bereich	Nur Kontrollkarte: Vorperiode
Hellgraue waagerechte Linie	Nur Kontrollkarte: Mittelwert, berechnet aus der Vorperiode Nur Zielwertkarte: Zielwert
Rote waagerechte Linien	Nur Kontrollkarte: Obere und untere Kontrollgrenze (K), berechnet aus der Vorperiode (3 Sigma) Nur Zielwertkarte: Obere und untere Ausschlussgrenze (AO, AU) entsprechend den Grenzen der Qualitätskontrollprobe
Grüne waagerechte Linien	Nur Kontrollkarte: Berechnete Warngrenzen (W; 2 Sigma)
kleine Kreise	Messpunkte (Schwarz: aktiver Messpunkt; Grau: inaktiver Messpunkt)

Wenn Sie einen Messwert in der Grafik anklicken, öffnet sich ein Fenster mit folgenden Angaben zu diesem Messwert.

Option	Beschreibung
Nummer	Nummer des Messwertes in der QC-Reihe
Wert	Messwert (umgerechnet entsprechend der Darstellungsform der QC-Karte)
Datum / Uhrzeit	Messzeitpunkt
Anwender	zur Zeit der Messung angemeldeter Benutzer
Version	Version der verwendeten Methode
Eintrag löschen / Eintrag aktivieren	Messwert als gelöscht markieren bzw. wieder aktivieren
Kommentar eingeben	Bemerkung zum Messpunkt eingeben, z. B. Grund der Löschung

9 Gerät und Zubehör steuern und kontrollieren

9.1 Spektrometer

Das Fenster **Spektrometer** dient zur Überprüfung der Spektrometerfunktionen und Einstellung der Spektrometerparameter.

Folgende Daten können eingestellt bzw. abgefragt werden:

- Gerätedaten
- Anzeige der Ausleseparameter des Detektors
- Messungen für die Geräteoptimierung starten

Das Fenster **Spektrometer** öffnen Sie mit Klick auf  oder mit dem Menüpunkt **Methodenentwicklung | Spektrometer**.

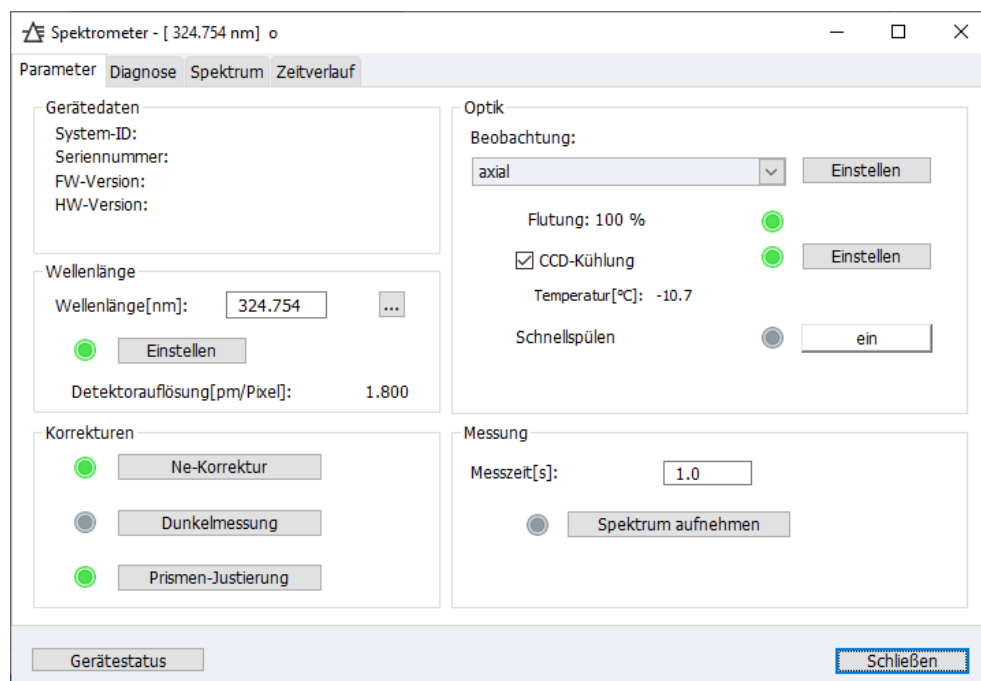
Mit Klick auf **Gerätestatus** wird eine Grafik des Gerätes angezeigt, auf der Meldungen der Sicherheitssensoren ausgegeben werden. Treten Probleme mit dem Plasma auf, können Sie hier Fehlermeldungen der Sensoren einsehen.

9.1.1 Spektrometerparameter einstellen und Funktionen testen

Das Fenster **Spektrometer | Parameter** beinhaltet folgende Funktionen:

- Grundlegende Gerätefunktionen kontrollieren
- Automatische Korrekturen am optischen System starten
- Eine Testmessung an einer ausgewählten Wellenlänge starten

Elemente des Fensters Spektrometer | Parameter



Parameter	Beschreibung
Gerätedaten	In der Gruppe Gerätedaten werden verschiedene Service- und Versionsnummern angezeigt, die für den Geräteservice benötigt werden.
Wellenlänge	Im Feld Wellenlänge wird die ausgewählte Wellenlänge angezeigt. Eine Wellenlänge kann nach einem Klick auf  im Fenster Element/Linie auswählen eingestellt werden.

Parameter	Beschreibung
	Mit Klick auf Einstellen wird das Spektrometer auf die gewählte Wellenlänge gefahren.
Ne-Korrektur	Wellenlängenkalibrierung des Detektors ausführen
Dunkelmessung	Dunkelsignal korrigieren
Prismen-Justierung	Abbildung der Dispersionsordnung auf den Detektor durch Prismenjustierung optimieren (Justierung auf Energiemaximum).
Beobachtung	Beobachtungsrichtung des Plasmas im Listenfeld wählen (axial – von oben, radial – von der Seite)
CCD-Kühlung	Wenn das Kontrollkästchen aktiviert ist, kann mit Einstellen die Kühlung des CCD-Detektors gestartet werden. Bei Deaktivierung des Kontrollkästchens wird die Kühlung gestoppt. Die CCD-Kühlung wird automatisch mit dem Zünden des Plasmas gestartet. Eine manuelle Steuerung ist nur in Ausnahmefällen, z. B. nach einer Fehlermeldung beim automatischen Starten, notwendig. Im Feld Betriebstemperatur wird die aktuelle Temperatur des CCD-Detektors angezeigt.
Schnellspülen	Spektrometer mit erhöhtem Argonfluss spülen
Messung	Für den Start einer Messung an der ausgewählten Wellenlänge ist unter Messung die Gesamtmesszeit einzugeben. Mit Klick auf Spektrum aufnehmen wird die Messung gestartet. Für die Messung werden die Voreinstellungen für das Plasma verwendet. Die Probe muss manuell zugeführt werden. Der Probengeber wird nicht verwendet.

Spektrumpk an einer ausgewählten Analysenlinie messen

Eine Testmessung an einer ausgewählten Analysenlinie starten Sie im Fenster **Spektrometer | Parameter**.

- ▶ Zünden Sie das Plasma.
- ▶ Öffnen Sie im Bereich **Wellenlänge** mit **...** das Fenster **Element/Linie auswählen** und stellen Sie die gewünschte Linie ein.
Alternativ geben Sie direkt in das Eingabefeld **Wellenlänge** den Wert ein.
- ▶ Fahren Sie mit **Einstellen** das Spektrometer auf die gewünschte Wellenlänge. Wenn die Einstellung erfolgreich beendet ist, erscheint die Markierung neben der Einstellung grün.
- ▶ Starten Sie die Dunkelstrommessung mit **Dunkelmessung**.
- ▶ Wählen Sie für die anschließende Messung die Beobachtungsrichtung **axial** oder **radial**.
- ▶ Stellen Sie die **Messzeit** ein.
- ▶ Stellen Sie die Probe bereit und tauchen Sie den Ansaugschlauch in die Probe.
- ▶ Warten Sie die Zeitdauer ab, bis die Probe stabil zerstäubt wird. Starten Sie die Messung mit **Spektrum aufnehmen**.
 - ✓ Die Messung erfolgt und die Messergebnisse werden im Fenster **Spektren bearbeiten** angezeigt.

Sehen Sie dazu auch

📖 Analysenlinien in die Linientabelle einfügen [▶ 28]

📖 Intensitätsspektren anzeigen und bearbeiten [▶ 83]

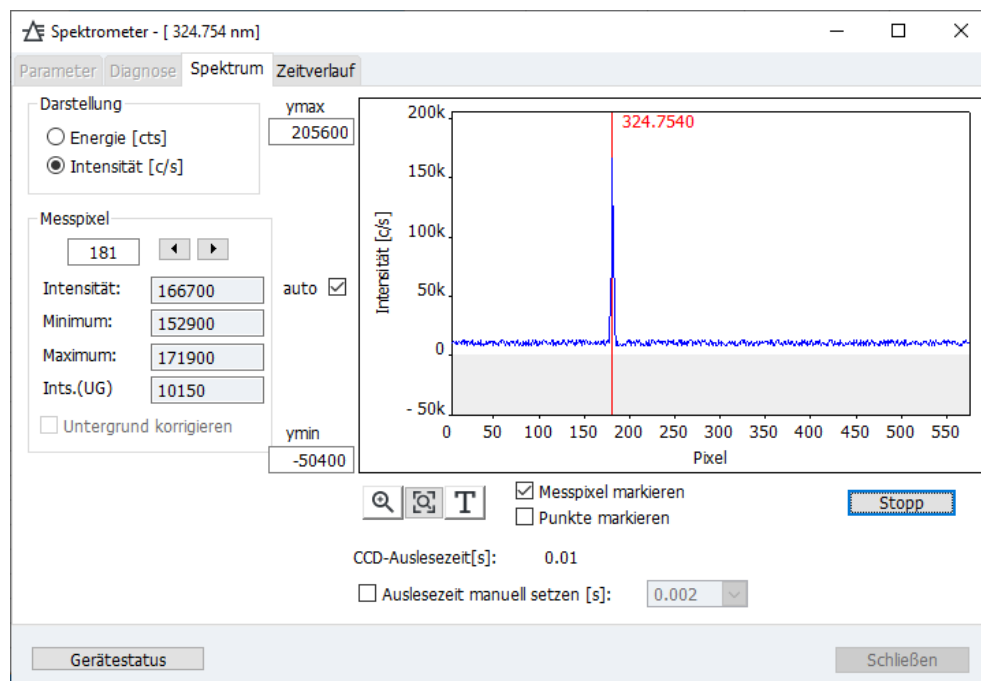
9.1.2 Diagnose von Geräteparametern

Im Fenster **Spektrometer | Diagnose** werden Service relevante Parameter angezeigt.

9.1.3 Kontinuierliche Peakmessung ausführen

Im Fenster **Spektrometer | Spektrum** starten Sie eine kontinuierliche Messung an einer vorgegebenen Wellenlänge. Die kontinuierlichen Messungen werden im Service-Fall für die Geräteoptimierung verwendet.

Grafische Darstellung und digitale Auswertung



Option	Beschreibung
Darstellung	Optionen für die Darstellung des Spektrums: Energie Anzeige des Energiespektrums, Maßeinheit: cts (Counts) Um möglichst rauscharme Messergebnisse zu erhalten, werden die Integrationszeiten für den Detektor so gewählt, dass das Energiemaximum bei ca. 30000 cts liegt. Intensität Darstellung der Energie pro Zeiteinheit, Maßeinheit: cts/s (Counts pro Sekunde) Anhand der Intensität können verschiedene Peaks unabhängig von der Integrationszeit verglichen werden.
Messpixel	Auswahl des Pixels, dessen Werte fortlaufend im Feld Energie bzw. Intensität angezeigt wird In den Feldern Maximum und Minimum werden die entsprechenden Ergebnisse der kontinuierlichen Messung angezeigt.
Messpixel markieren	Den eingestellten Messpixel in der Grafik durch eine senkrechte rote Linie markieren
Punkte markieren	Messwerte für jeden Pixel in der Grafik durch einen Punkt markieren

Option	Beschreibung
Auslesezeit manuell setzen	Auslesezeit für den CCD-Detektor aus dem Listefeld auswählen Längere Auslesezeiten führen zu höheren Energiewerten. Die Voreinstellung für die Auslesezeit des CCD-Detektors beträgt 0,01 s.
Grafik skalieren	Werte für Start- und Endpunkt der Ordinate in den Eingabefeldern an den Achsen direkt eingeben. Alternativ nach Aktivieren des Zoom-Modus  den anzuzeigenden Bereich mit gedrückter linker Maustaste auswählen. Skalierung mit Aktivieren der Option auto oder einem Klick auf  rückgängig machen.

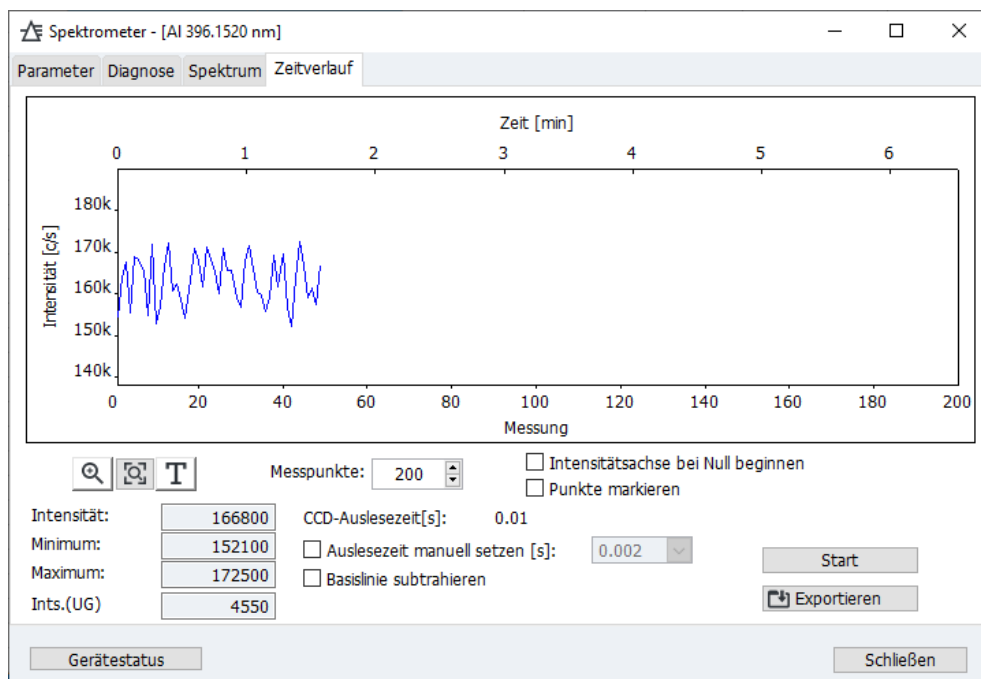
Peakmessung starten

- ▶ Stellen Sie im Fenster **Spektrometer | Parameter** die Wellenlänge und die Beobachtungsrichtung ein.
- ▶ Wechseln Sie auf die Karte **Spektrum**.
- ▶ Starten Sie die kontinuierliche Messung mit Klick auf **Start**.

Die Messwerte werden mit den eingestellten Parametern aufgenommen und kontinuierlich bis zum Betätigen von **Stopp** wiederholt.

9.1.4 Signalverlauf aufzeichnen

Im Fenster **Spektrometer | Zeitverlauf** zeichnen Sie den Signalverlauf der Intensität für die aktuell im Spektrometer eingestellte Wellenlänge über eine ausgewählte Anzahl Messpunkte auf.



Neben der grafischen Darstellung werden die digitalen Werte der aktuellen Intensität, das erreichte Intensitätsmaximum und -minimum der Intensität sowie die Intensität des Untergrundes ausgegeben.

Folgende Parameter können Sie für die Aufzeichnung des Signalverlaufs einstellen:

Option	Beschreibung
Skalierung	Nach Aktivieren des Zoom-Modus  den anzuzeigenden Bereich mit gedrückter linker Maustaste auswählen Skalierung mit einem Klick auf  rückgängig machen
Intensitätsachse bei Null beginnen	Die Skalierung der y-Achse nicht automatisch einstellen, sondern bei "0" beginnen lassen
Messpunkte	Anzahl Messpunkte aus der Liste wählen
Punkte markieren	Messpunkte in der Grafik mit einem Punkt markieren
Auslesezeit manuell setzen	Auslesezeit des CCD-Detektors aus dem Listenfeld wählen
Basislinie subtrahieren	Untergrundkorrigierte Intensitätswerte anzeigen

9.2 Plasma

Das Fenster **Plasma** beinhaltet folgende Funktionen:

- Plasma zünden/löschen
 - Kontrolle des HF-Generators
 - Einstellung der Gasflüsse
 - Kontrolle der Pumpe des Analysators
 - Justierung der Transferoptik
 - Automatische Optimierung von Zerstäubergasfluss und Plasmaleistung
- Öffnen Sie das Fenster **Plasma** mit einem Klick auf  in der Symbolleiste oder wählen Sie den Menüpunkt **Methodenentwicklung | Plasma**.

Mit **Gerätestatus** wird eine Grafik des Gerätes angezeigt, auf der Meldungen der Sicherheitssensoren des ICP-OES Gerätes ausgegeben werden. Treten Probleme mit dem Plasma auf, können Sie hier Fehlermeldungen der Sensoren einsehen.

9.2.1 Plasma zünden und Plasmabedingungen einstellen

Im Fenster **Plasma | Kontrolle** zünden und löschen Sie das Plasma und stellen die Gasflüsse im Gerät ein.

Funktionen im Fenster Plasma | Kontrolle

Option	Beschreibung
Plasmabedingun- gen	Plasmabedingungen (Plasmaleistung und Gasflüsse) auswählen.
Plasma zünden/ Plasma löschen	Plasma zünden und löschen, wenn das ICP-OES Gerät vorbereitet ist.
HF-Generator	Effektive Plasmaleistung einstellen. Die Plasmaleistung definiert die Plasmatemperatur. Über die Firmware des Gerätes wird der Strom des Generators so geregelt, dass die effektive Plasmaleistung erreicht wird.
Gasflüsse	Gasflüsse einschalten und einstellen. Plasmagas Das Plasmagas strömt am äußeren Rohr entlang und dient zur Erzeugung des Plasmas. Zerstäubergas Das Zerstäubergas zerstäubt die Probe und transportiert das Proben-aerosol in das Plasma. Es ist am Zerstäuber angeschlossen. Der Prozentwert in der Zeile des Zerstäubergases gibt Auskunft, wie durchlässig/sauber der Zerstäuber ist (siehe unten) Hilfgas Das Hilfgas drückt das Plasma vom Injektor weg und strömt zwischen innerem Rohr und Injektor. Konusgas Das Konusgas entfernt den "kalten" Plasmaschweif, um Interferenzen aufgrund von Rekombination im Plasma in der axialen Beobach-tungsrichtung zu beseitigen. Gleichzeitig unterstützt das Konusgas die Kühlung des Konus. Sauerstoff Sauerstoff kann als Zusatzgas bei ausgewählten Applikationen dem Zerstäubergas zugesetzt werden. Der Sauerstofffluss muss mit dem Kontrollkästchen vor der Gaseinstellung aktiviert werden, bevor er ge-ändert werden kann.
Gase abschalten	Alle Gasventile schließen.

Option	Beschreibung
Sprühkammer spülen	Das Zerstäubergas wird 1 Minute eingeschaltet, um Luft aus der Sprühkammer auszutreiben. Dadurch wird das Zünden des Plasmas nach einer Betriebsunterbrechung erleichtert. Währenddessen wird ein Countdown angezeigt.
Absaugleistung	Ein Sicherheitskreis überprüft, ob die Leistung des angeschlossenen Abzugs für den Betrieb des ICP-OES Gerätes ausreichend ist. Ist dies der Fall, so leuchtet die Anzeigelampe grün.

Mit den Schaltflächen **Einstellen** stellen Sie die geänderten Parameter (Plasmaleistung und Gasflüsse) am ICP-OES Gerät ein.

Zerstäuberfunktion beurteilen

Der Zerstäuber muss gereinigt werden, wenn er sich durch Probenpartikel in der Probe oder durch hohe Salzlasten in der Probe zugesetzt hat. Ein Indiz dafür, dass sich der Zerstäuber zusetzt, ist ein erhöhter Druck des Zerstäubergases.

Vergleichen Sie den aktuellen Prozentwert (Druck) des Parameters **Zerstäubergas** mit dem Wert der nach Einbau des neuen oder gereinigten Zerstäubers erreicht wurde.

Reinigen Sie den Zerstäuber wie in der Betriebsanleitung des ICP-OES Gerätes beschrieben, wenn der Prozentwert stark angestiegen ist (um mehr als die Hälfte des Ausgangswertes), spätestens jedoch bei einem Wert von 75 %.

Plasmabedingungen auswählen

Die Liste **Plasmabedingungen** enthält gespeicherte Plasmaparameter für unterschiedliche Probenmatrices und, wenn eine Methode geladen ist, die linienspezifischen Parameter der Methode.

Mit einem Klick auf  wird ein Kontextmenü mit Funktionen zur Verwaltung der in der Liste ausgewählten Parameter geöffnet:

Funktion	Beschreibung
Aktuelle Plasmaparameter speichern	Eingestellte Plasmabedingungen (Plasmaleistung und Gasflüsse) speichern und der Liste hinzufügen
Eintrag löschen	Ausgewählten Eintrag löschen Die Voreinstellungen Standard , Kerosin und Hydridtechnik können nicht gelöscht werden.
Plasmabedingungen einstellen	Plasmaparameter des ausgewählten Eintrags am ICP-OES Gerät einstellen
Nach Methodenlinie kopieren	Verfügbar, wenn in der Liste eine Methodenlinie ausgewählt ist Überträgt die Plasmabedingungen in die Methodenparameter der ausgewählten Linie.
Nach allen Methodenlinien kopieren	Verfügbar, wenn in der Liste eine Methodenlinie ausgewählt ist Überträgt die Plasmabedingungen in die Methodenparameter aller Linien.
Als Methodenvorgabewerte speichern	Die aktuellen Plasmabedingungen als Vorgabewerte für neu in die Methode eingefügte Linien speichern (gilt nicht für Linienfavoriten)

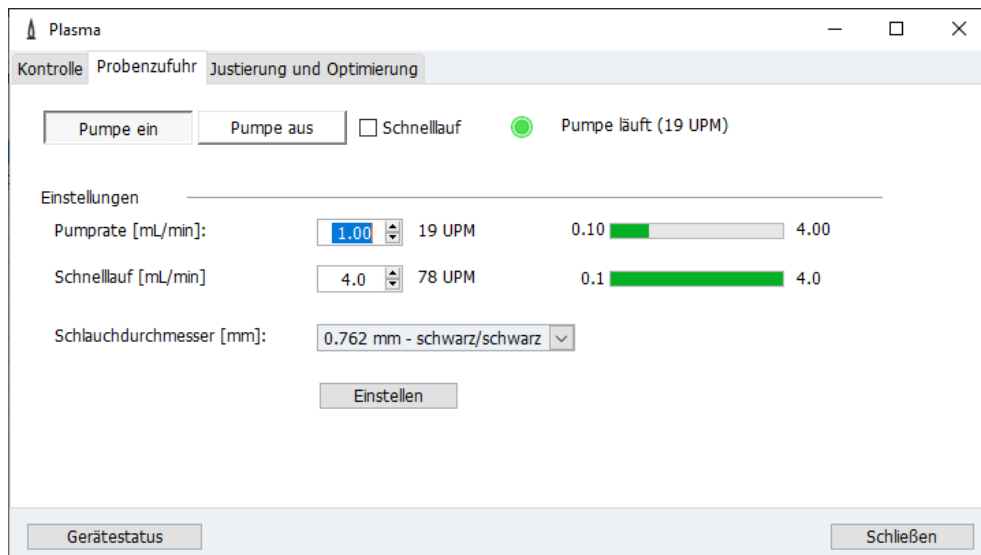
Sehen Sie dazu auch

 Spektrometer einschalten und Plasma zünden [► 66]

9.2.2 Probenzufuhr der Pumpe kontrollieren

Im Fenster **Plasma | Probenzufuhr** kontrollieren Sie die Funktion der Schlauchpumpe am ICP-OES Gerät.

Funktionen im Fenster
Plasma | Probenzufuhr



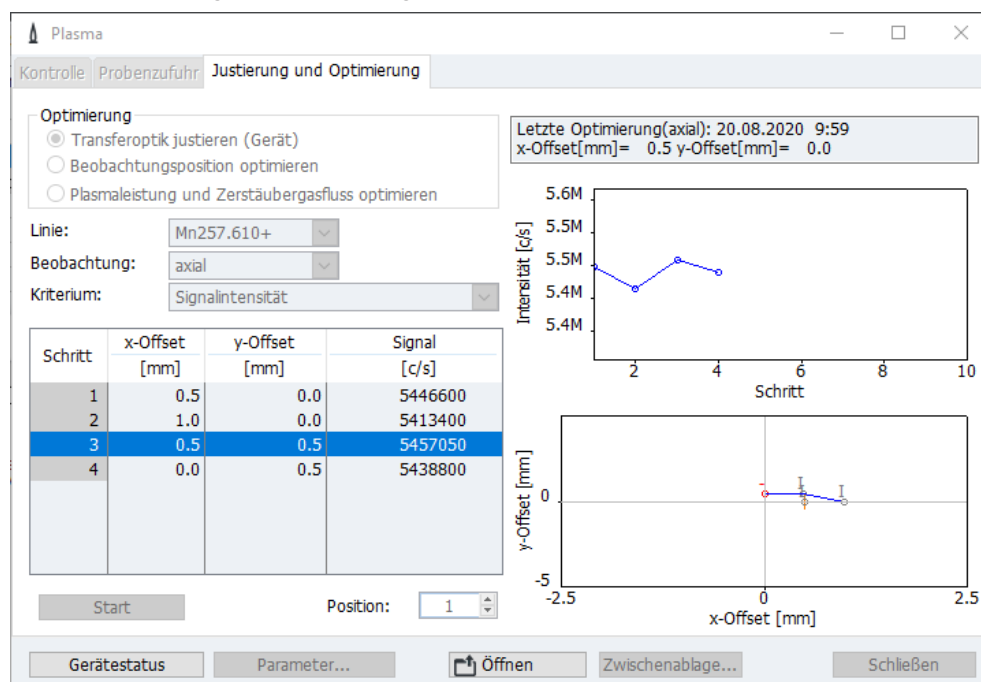
Funktion / Parameter	Beschreibung
Pumpe ein/ Pumpe aus	Pumpe ein- und ausschalten. Im Grundzustand nach Einschalten des ICP-OES Gerätes ist die Pumpe eingeschaltet.
Schnelllauf	Pumpe manuell in den Schnelllauf schalten Die Funktion kann genutzt werden, um das Probenzufuhrsystem manuell zu spülen. Nach erfolgreichem Spülen muss das Kontrollkästchen deaktiviert werden, um die Pumpe wieder auf den Probentransport umzuschalten.
Pumpe läuft/Pumpe ist aus	Status der Pumpe Aktuelle Pumpengeschwindigkeit wird mit der Einheit UPM (Umdrehung pro Minute) angezeigt.
Pumprate	Pumprate für den Probentransport während der Messung einstellen
Schnelllauf	Pumprate für den Schnelllauf einstellen Mit dem Schnelllauf wird die Transportzeit bei einem Wechsel der Probe bzw. die Transportzeit der Spüllösung zum Zerstäuber optimiert.
Schlauchdurchmesser	Verwendeten Schlauchtyp auswählen Aus der Information von Pumpengeschwindigkeit und Schlauchdurchmesser wird die transportierte Probenmenge (Pumprate) berechnet. Die Schläuche sind mit den farbigen Stoppern kodiert. Wählen Sie aus der Liste die Stopperkombination des verwendeten Schlauchs.
Einstellen	Einstellungen übernehmen

9.2.3 Justierung und Optimierung des Plasmas

Im Fenster **Plasma | Justierung und Optimierung** nehmen Sie folgende Justierungen vor:

- Ausrichtung der Transferoptik auf die optischen Achsen des Spektrometers
- Ermittlung der Offset-Werte der Transferoptik für eine Analysenlinie aus der Methode

■ Plasmaleistung und Zerstäubergasfluss optimieren



Für Justierung und Optimierung stehen zwei verschiedene Verfahren zur Verfügung, die mit Klick auf **Parameter** gewählt werden können:

Verfahren	Beschreibung
Gittersuche	Der Bereich wird nach einem Raster gescannt. Aus der Anzahl der Messpunkte wird derjenige mit der höchsten Intensität ermittelt. Die Justierung ist genau, dauert aber durch die Ermittlung einer hohen Anzahl Messpunkte lange.
Simplex-Optimierung	Das Energiemaximum wird iterativ ermittelt. Von einem Startmesspunkt wird der Messpunkt mit dem höchsten Wert im Umkreis ermittelt. Ausgehend von diesem Messpunkt wird wieder der Messpunkt mit der höchsten Energie ermittelt. Der Vorgang wird fortgeführt, bis das Energiemaximum gefunden ist. Dieses Verfahren ist schneller als die Gittersuche, aber etwas unsicherer. In den verschiedenen heißen Zonen des Plasmas können mehrere Energiemaxima auftreten und so bei ungünstigem Startpunkt das falsche Energiemaximum gefunden werden. Für das Simplexverfahren muss ein Abbruchkriterium als Prozentwert festgelegt werden. Wenn 3 aufeinanderfolgende Werte sich nicht um mehr als diesen Prozentwert voneinander unterscheiden, wird die Justierung beendet. Wenn Mit optimierten Einstellungen starten aktiv ist, werden die optimierten Parameter der letzten Justierung/Optimierung als Startwerte für die aktuelle Optimierung verwendet.

Für die Justierung der Transferoptik (Gerät) wird als Kriterium die Signalintensität verwendet.

Das Kriterium für die Optimierung wird in Abhängigkeit der Wellenlänge der Analysenlinie automatisch eingestellt, es kann jedoch manuell geändert werden:

Kriterium	Wellenlängenbereich der Analysenlinien
Signalintensität	< 200 nm
Signal/Untergrund	200 bis 350 nm

Kriterium	Wellenlängenbereich der Analysenlinien
Signal/Wurzel des Untergrundes	> 350 nm

Transferoptik auf optische Achsen (Plasmamittelpunkte) justieren

Die Justierung der Transferoptik auf die optischen Achsen erfolgt mit einer Mn-Lösung. Stellen Sie für die Justierungen Mn-Lösungen mit folgender Konzentration bereit:

Beobachtungsrichtung	Mn-Lösung
axial	1 mg/L
radial	10 mg/L

- ▶ Aktivieren Sie die Option **Transferoptik justieren (Gerät)**.
 - ✓ Automatisch wird die Mn-Analysenlinie in der Liste **Linie** eingestellt.
- ▶ Wählen Sie unter **Parameter** das Justierverfahren (siehe oben).
- ▶ Wählen Sie die Beobachtungsrichtung:

Option	Beschreibung
axial	Beobachtung von oben
radial	Beobachtung von der Seite
geschwächt axial	Beobachtung der abgeschwächten Energie von oben
geschwächt radial	Beobachtung der abgeschwächten Energie von der Seite
geschlossen	Beobachtung bei geschlossenem Shutter (für Service-Zwecke)

- ▶ Tauchen Sie den Ansaugschlauch in die Probe. Bei Verwendung eines Probengebers stellen Sie die Position auf dem Proben-Rack ein.
- ▶ Klicken Sie auf **Start**.
 - ✓ Die Justierung der Transferoptik läuft automatisch ab. Am Ende der Justierung werden die neuen Daten angezeigt.
- ▶ Übernehmen Sie die neuen Justierwerte mit einem Klick auf **OK**.

Beobachtungsposition für eine Analysenlinie der aktivierten Methode optimieren

Das Plasma hat unterschiedlich heiße Zonen. Bei dieser Optimierung wird der Beobachtungspunkt im Plasma ermittelt, bei dem der Analyt die höchste Signalintensität aufweist. Die Werte werden als **Offset** in der Methode gespeichert.

- ▶ Wählen Sie in der Liste **Linie** die Analysenlinie aus der Methode.
- ▶ Aktivieren Sie die Option **Beobachtungsposition optimieren**.
 - Automatisch wird die Angabe zur Beobachtungsrichtung aus der Methode übernommen und das Kriterium für die Optimierung eingestellt (siehe oben).
- ▶ Wählen Sie nach Klick auf **Parameter** das Justierverfahren (siehe oben).
- ▶ Tauchen Sie den Ansaugschlauch in die Probe. Bei Verwendung eines Probengebers stellen Sie die Position auf dem Proben-Rack ein.
- ▶ Klicken Sie auf **Start**.
 - ✓ Die Optimierung der Beobachtungsposition läuft automatisch ab. Am Ende werden die optimierten Offset-Werte angezeigt.
- ▶ Übernehmen Sie die neuen Offset-Werte mit einem Klick auf **OK** in die Methode.

Plasmabedingungen für eine Probe optimieren

Nachdem Sie die Beobachtungsposition der Analyten in einer Probe bestimmt haben, können Sie die Plasmabedingungen (Plasmaleistung und Zerstäubergasfluss) optimieren.

- ▶ Aktivieren Sie die Option **Plasmaleistung und Zerstäubergasfluss optimieren**.

- ▶ Wählen Sie in der Liste **Linie** die Analysenlinie aus der Methode.
 - ✓ Automatisch werden die bisherigen Plasmabedingungen aus der Methode übernommen und das Kriterium für die Optimierung eingestellt (siehe oben).
- ▶ Wählen Sie unter **Einstellen** das Justierverfahren (siehe oben).
- ▶ Tauchen Sie den Ansaugschlauch in die Probe. Bei Verwendung eines Probengebers stellen Sie die Position auf dem Proben-Rack ein.
- ▶ Klicken Sie auf **Start**.
 - ✓ Die Optimierung der Plasmaleistung und des Zerstäubergasflusses läuft automatisch ab. Am Ende werden die optimierten Werte angezeigt.
- ▶ Übernehmen Sie die neuen Werte mit einem Klick auf **OK** in die Methode.

9.3 Probengeber

Der Probengeber ist ein optionales Zubehör. Der Probengeber wird bei der Initialisierung im Fenster **Quickstart** nach Start des Programms ASpect PQ erkannt.

Das Fenster **Probengeber** beinhaltet folgende Funktionen:

- Angeschlossenen Probengeber-Typ anzeigen
- Probengeber konfigurieren
- Probengeber justieren
- Probenwege zusätzlich spülen
- Probengeber erneut initialisieren
- Selbsttest durchführen

Die für die Analyse unmittelbaren Parameter (Belegungen auf den Probenracks und Spülschritte) spezifizieren Sie in der Methode, der Sequenz und den Probenidentifikationsdaten (Proben-ID).

Das Fenster **Probengeber** öffnen Sie mit einem Klick auf  in der Symbolleiste oder mit dem Menüpunkt **Methodenentwicklung | Probengeber**.

Probengeber initialisieren

Der Probengeber wird grundsätzlich beim Einschalten des Netzschalters initialisiert. Eine erneute Initialisierung könnte notwendig sein, wenn der Probengeber seine Orientierung verloren hat, z. B. durch einen mechanischen Stoß. Dabei wird die Verbindung zwischen Probengeber, ICP-OES Gerät und PC wiederhergestellt.

- ▶ Mit einem Klick auf **Initialisieren** können Sie den Probengeber bei Bedarf ohne Neustart des Programms ASpect PQ erneut initialisieren.

Probengeber erkennen

Wenn der Probengeber erst nach Starten von ASpect PQ eingeschaltet wurde, muss die Verwendung des Probengebers im Programm angemeldet werden.

- ▶ Klicken Sie dazu auf **Erkennen** und anschließend auf **Initialisieren**.

Hinweis: Wenn der Cetac ASX-560 mit Verdünnungssystem verwendet wird, ist die Schaltfläche **Erkennen** ausgeblendet.

Probenwege spülen

- ▶ Stellen Sie im Fenster **Probengeber | Parameter** die **Spülzeit** ein. Die Voreinstellung für die Spülzeit wird aus der aktuellen Methode übernommen.
- ▶ Klicken Sie auf **Spülen**. Alternativ wählen Sie den Menüpunkt **Routine | Spülen**.
 - ✓ Die Probenwege (Schläuche-Zerstäuber-Sprühkammer-Torch) werden die angegebene Spülzeit unter Schnelllauf der Pumpe gespült.

9.3.1 Angeschlossenen Probengeber anzeigen

Im Fenster **Probengeber | Parameter** werden folgende Parameter angezeigt bzw. konfiguriert:

- Probengebertyp
- Spülparameter

Probengeber

Parameter Rack-Konfiguration Techn. Parameter Funktionstest Positionen

Probengeber

Typ: AS 3300 Version:

Spülen

Spülzeit [s]: 5

Spülen Initialisieren Erkennen OK Abbrechen

Probengebertyp

Im Fenster **Probengeber | Parameter** werden der bei der Initialisierung erkannte Probengebertyp und die Firmware-Version des Probengebers angezeigt.

Spülparameter

Die Systemspülzeit des Probenweges vom Probengefäß bis zur Torch wird aus der aktuellen Methode übernommen. Änderungen im Fenster **Probengeber | Parameter** haben umgekehrt keinen Einfluss auf die Einträge in der Methode. Während der Systemspülung unter Verwendung des Probengebers wird die Spüllösung dabei aus dem Spülgefäß des Probengebers entnommen.

Sehen Sie dazu auch

Probenzufuhr spezifizieren (Fenster Methode | Probenzufuhr) [► 34]

9.3.2 Probengeber-Rack konfigurieren

Im Fenster **Probengeber | Rack-Konfiguration** stellen Sie die auf dem Probengeber verwendeten Probenracks ein.

Probengeber

Parameter Rack-Konfiguration Techn. Parameter Funktionstest Positionen

Rack-Konfiguration:

Nr.	Rack	Positionen
	Sondergefäße	1...12
1	21 Pos	101...121
2	24 Pos	201...224
3	40 Pos	301...340

Spülen Initialisieren Erkennen OK Abbrechen

In Abhängigkeit vom verwendeten Probengeber können verschiedene Proben-Racks und Racks mit Sonderproben positioniert werden.

In der Tabelle wählen Sie die Proben-Racks. Für die variablen Proben-Racks sind dreistellige Nummern als Positionsnummern vorgesehen. Die erste Ziffer bezeichnet die Lage des Proben-Rack auf dem Probengeber, die beiden anderen die Position auf dem Proben-Rack. So kennzeichnet z. B. die Nummer 113 die Position 13 auf dem Proben-Rack 1. Das variable Proben-Rack 1 befindet sich auf dem Probengeber vor dem Spülgefäß, danach folgen die Proben-Racks 2 und 3.

9.3.3 Technische Parameter des Probengebers

Im Fenster **Probengeber | Techn. Parameter** spezifizieren Sie die Eintauchtiefe der Kanüle in die verschiedenen Gefäße.

Handlung	Typ	Ort	Tiefe mm
Aufnehmen	AS 3300	Probengefäß	150
Aufnehmen	AS 3300	Sondergefäß	150
Spülen	AS 3300	Spülgefäß	155

Tabelle
Geschwindigkeit: 6
Tiefe [mm]: 150
Tiefe bei Pos.: 101
ab auf

☒ Probengeber-Kanüle in Spülgefäß fahren (wenn Plasma an)

Spülen Initialisieren Erkennen OK Abbrechen

Für die einzelnen Gefäßtypen werden folgende Handlungen berücksichtigt:

Gefäß	Handlung
Probengefäße	Proben durch Schlauchpumpe ansaugen.
Sondergefäße	Sonderproben durch Schlauchpumpe ansaugen.
Spülgefäß	Kanüle und Ansaugweg spülen.

Elemente der Handlungstabelle

Option	Beschreibung
Handlung	Mögliche Handlungen: Aufnehmen Probe aus dem Gefäß zum Transport zur Torch aufnehmen. Spülen Spüllösung aufnehmen.
Typ	Angeschlossener Probengebertyp
Ort	Gefäß, auf das sich die Handlung bezieht
Tiefe	Eintauchtiefe der Kanüle in mm

Bereich Tabelle

Mit den Bedienelementen im Bereich **Tabelle** verändern Sie die Parameter der markierten Tabellenzeile.

Option	Beschreibung
Tiefe	Eintauchtiefe der Kanüle einstellen. Die Tauchtiefe wird von der höchsten Position des Probengeberarms aus gemessen.
Tiefe bei Pos.	Position des Sonder- oder Probengefäßes, an welchem die Eintauchtiefe überprüft wird.
Einstellen	Wenn aktiviert, bewegt sich der Probengeberarm über das Gefäß, zu dem die Positionierung zu ändern ist. Bei Proben- und Sondergefäßen ist das die unter Tiefe bei Pos. eingestellte Probenposition. Wenn nicht aktiviert, wird die Eintauchtiefe und Geschwindigkeit geändert, ohne dass sich der Probengeberarm über ein Gefäß bewegt.

Weitere Optionen

Wenn die Option **Probengeber-Kanüle in Spülgefäß fahren (wenn Plasma an)** aktiviert ist, wird die Kanüle nach Schließen des Fensters automatisch ins Spülgefäß getaucht.

Nur ASX-560: Einstellen der Geschwindigkeit der Spülpumpe (Stufen: 0...99). Mit **Einstellen** wird dieser Wert permanent im Probengeber gespeichert.

9.3.4 Probengeberfunktionen testen

Im Fenster **Probengeber | Funktionstest** können Sie prüfen, ob der Probengeber funktionsbereit ist.

Fenster Probengeber | Funktionstest

Folgende Funktionen des Probengebers werden geprüft:

Funktion	Beschreibung
Betriebszustand	Betriebsbereitschaft prüfen. Mit Aktualisieren wird die Betriebsbereitschaft erneut überprüft.
Positionen	Nach einem Klick auf Einstellen fährt der Probengeber eine ausgewählte Position an. Gefäß-Nr. Probengeber fährt die in der Liste ausgewählte Position an. Spülposition Probengeber fährt zum Spülgefäß.
Probengeberarm	Probengeberarm auf die im Listenfeld eingestellte Tiefe absenken.
Spülpumpe	Spülpumpe ein- und ausschalten.

Probengeber-Kanüle in Spülgefäß fahren

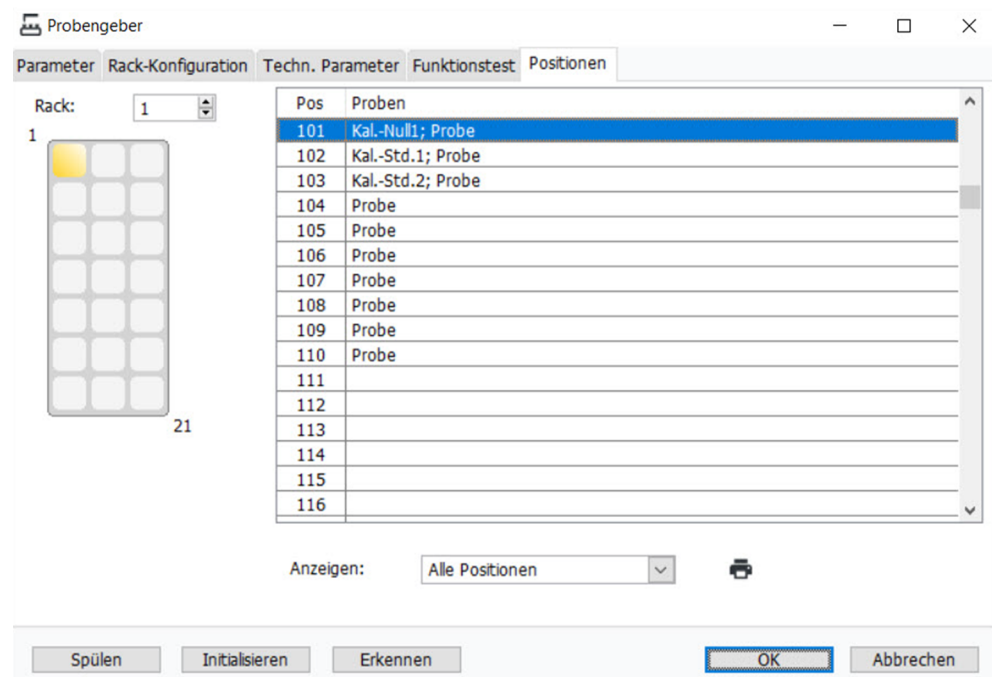
Wird das Kontrollkästchen **Probengeber-Kanüle in Spülgefäß fahren (wenn Plasma an)** aktiviert, so taucht die Kanüle nach Schließen des Fensters **Probengeber** in das Spülgefäß.

9.3.5 Probenpositionen auf dem Probengeber anzeigen

Im Fenster **Probengeber | Positionen** werden die in der aktuellen Sequenz verwendeten Probenteller-Positionen angezeigt.

Für die Anzeige kann zwischen den Optionen **Alle Positionen**, **Nur Probengefäße** und **Nur Sondergefäße** gewählt werden.

Neben der Tabelle ist eine schematische Darstellung des Proben-Racks mit der aktuell markierten Probenposition abgebildet. Die Probenposition kann sowohl im Schema als auch in der Tabelle markiert werden.



9.3.6 Verdünnungsfunktion

Die Parameter für die Probenverdünnung bei Verwendung des Probengebers Cetac ASX 560 mit dem Cetac SDX_{HPLD} werden im Fenster **Probengeber / Verdünnen** angezeigt.

Probengeber — □ ×

Parameter | Rack-Konfiguration | Techn. Parameter | Funktionstest | Positionen | **Verdünnen**

Verdünnungssystem: CETAC Technologies ASX-560 Standard V 1.11.0 16-Mar-2018, Cetac Thermo AA Compatible
Cetac SDX Controller ver 1.0.0
Cetac Technologies ASXpress+ V 2.71 ASX-5x0 Standard, 2-Feb-2019

Einstellungen: ASX-560/SDX ASXpress+

Parameter	Bereich	Wert
Max. Verdünnungsfaktor	2...5000	5000
Min. Verdünnungsfaktor	2...5000	2
Spülzyklen Mischgefäß	1...4	2
Vortexergeschwindigkeit	500...3000 rpm	2500
Volumen Luftsegment	50...200 µL	50
Aufnahme Verdünnungsmittel	50...3500 µL/s	1800
Aufnahme Probe	50...3500 µL/s	170
Abgabegeschwindigkeit	50...3500 µL/s	1800
Verzögerung Spritzenpumpe	500...5000 ms	1000

☐ Verdünnung bei der Berechnung des internen Standards berücksichtigen

Service: Spritzenpumpe und Vortexer vorbereiten ▼ Start

Spülen
Initialisieren
OK
Abbrechen

Einstellungen

Die Parameter im Bereich **Einstellungen** enthalten Voreinstellungen, die gute Ergebnisse für die Probenverdünnung liefern. Sie können die Parameter während einer Methodenoptimierung innerhalb der Einstellbereiche variieren.

Verdünnung bei der Berechnung des internen Standards berücksichtigen

Bei Aktivierung des Kontrollkästchens berücksichtigt die Software die Verdünnung bei der Berechnung des internen Standards.

- Wenn Sie den internen Standard der Originalprobe zusetzen, wird auch der interne Standard in der Probe verdünnt. Kontrollkästchen aktivieren, um die Verdünnung bei der Berechnung zu berücksichtigen.
- Wenn Sie den internen Standard auch dem Verdünnungsmittel zusetzen oder der Probenlösung über das Kit für internen Standard zuführen, wird der interne Standard nicht verdünnt. In diesem Fall Kontrollkästchen nicht aktivieren.
- Auch wenn Sie Argon als interner Standard verwenden, Kontrollkästchen nicht aktivieren.

Service

In der Liste **Service** können Sie Service-Funktionen am SDX_{HPLD} wählen und mit **Start** ausführen:

Option	Funktion
Spritzenpumpe und Vortexer vorbereiten	Verdünnungsflüssigkeit wird mit der Spritzenpumpe durch das System gepumpt und in den Vortexer abgegeben. Dadurch werden Luftblasen aus dem System entfernt und der Vortexer konditioniert.
Spritzenpumpe in Ausbauposition	Wenn die Spritzenpumpe im Rahmen einer Wartung ausgebaut werden muss, muss der Spritzenkolben mit dieser Funktion vorher in die richtige Position gebracht werden.

Option	Funktion
ASXpress+ initialisieren (nach Zerlegen und Reinigen)	Nur wenn der ASXpress+ installiert ist: Nach Installation oder Wartung den ASXpress+ initialisieren.

9.4 Umlaufkühler

Im Kühlkreislauf wird im ICP-OES Gerät ein Ventil geschaltet, das den Kreislauf öffnet und schließt. Der Wechsel des Kühlwassers wird deshalb mit einem Wizard unterstützt.



HINWEIS

Beachten Sie die Hinweise zur Wartung des Umlaufkühlers und zur Zubereitung des Kühlwassers in der Betriebsanleitung des ICP-OES Geräte.

- ▶ Wählen Sie den Menüpunkt **Extras | Wartung**.
- ▶ Starten Sie im Fenster **Wartung** den Kühlmittelwechsel mit Klick auf **Wechseln**.
- ▶ Folgen Sie den Anleitungen des Wizards.

10 Datenmanagement

In diesem Abschnitt finden Sie Informationen zu

- Druckoptionen
- Verwaltung von Methoden und Sequenzen
- Verwaltung von Ergebnisdaten
- Definieren von Einheiten für Konzentrationen und Gehalte
- Verwaltung von Daten zu häufig verwendeten Stocklösungen und QC-Proben

10.1 Druckfunktionen in ASpect PQ

ASpect PQ verfügt bei der Datenausgabe über eine große Anzahl Ausgabeformate. Neben der Ausgabe auf dem Drucker können die Daten in das Excel-, PDF-, HTML-, XML- oder Textformat exportiert oder als Bitmap oder skalierbare Grafiken gespeichert werden.

Für die Ausgabe von Analysenergebnissen und Fensterinhalten (z. B. der Fenster **Methode** oder **Sequenz**) werden Protokollvorlagen verwendet. Standardmäßig wird ein Satz Protokollvorlagen installiert. Bei Bedarf können diese Vorlagen mit dem Reportdesigner "Report-/Druckmodul List & Label" individuell angepasst werden.

10.1.1 Analysenergebnisse drucken

ASpect PQ bietet verschiedene Möglichkeiten, Ergebnisdaten auszudrucken:

- Das Gesamtprotokoll ausdrucken. Das Gesamtprotokoll einer Analyse enthält die Methodenparameter, die Kalibrierung und Analysenergebnisse mit Probeneinzelwerten (Statistikruns). Ein Protokoll kann von den aktuellen Ergebnissen des Hauptfensters und von gespeicherten Daten gedruckt werden.
- Aktuelle Ergebnisse ausdrucken. Bei diesem Ausdruck werden nur die Daten des Hauptfensters gedruckt. Hier kann zwischen einem vollständigen und einem kompakten Ausdruck gewählt werden.
- Ausgewählte Daten der Karte **Übersicht** ausdrucken. Für diesen Ausdruck können Sie die Analysenlinien und Ergebnisse in einem Dialogfenster wählen.

Gesamtprotokoll ausdrucken

Das Gesamtprotokoll einer Analyse enthält die Methodenparameter, die Kalibrierung und Analysenergebnisse mit Probeneinzelwerten (Statistikruns). Die Gesamtprotokolle können sowohl von den Ergebnissen im Hauptfenster als auch von gespeicherten Dateien gedruckt werden.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Protokolle** mit dem Symbol .
- ▶ Alternativ öffnen Sie das Fenster mit den Menüpunkten **Extras | Datenverwaltung** oder **Datei | Drucken | Protokoll**.

Angezeigt werden der Name der aktuellen Datei, Dateiinformationen (Liste **Beschreibung**), sowie alle Methodenversionen, die zur Erzeugung der aktuellen Ergebnisdatei herangezogen wurden.

Fenster Daten | Protokolle mit Auswahl der Ergebnisdaten für den Druck

- ▶ Wenn Sie eine gespeicherte Datei drucken wollen, rufen Sie mit das Standardfenster **Öffnen** auf und wählen Sie die gewünschte Datei aus.
- ▶ Wenn Sie den verkürzten Kompaktbericht drucken möchten, aktivieren Sie die Option **Kompaktes Protokoll verwenden**.
- ▶ Markieren Sie in der Tabelle alle Methodenversionen, die ausgedruckt werden sollen. Klicken Sie mit gedrückter Umschalt- oder Strg-Taste auf die Methodenversion, die Sie markieren möchten. Mit der Schaltfläche **alle** markieren Sie alle Versionen, mit **(keine)** entfernen Sie alle Markierungen.
- ▶ Öffnen Sie mit **Drucken** das Fenster **ASpect PQ Protokoll** mit der Auswahl der Ausgabeformate.

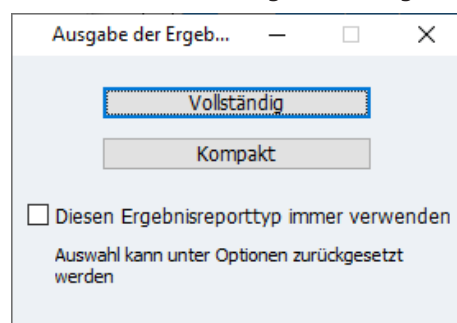
- ▶ Ändern Sie dort gegebenenfalls in der Liste **Ausgabe auf** das Ausgabeformat und stellen Sie mit **Optionen** spezielle Parameter des Ausgabeformats ein.
- ▶ Starten Sie den Ausdruck mit **Starten**.

i HINWEIS! Nutzen Sie für den Ausdruck die Einstellung **Ausgabe auf** | **Vorschau**. Mit einem Klick auf **Starten** werden die zu druckenden Seiten zunächst in der Druckvorschau angezeigt. So kann vor der Ausgabe auf dem Drucker geprüft werden, ob alle gewünschten Daten oder auch unnötige Daten ausgegeben werden.

Aktuelle Ergebnisse drucken

Die im Hauptfenster angezeigten Ergebnisse können gedruckt werden:

- ▶ Aktivieren Sie die Ergebniskarte im Hauptfenster, deren Inhalt Sie ausdrucken wollen.
- ▶ Starten Sie den Ausdruck mit dem Menüpunkt **Datei** | **Drucken** | **Aktives Fenster**.
✓ Das Fenster **Ausgabe der Ergebnisse** erscheint.



- ▶ Klicken Sie auf **Vollständig**, wenn Sie die Ergebnisse mit den Signalgrafiken ausdrucken wollen. Wählen Sie **Kompakt** für den Druck der Ergebnisse in einer kompakten Übersicht.
- ▶ Verfahren Sie weiter wie bei "Gesamtprotokoll ausdrucken" oben beschrieben.

i HINWEIS! Wenn Sie im Fenster **Ausgabe der Ergebnisse** das Kontrollkästchen **Diesen Ergebnisreporttyp immer verwenden** aktivieren und anschließend auf **Vollständig** oder **Kompakt** klicken, erscheint dieses Fenster beim nächsten Ergebnisdruck nicht mehr, es wird automatisch der letzte Ergebnisreporttyp verwendet. Diese Einstellung können Sie im Fenster **Optionen** | **Ansicht** wieder zurücksetzen.

Ausgewählte Daten drucken

- ▶ Wechseln Sie im Hauptfenster auf die Karte **Übersicht**.
- ▶ Klicken Sie auf  im unteren Bereich dieser Karte oder wählen Sie den Menüpunkt **Datei** | **Drucken** | **Aktives Fenster**. Das Fenster **Drucken Übersicht** erscheint.

Drucken Übersicht

Nr.	Linie	Parameter
1	Ar420.068	Konz.1
2	Y371.030	Konz.1(RSD%)
3	Au242.795	Konz.2
		Konz.2(RSD%)
		Ints.
		Ints.(RSD%)
		Ints.(SD)
		NWG
		BG
		WfR(Sollw.)
		R ² (adj.)/Rekal.Fakto
		100% norm.

OK
Abbrechen

Auswahl aufheben
Auswahl aufheben

Alles auswählen
Alles auswählen

- ▶ Markieren Sie alle gewünschten Linien und Parameter für den Ausdruck und bestätigen Sie die Auswahl mit **OK**.
Das Fenster **ASpect PQ Protokoll** erscheint.
- ▶ Verfahren Sie weiter wie bei "Gesamtprotokoll ausdrucken" oben beschrieben.

Sehen Sie dazu auch

Ansichtsoptionen [▶ 138]

10.1.2 Weitere Analysenparameter und Einstellungen drucken

Folgende Parameter und Einstellungen der Analyse können aus dem jeweiligen Fenster gedruckt werden:

- Methode
- Sequenz
- Ergebnisdaten auf der Karte **Übersicht** im Hauptfenster
- Proben-ID
- QC (Qualitätskontrollkarten)
- Kalibrierung
- Probengeberpositionen
- ▶ Aktivieren Sie das Fenster, dessen Inhalt Sie drucken möchten, auf der Arbeitsfläche von ASpect PQ.
- ▶ Starten Sie den Druck der Parameter mit einem Klick auf  im Fenster.
- ▶ Alternativ rufen Sie den Menübefehl **Datei | Drucken | Aktives Fenster** auf.
 - ✓ Das Fenster **ASpect PQ Protokoll** erscheint.
- ▶ Ändern Sie gegebenenfalls in der Liste **Ausgabe auf** das Ausgabeformat und stellen Sie mit **Optionen** spezielle Parameter des Ausgabeformats ein.
- ▶ Starten Sie den Ausdruck mit **Starten**.

10.1.3 Protokollvorlagen

Protokollentwurfsmodus nutzen

Die standardmäßig installierten Protokollvorlagen können individuell angepasst werden. Zur besseren Übersicht können Protokollansichten mit realen Werten editiert werden.

- ▶ Aktivieren Sie den Menüpunkt **Datei | Protokoll-Entwurfsmodus**.
- ▶ Öffnen Sie das Fenster, dessen Protokollvorlage Sie ändern wollen.
- ▶ Klicken Sie dort, falls vorhanden auf . Anderenfalls wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Drucken | Aktives Fenster**.
- ▶ Bestätigen Sie die Abfrage zur Bearbeitung der Reportvorlage mit **Ja**. Es erscheint der Reportdesigner.
- ▶ Nehmen Sie die gewünschten Änderungen vor und speichern Sie die geänderte Protokollvorlage.
- ▶ Verknüpfen Sie die Protokollvorlage mit dem entsprechenden Druckinhalten (siehe unten "Zuordnung ändern").

Kurze Einführung in den Reportdesigner

Die einzelnen Bestandteile der Reportvorlage heißen Objekte. Eine Tabelle kann bspw. aus je einem Objekt für die Kopfzeile, den Listenwerten und einer Grafik bestehen.

Diese Objekte wiederum enthalten die zu druckenden Informationen und tragen die zugehörigen Layouteigenschaften wie Schriftarten, Ausrichtungen, Umbrüche, Farben, etc.

Der Reportdesigner stellt verschiedene Typen von Objekten zur Verfügung, z. B. Textobjekte, Grafiken, Barcodes. Diese können im Arbeitsbereich frei platziert und in der Größe verändert werden. Je nach Art kann ein Objekt unterschiedliche Informationen darstellen oder Eigenschaften haben.

Die gewünschten Objekte werden in der Regel mit der Maus auf dem Arbeitsbereich aufgezogen und dann mit den entsprechenden Inhalten und Layout-Eigenschaften versehen. Alternativ können Sie auch eine Variable aus der Variablenliste per "Drag & Drop" auf den Arbeitsbereich ziehen. Befindet sich an der Zielstelle noch kein Objekt, wird automatisch ein solches erstellt und die Variable dem Objekt zugewiesen.

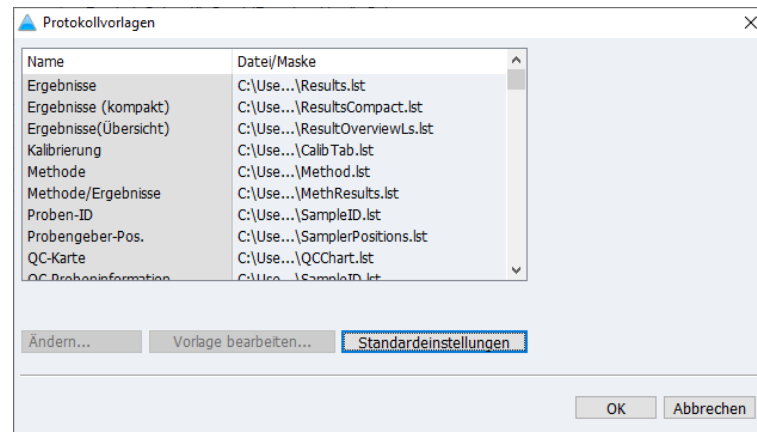
Um ein existierendes Objekt zu bearbeiten, muss es zuerst selektiert werden. Klicken Sie dazu mit der linken Maustaste in das Objekt. Ein selektiertes Objekt erkennen Sie an seinem hervorgehobenen Rahmen. Wenn Sie ein neues Objekt erzeugen, ist es automatisch selektiert und kann direkt in Größe und Position verändert werden. Über einen Doppelklick wird ein Dialogfenster gestartet, mit dem weitere Einstellungen geändert werden können.

Weitere Informationen zur Bedienung und zu den Funktionen des Reportdesigners finden Sie im Handbuch "designer_deu.pdf" / "designer_eng.pdf" auf der Installations-CD der Software.

Das Fenster Protokollvorlagen

Im Fenster **Protokollvorlagen** werden die Vorlagen editiert und den Fenstern von ASpect PQ zugeordnet. Einem Fenster können unter Verwendung einer Dateimaske mehrere Vorlagen zugeordnet werden, aus denen bei Druckstart die gewünschte Vorlage gewählt wird.

- ▶ Öffnen Sie mit dem Symbol  das Fenster **Daten | Protokolle**.
- ▶ Klicken Sie auf **Protokollvorlagen**.



Für folgende Fenster muss eine Protokollvorlage bereitstehen:

Name	Beschreibung
Ergebnisse	Inhalt der Karte Ergebnisse im Hauptfenster
Ergebnisse (kompakt)	Kompakte Übersicht der Ergebnisse
Ergebnisse (Datei-übersicht)	Inhalt der Karte Dateiübersicht im Hauptfenster
Kalibrierung	Kalibrierung der Analyse: Fenster Kalibrierung
Methode	Methodenparameter: Fenster Methode
Methode/Ergebnisse	Gesamtprotokoll
Probengeber-Pos.	Belegung des Probengebers: Fenster Probengeber Positionen
Proben-ID	Probeninformationsdaten: Fenster Proben-ID Probeninformation
QC-Karte	Daten der QC-Karten: Fenster QC
QC-Probeninformation	Informationsdaten der QC-Proben: Fenster Proben-ID QC-Probeninformation
Sequenz	Sequenzfolge: Fenster Sequenz

Zuordnung ändern

- ▶ Markieren Sie im Fenster **Protokollvorlagen** das Fenster, dessen Protokollvorlage geändert wird.
- ▶ Öffnen Sie mit **Ändern** das Dialogfenster zum Zuordnen der Dateien.
- ▶ Soll nur eine Protokollvorlage zugeordnet werden, aktivieren Sie die Option **Vorlagendatei verwenden (*.lst)** und wählen Sie dann nach Klick auf die gewünschte Datei aus.
- ▶ Sollen mehrere Vorlagen gleichzeitig bei Druckstart angeboten werden, aktivieren Sie die Option **Dateiauswahl zulassen (Maske, z.B. c:\Reports\Results*)**. Geben Sie den Masken-Namen unter Verwendung von Wildcards im Eingabefeld ein.
- ▶ Bestätigen Sie die Einstellungen mit **OK**.

Protokollvorlage editieren

- ▶ Markieren Sie im Fenster **Protokollvorlagen** das Fenster, dessen Protokollvorlage editiert wird.
- ▶ Öffnen Sie mit **Vorlage bearbeiten** das Fenster **Report Designer**.

Standardeinstellungen wiederherstellen

- Sie können die Einstellungen entsprechend der Programminstallation wiederherstellen.
- ▶ Klicken Sie auf **Standardeinstellungen**.

10.2 Datenverwaltung für alle Datentypen in ASpect PQ

Folgende Daten werden in ASpect PQ erzeugt:

- Methoden
- Sequenzen
- Ergebnisdaten
- Linien-/Wellenlängendatei
- Korrekturmodelle
- Korrekturspektren
- Protokollvorlagen
- Linienfavoriten
- Worksheets

Die oben aufgeführten Datentypen werden im Fenster **Daten | Datenverwaltung** organisiert. Das Fenster erscheint nach einem Klick auf  oder nach Wahl des Menübefehls **Extras | Datenverwaltung**.

10.2.1 Methoden und Sequenzen verwalten

Methoden, Sequenzen und Korrekturmodelle werden getrennt in einer Datenbank gespeichert. Die Methodendatenbank trägt den Namen "method.tps". Die Datenbank mit den Sequenzen ist mit "sequ.tps" bezeichnet. Methoden und Sequenzen werden im weiteren Text dieses Abschnitts als "Datensätze" bezeichnet.

Elemente im Datenbankfenster

Beim Speichern, Öffnen, Löschen und Im- oder Export von Methoden oder Sequenzen werden Datenbankfenster mit gleichen Elementen geöffnet.

Methode speichern

Name: Kat.:

Name	Vers.	Datum	Zeit	Kat.	Anwender	Status
Example Multiline Ev	1	08.06.2020	15:10	INS	User	Entwicklung
Mehrlinienauswertung	1	08.06.2020	13:39		User	Entwicklung
Method_Ground	1	05.06.2020	17:15	INS	User	Entwicklung
TW Standardkit	1	08.06.2020	12:34		User	Entwicklung
USP_232/233	1	30.08.2019	14:02		AJ	Entwicklung

Sortieren nach: ☒ Aufsteigend ☐ Absteigend

☒ Nur aktuelle Versionen anzeigen

☐ Als Routinemethode verwenden

☒ Kalibrierkurve(n) speichern

Beschreibung:

Option/Anzeige	Beschreibung
Name	Namen für die Methode/Sequenz eingeben bzw. ausgewählte Methode/Sequenz anzeigen
Kat.	Zusätzliches Merkmal für die Suche der Methode/Sequenz in der Datenbank Es können max. 3 Stellen als Kategoriebezeichnung eingegeben werden. Die Anzeige der Liste können Sie durch Eingabe der Kategoriebezeichnung im Feld Kat. einschränken. Wenn Sie die Datensätze von allen Kategorien anzeigen lassen, löschen Sie den Eintrag im Feld Kat..
Liste der Datensätze	Gespeicherte Methoden/Sequenzen mit Name, Version, Datum, Zeit, Kategorie und Anwender
Sortieren nach	Sortierung der Liste nach verschiedenen Merkmalen Das Sortieren kann je nach Auswahl der Option aufsteigend oder absteigend vorgenommen werden.
Beschreibung	Zusätzlichen Notizen, z. B. zur Verwendung der Datensätze eintragen bzw. anzeigen Vordefinierte Bemerkungen können Sie im Fenster Daten Vordefinierte Bemerkungen erstellen.
Nur aktuelle Versionen anzeigen	Wenn mehrere Versionen eines Datensatzes mit gleichen Namen angelegt sind, wird nur der Datensatz mit der höchsten Versionsnummer angezeigt.
Kalibrierkurve(n) speichern	Vorhandene Kalibrierkurven mit der Methode speichern Die Kalibrierkurven können für weitere Analysen verwendet werden.

In der Software werden Datensätze mit gleichen Namen nicht überschrieben, sondern es wird eine weitere Version angelegt und die Versionsnummer um 1 erhöht.

Aus den Datenbanken für Methoden/Sequenzen können Sie die Datensätze einzelner Methoden/Sequenzen importieren, exportieren oder löschen.

Hinweis

Halten Sie beim Markieren mit der Maus die Strg- oder Umschalttaste gedrückt, um mehrere Datensätzen im Datenbankfenster auszuwählen.

Datenverwaltung öffnen

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Datenverwaltung** mit Klick auf .
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** den zu bearbeitenden Datensatztyp: **Methode** oder **Sequenz**.

Datensätze exportieren

Mit einem Export können Sie Datensätze anderen Geräten/Computern zur Verfügung stellen. Es können mehrere Datensätze gleichzeitig in eine gemeinsame Datei exportiert werden. Exportdateien erhalten folgende Erweiterungen: Methodendatensätze ".met", Sequenzdatensätze ".seq".

- ▶ Öffnen Sie mit **Exportieren** das Datenbankfenster.
- ▶ Wählen Sie die Datensätze aus und klicken Sie auf **Exportieren**.
- ▶ Geben Sie im Standardfenster **Speichern unter** einen Dateinamen ein und bestätigen Sie diesen mit **Speichern**.
 - ✓ Es wird das Datenbankfenster mit den exportierten Dateien angezeigt.
- ▶ Verlassen Sie das Datenbankfenster mit Klick auf **Schließen**.

Datensätze importieren

Durch Importieren können Sie Datensätze von anderen Geräten/Computern in Ihre Datenbank laden. Eine Import-Datei kann mehrere Datensätze enthalten, aus denen Sie die zu ladenden Datensätze auswählen.

- ▶ Öffnen Sie mit **Importieren** das Fenster **Zu importierende Methoden-Datei auswählen** bzw. **Zu importierende Sequenz-Datei auswählen'**) mit den Standardfunktionen zum Öffnen von Dateien.
- ▶ Wählen Sie die zu importierende Datei.
 - ✓ Es öffnet sich das Datenbankfenster mit der Ausgabe von Namen, Erstellungsdatum und Kategorie der in der Datei enthaltenen Datensätze. In der Titelzeile des Fensters wird der Name der Importdatei angezeigt.
- ▶ Wählen Sie im Datenbankfenster die zu importierenden Datensätze aus und klicken Sie auf **Importieren**.
Die Datensätze werden in die Datenbank importiert. Wenn bereits ein Datensatz mit gleichem Namen vorhanden ist, wird eine neue Version des Datensatzes angelegt. Im Datenbankfenster erscheinen die aktuellen Versionen der vorhandenen Datensätze.
- ▶ Verlassen Sie das Datenbankfenster mit **Schließen** und kehren Sie in das Fenster **Daten** zurück.

Datensätze löschen

Mit der Löschfunktion löschen Sie dauerhaft komplette Datensätze aus der Datenbank.

- ▶ Öffnen Sie mit **Löschen** das Datenbankfenster.
- ▶ Wählen Sie die zu löschenden Datensätze aus.
- ▶ Klicken Sie auf **Löschen**.
 - ✓ Das Datenbankfenster wird aktualisiert und zeigt nur noch die übergebliebenen Datensätze an. Bei Datensätzen mit gleichen Namen wird die Versionsnummer um 1 verringert.

Datensätze über Menü Datei löschen

- ▶ Alternativ können Sie die Datenbankfenster **Methode löschen** bzw. **Sequenz löschen** mit dem Menübefehl **Datei | Löschen | Methode** bzw. **Datei | Löschen | Sequenz** öffnen.
- ▶ Verfahren Sie dann weiter wie oben beschrieben.

10.2.2 Ergebnisdateien verwalten

Ergebnisdaten werden während der Messung als Datenbank gespeichert. Eine Datenbank mit Ergebnisdaten kann kopiert oder gelöscht werden.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Datenverwaltung** mit dem Menüpunkt **Extras | Datenverwaltung** oder mit einem Klick auf .
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** die Option **Ergebnisse**.

Ergebnisdaten importieren

Sie können Ergebnisdaten in die Software importieren. Die Daten werden bei diesem Vorgang in den Ergebnisordner innerhalb der Dateistruktur der Software eingeordnet.

- ▶ Klicken Sie auf **Importieren**.
 - ✓ Das Fenster **Ergebnisdatei(en) auswählen** erscheint.
- ▶ Markieren Sie die TPS-Dateien und klicken Sie auf **Öffnen**.
- ▶ Wählen Sie einen Unterordner für den Ergebnisspeicher und klicken Sie auf **OK**.
 - ✓ Die TPS-Dateien und dazugehörige SPK-Dateien (falls vorhanden) werden in den gewählten Ergebnisordner kopiert.

Ergebnisdaten exportieren

Mit diesem Befehl exportieren Sie eine oder mehrere Datenbanken sowie die vorhandenen Spektrendateien in einen anderen Ordner.

- ▶ Klicken Sie auf **Exportieren**.
Das Fenster **Exportieren** mit der Übersicht über vorhandene Ergebnisdatenbanken erscheint.
- ▶ Markieren Sie die zu kopierenden Ergebnisdatenbanken mit Mausklick. Mehrere Datenbanken markieren Sie mit gedrückter Strg- oder Umschalttaste.
- ▶ Öffnen Sie mit Klick auf **Exportieren** das Fenster **Ordner suchen**.
- ▶ Wählen Sie den Zielordner aus und klicken Sie auf **OK**.
✓ Die TPS-Dateien und die SPK-Dateien werden in den Zielordner kopiert.

Ergebnisdaten löschen

Sie können Ergebnisdaten dauerhaft löschen.

- ▶ Klicken Sie auf **Löschen**.
- ▶ Wählen Sie im Fenster **Ergebnisdateien löschen** die zu löschende Ergebnisdatenbank mit Mausklick aus.
- ▶ Klicken Sie auf **Löschen** und bestätigen Sie die Abfrage zum Löschen mit **OK**.
✓ Die Daten werden dauerhaft gelöscht.

Ergebnisse einzelner Proben suchen

Sie können einzelne Proben mit bekannten Probenamen in den Datenbanken suchen.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Daten | Datenverwaltung** auf **Suchen nach Probe**.
Alternativ wählen Sie den Menüpunkt **Extras | Suchen nach Probe**.

Suchen nach Probe [3 Datei(en) gefunden]

Suchen nach:

Probe: Mn 10 mg/l

Suchen in (inkl. Unterordner): C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectPQ\ICP\RESULTS\

☒ Teilstringsuche

☐ Datum zwischen: 10.08.2020 und: 10.08.2020

Suchergebnisse:

Ergebnisdatei	Ordner	Technik	Methode	Datum
Au in electronic waste reproces	C:\Users\Public	ICP-OES	PGM in Na-fusion 3	28.02.2019
Au in electronic waste reproces	C:\Users\Public	ICP-OES	PGM in Na-fusion 3	28.02.2019
Au in electronic waste original r	C:\Users\Public	ICP-OES	PGM in Na-fusion 3	28.02.2019

Öffnen Start Schließen

- ▶ Geben Sie im Eingabefeld **Probe** den Probenamen ein.
- ▶ Suchen Sie nach Proben, bei denen die eingegebene Zeichenkette Bestandteil des Namens ist, aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Teilstringsuche**.
- ▶ Mit aktiviertem Kontrollkästchen **Datum zwischen** grenzen Sie den Zeitpunkt der Messung ein.
- ▶ Starten Sie die Suche mit **Start**.
✓ In der Tabelle werden alle Ergebnisse angezeigt, die Proben mit dem eingegebenen Probenamen enthalten.
- ▶ Um eine der angezeigten Ergebnisdatenbanken zu öffnen, markieren Sie diese Datenbank in der Liste und betätigen Sie **Öffnen**.
✓ Die Ergebnisse werden im Hauptfenster angezeigt.

10.2.3 Linien-/Wellenlängendateien exportieren

Die Linien-/Wellenlängendatei mit den Analysenlinien und den gespeicherten Peak-schwerpunkten ist gerätespezifisch. Sie ist auf dem Computer gespeichert, mit dem das ICP-OES Gerät gesteuert wird. Um die Linien-/Wellenlängendatei auf einem anderen Computer zu verwenden, gehen Sie folgendermaßen vor:

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Datenverwaltung** mit dem Menübefehl **Extras | Datenverwaltung** oder mit einem Klick auf das Symbol .
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** die Option **Linien-/Wellenlängendatei** und klicken Sie auf **Exportieren**.
- ▶ Wählen Sie einen Ordner zum Speichern der Datei und klicken Sie auf **OK**.
 - ✓ Die Datei mit dem Namen "lines.dat" ist im ausgewählten Ordner gespeichert.

10.2.4 Korrekturmodelle verwalten

Korrekturmodelle werden für die spektralen Korrekturen verwendet. Sie können von einem Gerät auf ein anderes Gerät übertragen werden. Korrekturmodell-Dateien haben die Erweiterung MOD.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Datenverwaltung** mit dem Menübefehl **Extras | Datenverwaltung** oder mit einem Klick auf das Symbol .
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** die Option **Korrekturmodelle**.

Korrekturmodelle importieren

Mit diesem Befehl importieren Sie Korrekturmodelle in ASpect PQ.

- ▶ Klicken Sie auf **Importieren**.
- ▶ Wählen Sie die zu importierende Korrekturmodell-Datei aus und klicken Sie auf **Öffnen**.
Das Datenbankfenster **Import Korrekturmodell** erscheint.
- ▶ Klicken Sie auf **Importieren**.
 - ✓ Das Korrekturmodell wird in die Datenbank übernommen.

Korrekturmodelle exportieren

Mit diesem Befehl exportieren Sie das Korrekturmodell für die Nutzung auf einem anderen Computer.

- ▶ Klicken Sie auf **Exportieren**.
- ▶ Markieren Sie im Datenbankfenster **Export Korrekturmodell** das gewünschte Modell. Mehrfachauswahl ist möglich.
- ▶ Klicken Sie auf **Exportieren**.
- ▶ Geben Sie im Fenster **Speichern unter** den Namen und Speicherpfad ein und klicken Sie auf **Speichern**.
 - ✓ Die Datei mit dem Korrekturmodell wird gespeichert.

Korrekturmodelle löschen

Mit diesem Befehl löschen Sie nicht benötigte Korrekturmodelle.

- ▶ Klicken Sie auf **Löschen**.
- ▶ Markieren Sie im Datenbankfenster **Korrekturmodelle** das gewünschte Modell.
- ▶ Klicken Sie auf **Löschen**.
 - ✓ Das Korrekturmodell wird aus der Datenbank gelöscht.



HINWEIS

Durch das Löschen von Korrekturmodellen können Methoden unbrauchbar werden

Beachten Sie, dass nicht geprüft wird, ob das Korrekturmodell in einer Methode verwendet wird.

Sehen Sie dazu auch

- Spektrale Störungen beseitigen – Fenster Spektren bearbeiten | Spektrale Korrekturen [► 89]

10.2.5 Korrekturspektren löschen

Nicht benötigte Korrekturspektren können Sie aus der Datenbank löschen.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Datenverwaltung** mit Klick auf das Symbol
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** die Option **Korrekturspektren** und klicken Sie auf **Löschen**.
- ▶ Wählen Sie im Datenbankfenster **Korrekturspektren** das zu löschende Spektrum und klicken Sie auf **Löschen**.
 - ✓ Es erfolgt eine Prüfung, ob das Spektrum in einem Korrekturmodell verwendet wird. Ist dies nicht der Fall, so wird das Korrekturspektrum gelöscht.

10.2.6 Protokollvorlagen importieren

Vorlagen für Druckprotokolle, die extern erstellt wurden, müssen Sie über die Datenverwaltung in ASpect PQ importieren:

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Datenverwaltung** mit Klick auf
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** die Option **Protokollvorlagen** und klicken Sie auf **Importieren**.
- ▶ Wählen Sie im Fenster **Öffnen** die Datei aus und klicken Sie auf **Öffnen**.
Protokolldateien tragen die Erweiterung ".lst".
 - ✓ Die Protokollvorlage wird in ASpect PQ importiert. Ordnen Sie nun die Protokollvorlage dem Druckinhalt zu.

Sehen Sie dazu auch

- Protokollvorlagen [► 125]

10.2.7 Linienfavoriten verwalten

Linienfavoriten können im Fenster **Methode** festgelegt werden. Sie enthalten die für eine bestimmte Applikation verwendete Analysenlinie und die linienabhängigen Methodenparameter. Linienfavoriten-Dateien haben die Erweiterung ".fav".

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Datenverwaltung** mit Klick auf
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** die Option **Favoriten**.

Linienfavoriten importieren

Mit diesem Befehl importieren Sie einen Favoritendatensatz in ASpect PQ.

- ▶ Klicken Sie auf **Importieren**.

- ▶ Klicken Sie im Datenbankfenster **Favoriten - Detailansicht** auf **Importieren**.
 - ▶ Wählen Sie die zu importierende Linienfavoriten-Datei aus und klicken Sie auf **Öffnen**.
 - ✓ Nach einer Abfrage wird der Favoritendatensatz Ihren Linienfavoriten hinzugefügt.
- Linienfavoriten exportieren
- ▶ Klicken Sie auf **Exportieren**.
 - ▶ Markieren Sie im Datenbankfenster **Favoriten - Detailansicht** den gewünschten Datensatz. Mehrfachauswahl ist möglich.
 - ▶ Klicken Sie auf **Exportieren**.
 - ▶ Geben Sie im Fenster **Zieldatei (neu oder bestehend)')** den Namen und Speicherpfad ein und klicken Sie auf **Speichern**.
Als Zieldatei kann auch schon eine existierende Datei verwendet werden. In diesem Fall wird der Datensatz dort integriert.
 - ✓ Die Datei mit dem Datensatz der Linienfavoriten wird gespeichert.
- Linienfavoriten löschen
- Mit diesem Befehl löschen Sie nicht benötigte Linienfavoriten.
- ▶ Klicken Sie auf **Löschen**.
 - ▶ Markieren Sie im Datenbankfenster **Favoriten - Detailansicht** den Datensatz.
 - ▶ Klicken Sie auf **Löschen**.
 - ✓ Der markierte Datensatz wird aus der Datenbank gelöscht.

Sehen Sie dazu auch

📖 Eigene Favoritenlinien definieren [▶ 31]

10.2.8 Worksheets importieren, exportieren und löschen

Sie können Worksheets im Fenster **Daten | Datenverwaltung** importieren, exportieren und löschen. Optional können Sie beim Export die hinterlegten Methoden und Sequenzen mitgeben. Worksheets haben die Erweiterung WST.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Datenverwaltung** mit dem Menübefehl **Extras | Datenverwaltung** oder mit einem Klick auf das Symbol .
 - ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** die Option **Worksheet**.
- Worksheet exportieren
- ▶ Klicken Sie auf **Exportieren**.
 - ▶ Markieren Sie im Fenster **Worksheet exportieren** das betreffende Worksheet. Zum Export der im Worksheet enthaltenen Methoden und Sequenzen aktivieren Sie die Option **inklusive Sequenz und Methode(n)**.
 - ▶ Klicken Sie auf **Exportieren** und geben Sie einen Ordner und einen Namen für die Exportdatei ein.
 - ▶ Bestätigen Sie die Eingaben mit **Speichern**.
 - ✓ Das Worksheet wird mit der Erweiterung WST exportiert.
- Worksheet importieren
- ▶ Klicken Sie auf **Importieren**.
 - ▶ Markieren Sie im Fenster **Worksheet importieren** das Worksheet und klicken auf **Importieren**. Um die im Worksheet enthaltenen Methoden und Sequenzen ebenfalls zu importieren, aktivieren Sie die Option **inklusive Sequenz und Methode(n)**.
 - ▶ Wählen Sie im Standardfenster das Worksheet aus und klicken Sie auf **Öffnen**.

✓ Das Worksheet wird importiert.

Worksheets löschen

- ▶ Auf **Löschen** klicken.
- ▶ Markieren Sie im Fenster **Löschen** das Worksheet und klicken Sie auf **Löschen**.

10.3 Ergebnisse im ASCII/CSV-Format speichern

Mess- und Analysenergebnisse können sowohl automatisch als auch manuell im ASCII/CSV-Format gespeichert werden. Für beide Export-Formen werden im Fenster **Optionen | ASCII/CSV-Export** die Parameter für das Dezimaltrennzeichen und das Spalten-trennzeichen eingestellt.

Automatisch fortlaufender Datenexport

Beim automatisch fortlaufenden Datenexport wird jeder Eintrag in die Ergebnistabelle sofort in die vereinbarte ASCII-Datei übertragen. Den Namen dieser ASCII-Datei legen Sie im Fenster **Optionen | Fortlaufender ASCII-Export** fest.

Manueller Datenexport

Beim manuellen Datenexport können Sie die zu exportierenden Probenzeilen in der Ergebnistabelle auswählen.

- ▶ Markieren Sie die Proben in der Ergebnisliste.
Halten Sie die Strg- oder Umschalttaste gedrückt und wählen Sie die Proben mit einem Klick auf die Probenzeile aus. Alle Probenzeilen markieren Sie mit dem Menübefehl **Bearbeiten | Alles markieren**.
- ▶ Öffnen Sie mit dem Menüpunkt **Bearbeiten | Auswahl speichern** das Standardfenster **Speichern unter**.
Alternativ können Sie auch mit der rechten Maustaste auf die markierten Zeilen klicken und im Kontextmenü einen entsprechenden Menüpunkt wählen.
- ▶ Geben Sie den Dateinamen ein und bestätigen Sie mit **OK**.
Die Daten werden in einem für Tabellenkalkulationsprogramme lesbaren Format mit der Erweiterung ".csv" gespeichert.

Sehen Sie dazu auch

📖 Exportoptionen [▶ 140]

📖 Optionen zum fortlaufenden ASCII-Export [▶ 140]

10.4 Einheiten spezifizieren

Im Fenster **Daten | Einheiten** werden programmweit verfügbare Einheiten verwaltet.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Einheiten** mit Klick auf das Symbol .

Es stehen jeweils 3 Vorzugsvarianten (bei Lösungen: mg/L, µg/L, ng/L, mg/kg(liq); bei festen Proben: mg/kg, µg/kg, ng/kg, m-%) zur Verfügung. Diese Einheiten können vom Anwender nicht geändert werden. Davon abweichende Einheiten können frei definiert werden. Bei freier Definition ist unter Faktor der Konvertierungsfaktor einzugeben:

Option	Beschreibung
Einheit	Bezeichnung der Einheit (max. 10 Zeichen)
Kommentar	Bemerkungen (max. 20 Zeichen)
Faktor	Faktor 1 entspricht 1 µg/L bzw. µg/kg, Faktor 1000 entspricht 1 ng/L bzw. ng/kg

Option	Beschreibung
Art	fest Einheit bezogen auf feste Probe flüssig Einheit bezogen auf flüssige Probe (Lösung) flüssig grav. Einheit bezogen auf flüssige Probe, die eingewogen wird, z. B. Öl

Mit den Schaltflächen können Sie eigene Einträge verwalten.

Schaltfläche	Beschreibung
Anhängen	Neue Zeile an das Ende der Liste anhängen
Einfügen	Neue Zeile oberhalb der aktuellen Zeilenmarkierung einfügen
Löschen	Nur anwenderdefinierte Einheiten, Vorzugseinheiten können nicht gelöscht werden
Speichern	Änderungen und Eingaben speichern

10.5 Datenbanken für Stocks und QC-Proben verwalten

Die Datenbanken mit den häufig verwendeten Stock-Standards und QC-Proben wird im Fenster **Daten | Stock-Std/QC-Proben** verwaltet. Sie können Einträge diesen Datenbanken hinzufügen, löschen oder editieren. Die Stockstandards und QC-Proben stehen in der Methodenentwicklung zur Verfügung.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Stock-Std/QC-Proben** mit Klick auf das Symbol .
- ▶ Wählen Sie die Option **Stock-Standard** oder **QC-Proben**.
- ▶ Geben Sie in der Tabelle die Parameter der Standards ein oder editieren Sie diese:

Tabellenspalte	Bedeutung
Name	Bezeichnung des Standards (max. 20 Zeichen) eingeben.
Einheit	Bezeichnung der Einheit (max. 10 Zeichen) des Standards wählen.
Elemente und Konzentrationen	Die Eingabe der Elementkonzentration erfolgt im Format "Element-symbol Konzentration" in der ausgewählten Einheit, z. B. Fe 0.5;Cu 10; Co 0.005. Alternativ öffnen Sie mit Konzentrationen das Eingabefeld Konzentrationseingabe , in dem Sie jedem Element die Konzentration zuordnen können.

Mit den Schaltflächen können Sie die Einträge verwalten:

Schaltfläche	Funktion
Anhängen	Neue Zeile an das Ende der Liste einfügen.
Einfügen	Zeile oberhalb einer markierten Zeile in der Liste einfügen.
Löschen	Markierte Zeile löschen.
Speichern	Listen der Stockstandards/QC-Proben speichern.
Konzentrationen	Eingabefeld für Element und Konzentration des markierten Standards öffnen.

10.6 Vordefinierte Bemerkungen erstellen

Für folgende Vorgänge können benutzerdefinierte Bemerkungen voreingestellt werden:

- Methode speichern
- Sequenz speichern
- Neuberechnung starten
- Messung starten

Die benutzerdefinierten Bemerkungen können jeweils über die Schaltfläche  neben dem Feld **Beschreibung** in den entsprechenden Fenstern eingefügt werden.

Bemerkung erstellen

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Vordefinierte Bemerkungen** mit Klick auf das Symbol .
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Kategorie auswählen** den Vorgang.
- ▶ Öffnen Sie mit einem Klick auf **Vorlage bearbeiten** die Liste der Bemerkungen.
- ▶ Erstellen Sie eine neue Bemerkung mit Klick auf **Neu**. Geben Sie unter **Bezeichnung** eine Bezeichnung ein, unter der die Bemerkung anwählbar ist. Im Feld **Text** tragen Sie die eigentliche Bemerkung ein.
- ▶ Eine Bemerkung kann über **Ändern** editiert oder über **Löschen** aus der Auswahlliste entfernt werden.

10.7 Windows-Zwischenablage verwenden

Ergebnisdaten in die Zwischenablage kopieren

Ergebnisse ausgewählter Proben können direkt in die Zwischenablage von Windows kopiert und damit anderen Windows-Anwendungen zugänglich gemacht werden.

Die Befehle dazu finden Sie im Menü **Bearbeiten**:

Menü Bearbeiten...	Beschreibung
Nur sichtbare Spalten kopieren	Die sichtbaren Probenergebnisse in der aktuellen Tabelle kopieren.
Alle Spalten kopieren	Die Probenergebnisse aus allen Tabellen kopieren.
Spaltentitel	Wenn aktiviert (mit Häkchen), wird die Titelzeile mit den Spaltenbezeichnungen mit kopiert.

- ▶ Markieren Sie die Proben in der gewünschten Tabelle der Ergebnisliste.
 - Halten Sie die Strg- oder Umschalttaste gedrückt und wählen Sie die Proben mit einem Klick auf die Probenzeile aus.
 - Alle Probenzeilen markieren Sie mit dem Menübefehl **Bearbeiten | Alle Spalten kopieren**.
- ▶ Aktivieren Sie gegebenenfalls den Menübefehl **Bearbeiten | Spaltentitel**, um die Titelzeile mit zu kopieren.
- ▶ Wählen Sie den entsprechenden Menübefehl, um die Ergebnisse in die Zwischenablage zu kopieren.

Grafiken als Screenshot kopieren

Grafikfenster und Grafiken von Kalibrierkurven, Intensitätssignalen oder Emissionssignalen können als Screenshot in die Zwischenablage kopiert werden.

- ▶ Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Grafik. Es erscheint ein Kontextmenü mit zwei Kopierbefehlen.
- ▶ Wählen Sie den Kopierbefehl, um das gewünschte Objekt zu kopieren: nur die Grafik oder das gesamte angezeigte Fenster kopieren.
 - ✓ Das gewählte Objekt wird in die Zwischenablage kopiert und steht anderen Windowsanwendungen zur Verfügung.

11 ASpect PQ anpassen

Im Fenster **Optionen** werden folgende Einstellungen vorgenommen, die für die gesamte Bedienung von ASpect PQ gültig sind:

- Ansichtsoptionen
- Speicherorte für Dateien
- Parameter für den Datenexport
- Allgemeingültige Einstellungen für den Analysenablauf, für die Kalibration und Blindwertkorrektur

Die vorgenommenen Einstellungen bleiben nach dem Verlassen und Wiederstarten von ASpect PQ erhalten. Die Schaltfläche **Standardeinstellungen** setzt alle Optionen auf eingestellte Werte zurück.

Das Fenster **Optionen** öffnen Sie mit dem Menüpunkt **Extras | Optionen**.

11.1 Ansichtsoptionen

Im Fenster **Optionen | Ansicht** legen Sie die auf der Arbeitsoberfläche sichtbaren Funktionen fest. Screenshot

Fenster Optionen | Ansicht

Option	Beschreibung
Werkzeugleiste anzeigen	Werkzeugleiste mit den Schaltflächen für die Messroutine anzeigen
Symbolleiste anzeigen	Symbolleiste mit den großen Schaltflächen für den Schnellzugriff anzeigen und Symbolleistenposition auswählen Die Position der Symbolleiste kann durch Ziehen mit der Maus ebenfalls geändert werden, wobei die Einstellung nicht bis zum nächsten Programmstart gespeichert wird.
Ereignisfenster nicht anzeigen	Die Ereignisfenster (z. B. Verzögerungszeit) nicht anzeigen Die Meldungen werden stattdessen in der Statusleiste des Hauptfensters eingeblendet.

Option	Beschreibung
Ergebnisanzeigen automatisch ausblenden	Ergebnisfenster werden ausgeblendet, wenn Unterfenster (z. B. Fenster Methode) geöffnet werden. Nach Schließen der Unterfenster werden die Ergebnisfenster wieder angezeigt.
Tooltips anzeigen	Über allen Symbolschaltflächen und für die Spaltentitel in den Fenstern Methode , Sequenz und Proben-ID kleine Hilfetexte (Tooltips) einblenden.
Farben	Die Schaltfläche  öffnet den Farbauswahl-Dialog. Es können vordefinierte oder neu definierte Farben für den Listen-Hintergrund festgelegt werden.
Bildschirm Ausdruck verwendet Druck-Taste (sonst F5)	Standardmäßig wird der Bildschirm Ausdruck mit F5 ausgelöst. Die Taste Drucken auf der Tastatur wird dabei für die Windows-Zwischenablage-Funktion verwendet. Ist dieses Kontrollkästchen aktiviert, dann löst die Taste Drucken den Bildschirm Ausdruck aus. Diese Option wird erst nach Neustart von ASpect PQ aktiv.
Bildschirmschoner zulassen	Wenn aktiviert, schaltet sich der Windows-Bildschirmschoner in Eingabepausen ein.
Protokolltyp (kompakt oder vollständig) abfragen	Beim Druck von Ergebnisfenstern über den Menüpunkt Datei Drucken Aktives Fenster kann zwischen einem vollständigem oder einem kompakten Protokoll gewählt werden. Ein Klick auf diese Schaltfläche setzt die Auswahl Diesen Ergebnisreporttyp immer verwenden wieder zurück, sodass der Protokolltyp erneut ausgewählt werden kann.

11.2 Speicherpfade

Bei der Installation werden Speicherpfade für Dateien festgelegt. Sie werden im Fenster **Optionen | Ordner** angezeigt und können zum Teil hier editiert werden.

Ordner	Beschreibung
Programm	Installationspfad der ausführbaren Programmdateien
Arbeitsverzeichnis	Verzeichnis für Anwenderdaten Das Arbeitsverzeichnis enthält weitere Unterordner. Es wird bei der Installation oder durch die optionale Benutzerverwaltung festgelegt.
Temporäre Daten	Verzeichnis für vom Programm temporär angelegte Daten
Probeninformation	Voreingestellter Pfad für das Öffnen und Speichern von Probeninformationsdateien Dieser Pfad kann geändert werden. Klicken Sie auf  , um den neuen Ordner auszuwählen. Beim Öffnen und Speichern der Probeninformationsdateien kann ein abweichender Pfad ausgewählt werden.
Export/Import	Voreingestellter Pfad für den Export und Import von Methoden- und Sequenzdaten und Export von Ergebnisdaten als CSV-Dateien Dieser Pfad kann geändert werden. Klicken Sie auf  , um den neuen Ordner auszuwählen. Auch beim Exportieren und Importieren kann ein abweichender Pfad ausgewählt werden.
Ergebnisse	Verzeichnis für Ergebnisdaten Dieses Standard-Verzeichnis kann weitere Unterordner für Ergebnisspeicherung enthalten. Diese Ordner stehen beim Messstart für die Dateiablage zur Verfügung.
Anwendungsdaten	Verzeichnis für Daten, in dem ASpect PQ notwendige Daten ablegt

11.3 Exportoptionen

Im Fenster **Optionen | ASCII/CSV-Export** werden die Parameter für den ASCII-Export von Ergebnisdaten festgelegt. Die Parameter gelten sowohl für den automatisch fortlaufenden als auch den manuellen Datenexport.

Einstellungen

Option	Beschreibung
Dezimaltrennzeichen	Gibt das Trennzeichen für Dezimalzahlen an
Listentrennzeichen	Gibt an, durch welches Zeichen die Elemente einer Liste voneinander getrennt werden

Für den Export der Ergebnislisten wählen Sie die Trennzeichen **Dezimaltrennzeichen** und **Listentrennzeichen**.

Im Bereich **Zu exportierende Ergebnis-Felder** wird festgelegt, welche Spalten der Ergebnistabelle in die ASCII-Datei exportiert werden. Die Option **alle** exportiert sämtliche Spalten der Ergebnisliste (mit allen Unterkarten). Die Option **nur ausgewählte Felder** öffnet eine Liste, in der die zu exportierenden Spalten ausgewählt werden können.

Sehen Sie dazu auch

 Ergebnisse im ASCII/CSV-Format speichern [► 134]

11.4 Optionen zum fortlaufenden ASCII-Export

Im Fenster **Optionen | Fortlaufender ASCII-Export** wird der automatische Export von Ergebnisdaten während des Analysenablaufs aktiviert. Die Exportdatei wird jeweils nach der Ausgabe einer neuen Zeile im Ablauf- und Ergebnisfenster aktualisiert. Die Daten werden an bereits bestehende Dateien angehängt.

Weitere Exportoptionen werden im Fenster **Optionen | ASCII/CSV-Export** festgelegt.

Export von Ergebnisdaten

Das Kontrollkästchen **Fortlaufender ASCII-Export von Ergebnisdaten** aktiviert die Exportfunktion. Danach ist eine Option für den Dateinamen zu wählen:

Option	Beschreibung
Methodenbezeichnung.csv	Der Dateiname entspricht der Bezeichnung der Methode. Die Dateierweiterung ist ".csv". Die Datei wird im Standardpfad Export/Import (Fenster Optionen Ordner) abgelegt.
Bezeichnung der Ergebnisdatei.csv	Der Dateiname entspricht der Bezeichnung der Ergebnisdatei. Die Dateierweiterung ist ".csv". Die Datei wird im Standardpfad Export/Import (Fenster Optionen Ordner) abgelegt.
anderer	Dateiname und Pfad können frei vergeben werden. Die Schaltfläche  öffnet das Standardfenster Speichern unter , um einen Speicherpfad und einen Dateinamen zu vergeben. Die Daten werden fortlaufend in diese Datei geschrieben, bis ein neuer Name vergeben oder eine andere Option zur Bezeichnung ausgewählt wird.

Option	Beschreibung
Für jede Probe eine Datei erzeugen (Zeile und Probenname wird an Dateinamen angehängt)	Der Dateiname wird um die Zeilennummer der Ergebnisliste und den Probennamen ergänzt. Nicht erlaubte Zeichen werden durch Unterstriche ersetzt (z. B. Testmethode-001 QC 1 mg_L.csv).

Spektrenexport

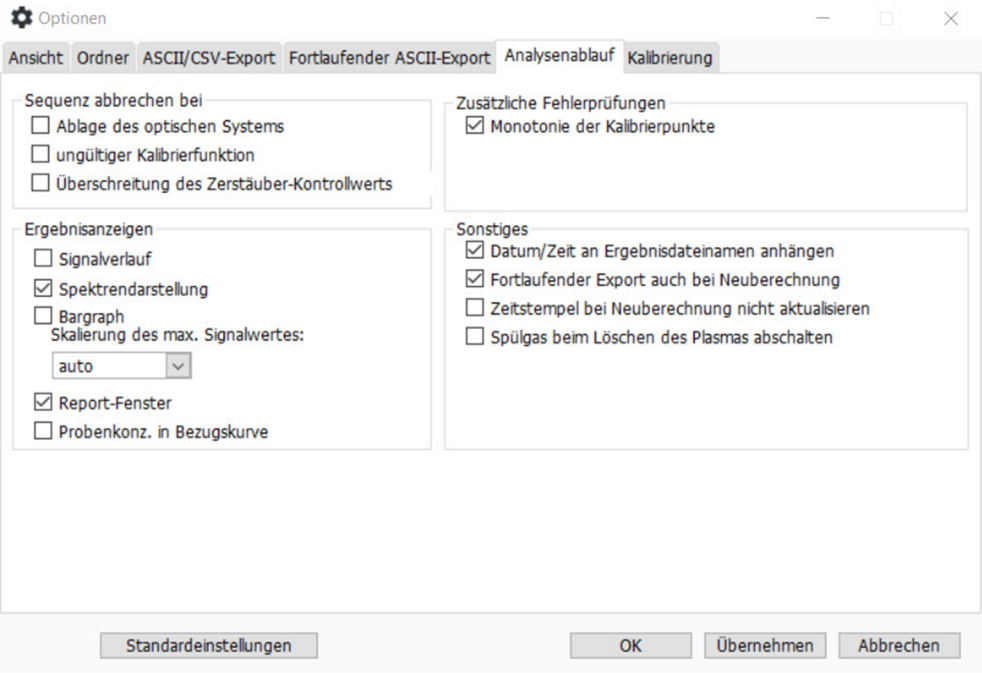
Für den Spektrenexport aktivieren Sie die Option **Fortlaufender Spektren-Export (CSV)** und wählen einen Speicherpfad.

Die Spektren werden zusätzlich als CSV-Dateien in den spezifischen Exportpfad exportiert. Der Dateiname wird nach dem Schema "Listenzeile-Probenbezeichnung-Linienbezeichnung-Wiederholungsmessung" gebildet, z. B. 0007-Probe-AI309-02.csv.

11.5 Optionen zum Analysenablauf

Im Fenster **Optionen | Analysenablauf** legen Sie allgemeingültige Einstellungen für den Analysenablauf fest. Screenshot

Fenster Optionen | Analysenablauf



Sequenz abbrechen nach folgenden Fehlern

Die Analyse wird hinsichtlich folgender Fehler überwacht und kann nach Auftreten dieser Fehler abgebrochen werden:

Option	Beschreibung
Ablage des optischen Systems	Stoppt, wenn die Einstellung der Wellenlänge (Ne-Korrektur) fehlerhaft ist
ungültiger Kalibrierfunktion	Stoppt, wenn die Kalibrierfunktion nicht berechnet werden konnte
Überschreitung des Zerstäuber-Kontrollwerts	Stoppt, wenn der Zerstäuber-Kontrollwert überschritten ist Während der Kalibrierung wird der Kontrollwert des Zerstäuberflusses ermittelt. Wenn sich während der nachfolgenden Analyse der Kontrollwert ändert, ist das ein Hinweis darauf, dass Partikel den Zerstäuber zusetzen.

Zusätzliche Fehlerprüfung

Option	Beschreibung
Monotonie der Kalibrierpunkte	Es erfolgt ein Test auf Monotonie der Kalibrierpunkte. Der Monotonietest untersucht, ob höhere Standardkonzentrationen auch zu höheren Messwerten führen.

Ergebnisanzeigen

Option	Beschreibung
Signalverlauf	Während des Analysenablaufs wird ein Fenster mit einer Darstellung des zeitabhängigen Verlaufs des Messsignals angezeigt.
Spektrendarstellung	Während des Analysenablaufs wird ein Fenster mit einer Darstellung des aufgenommenen Spektralbereichs angezeigt.
Bargraph	Zeigt gemessene Intensitäten als Balkendiagramm an
Skalierung des max. Signalwertes	Legt das Maximum der Messwert-Achse für die Darstellungen des Signalverlaufs fest auto: Automatische Achsenskalierung. Alternativ kann diese Einstellung auch mit der Menüfunktion An-sicht Skalierung vorgenommen werden.
Report-Fenster	Während des Analysenablaufs wird ein Fenster angezeigt, das Statusinformationen zum Plasma ausgibt.
Probenkonz. in Bezugskurve	Zeigt das Fenster Probenkonz. in Bezugskurve mit der aktuellen Kalibrierkurve und, soweit bereits gemessen, Rekalibrierkurve an. Nach der Probenmessung wird die Berechnung der unkorrigierten Konzentration aus der Emission mit roten Hilfslinien verdeutlicht. Im Falle der Additions-Kalibrierung wird die umgerechnete Kalibrierkurve angezeigt.

Sonstiges

Option	Beschreibung
Datum/Zeit an Ergebnisdateinamen anhängen	Aktuelle PC-Zeit beim Messstart wird automatisch an den Namen der Ergebnisdatei angehängt.
Fortlaufender Export auch bei Neuberechnung	Nach einer Neuberechnung werden die Ergebnisse automatisch exportiert.
Zeitstempel bei Neuberechnung nicht aktualisieren	Nach Neuberechnen der Ergebnisse bleiben die Originalzeiten der Messung erhalten.
Spülgas beim Löschen des Plasmas abschalten	Um Gas zu sparen, wird das Spülgas beim Löschen des Plasmas abgeschaltet.

Sehen Sie dazu auch

 Kalibrierung [► 94]

 Kalibrierparameter eingeben (Fenster Methode | Kalibrierung) [► 40]

11.6 Allgemeine Einstellungen für die Kalibration und Blindwertkorrektur

Im Fenster **Optionen | Analysenablauf** legen Sie allgemeingültige Einstellungen für die Kalibration fest und wählen ein Verfahren für die Blindwertkorrektur aus.

Kalibrierung

In dieser Gruppe nehmen Sie für die Kalibrierung grundlegende Einstellungen vor. In der Voreinstellung sind alle Kontrollkästchen deaktiviert.

Option	Beschreibung
Korrelationskoeffizient	Kennzahl der Anpassungsgüte der Kalibrierkurve auswählen R: Korrelationskoeffizient R ² !: Bestimmtheitsmaß R ² (adj.): adjustiertes Bestimmtheitsmaß
Prognose- statt Konfidenzband anzeigen	Wenn aktiviert, wird das Prognoseband für die Kalibrierung angezeigt. Das Konfidenzband ist in den Standardeinstellungen vorgesehen.
auto vergleicht mit quadratischer statt rationaler Funktion	"auto" bezeichnet die automatische Auswahl der Kalibrierfunktion. Wenn aktiviert, wird die quadratische Funktion für den Vergleich herangezogen. Die Standardeinstellung ist die gebrochene rationale Funktion.
Anstieg für mittlere Konzentration statt 0 berechnen	Wenn aktiviert, wird der Anstieg der Kalibrierkurve an der mittleren Konzentration des Kalibrierbereiches berechnet. In der Standardeinstellung wird der Anstieg für die Konzentration 0 berechnet.



HINWEIS

Für eine Kompatibilität der Berechnung der quadratischen Kalibrierfunktion nach DIN 38402 und ISO 8466-2 sind alle oben genannte Optionen zu aktivieren.

Blindwertkorrektur

Für die Blindwertkorrektur kann zwischen 2 verschiedenen Berechnungsverfahren gewählt werden: Konz.1-basiert oder Konz.2-basiert.

Beim Konz.2-basierten Berechnungsverfahren wird zunächst die Originalkonzentration des Blindwerts (Conc2_{BV}) auf Basis der Proben-IDs des Blindwerts berechnet. Bei Ermittlung der Konz.2 der Probe wird Conc2_{BV} berücksichtigt.

Beim Konz.1-basierten Berechnungsverfahren wird die direkt aus der Probe ermittelte Blindwertkonzentration (Conc1_{Blank}) für die Berechnung der Probenkonzentration herangezogen. Dieses Verfahren kann genutzt werden, wenn die Proben-ID-Daten (z. B. Verdünnungen) die Konzentration der Blindwert-Lösungen nicht stark beeinflussen und deshalb keine Proben-ID-Daten für die Blindwerte eingegeben werden.

Berechnungsbeispiel für flüssige Originalprobe mit Vorverdünnung:

- Konz.1-basiert: $\text{Conc2}_{\text{Sample}} = (\text{Conc1}_{\text{Sample}} - \text{Conc1}_{\text{Blank}}) * \text{DF}_{\text{Sample}}$
- Konz.2-basiert: $\text{Conc2}_{\text{Sample}} = (\text{Conc1}_{\text{Sample}} * \text{DF}_{\text{Sample}}) - \text{Conc2}_{\text{Blank}}$

Conc1 _{Sample}	Konzentration der Probe ohne Berücksichtigung der Angaben in der Proben-ID
Conc2 _{Sample}	Originalkonzentration der Probe
Conc1 _{Blank}	Konzentration des Blindwerts ohne Berücksichtigung der Angaben in der Proben-ID
Conc2 _{Blank}	Originalblindwert
DF _{Sample}	Verdünnungsfaktor der Probe

Für die Blindwertkorrektur ist standardmäßig das Konz.2-basierte Verfahren voreingestellt. Wenn Sie auf das verkürzte Konz.1-basierte Verfahren ohne Berücksichtigung der Proben-ID des Blindwertes zurückgreifen möchten, aktivieren Sie die Option **Blindwertkorrektur auf Konz.1-Basis**.

Nachweis- und Bestimmungsgrenze

Sie können für die Nachweisgrenzen und Bestimmungsgrenzen die Faktoren und Anzahl Wiederholungsmessungen editieren. Die berechneten Nachweisgrenzen/Bestimmungsgrenzen werden im Fenster **Kalibrierung** angezeigt. Wenn die Einstellungen auf vorhandene Ergebnisse angewendet werden sollen, müssen die Ergebnisse nachberechnet werden. Die verwendeten Faktoren und Anzahl Messwiederholungen werden im Fenster **Kalibrierung** und in den Druckprotokollen der Kalibration und Ergebnis/Leerwert-Messungen ausgegeben.

Zum Editieren der Faktoren und Messwiederholungen klicken Sie auf **NWG und UG**. Folgende Standardeinstellungen sind vorgesehen:

Parameter	Wert
Faktor NWG	3
FaktorBG	9
Anzahl der Wiederholungsmessungen	11

12 Datenaustausch mit einem externen Auftragsverwaltungssystem einrichten

Sie können über eine Datenschnittstelle Messergebnisse im ASCII/CSV-Format von ASpect PQ in ein Laborinformations-Management-System (LIMS) oder in ein anderes externes Programm exportieren.

Darüber hinaus können Sie Probeninformationsdaten (Proben-ID) im ASCII/CSV-Format aus externen Programmen, wie z. B. LIMS oder Microsoft Office-Anwendungen, importieren.

12.1 Messergebnisse exportieren

Sie können Messergebnisse zur weiteren Verarbeitung in anderen Anwendungen wie einem LIMS sowohl automatisch als auch manuell in den Textformaten ASCII/CSV exportieren.

Exportoptionen festlegen

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Optionen** mit dem Menüpunkt **Extras | Optionen**.
- ▶ Legen Sie auf der Karte **Ordner** unter **Export/Import** den Speicherpfad für den Export von Ergebnisdaten fest.
- ▶ Legen Sie auf der Karte **ASCII/CSV-Export** die Trennzeichen fest:
 - **Dezimaltrennzeichen:** Trennzeichen für Dezimalzahlen auswählen.
 - **Listentrennzeichen:** Zeichen auswählen, das die Elemente einer Liste voneinander trennt.
- ▶ Legen Sie die Felder für den Ergebnisexport fest:
 - **alle:** Sämtliche Spalten der Ergebnisliste, mit allen Unterkarten, exportieren.
 - **nur ausgewählte Felder:** Mit einem Klick auf  öffnen Sie eine Liste, in der Sie die zu exportierenden Spalten auswählen können.
- ▶ Übernehmen Sie die Exporteinstellungen mit einem Klick auf Schaltfläche **Übernehmen**.
 - ✓ Sie haben die Exportoptionen festgelegt. Die Einstellungen gelten für den automatischen und manuellen Export.

Automatischen Export einrichten

Richten Sie den automatischen Export von Ergebnisdaten während des Analysenablaufs ein. Die Software aktualisiert die Exportdatei unmittelbar nach Ausgabe einer neuen Zeile im Ablauf- und Ergebnisfenster. Dabei hängt die Software die neuen Daten an die bestehende Exportdatei an.

- ▶ Wechseln Sie im Fenster **Optionen** auf der Karte **Fortlaufender ASCII-Export**.
- ▶ Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Fortlaufender ASCII-Export von Ergebnisdaten**.
- ▶ Legen Sie den Dateinamen für die Exportdatei fest:
 - **Methodenbezeichnung.csv:** Der Dateiname entspricht der Bezeichnung der Methode, mit der Dateierweiterung ".csv".
 - **Bezeichnung der Ergebnisdatei.csv:** Der Dateiname entspricht der Bezeichnung der Ergebnisdatei, mit der Dateierweiterung ".csv".
 - **anderer:** Öffnen Sie mit einem Klick auf die Schaltfläche  das Standardfenster **Speichern unter**. Vergeben Sie einen Speicherpfad und Dateinamen.

- ✓ Die Software schreibt die Daten fortlaufend in die Datei, bis Sie einen neuen Namen vergeben oder eine andere Option zur Dateibezeichnung auswählen.
- ▶ Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Für jede Probe eine Datei erzeugen (Zeile und Probenname wird an Dateinamen angehängt)**, wenn Sie für jede Probe eine Datei erzeugen möchten.
 - ✓ Die Software ergänzt den Dateinamen um die Zeilennummer der Ergebnisliste und den Probennamen. Nicht erlaubte Zeichen werden durch Unterstriche ersetzt (z. B. Testmethode-001 QC 1 mg_L.csv).
- ▶ Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Fortlaufender Spektren-Export (CSV)**, wenn Sie auch Spektren automatisch exportieren möchten. Wählen Sie unter **Exportpfad** den Speicherpfad.
- ▶ Übernehmen Sie die Exporteinstellungen mit einem Klick auf Schaltfläche **Übernehmen**.
- ▶ Wechseln Sie auf Karte **Analysenablauf**.
- ▶ Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Fortlaufender Export auch bei Neuberechnung**, wenn Sie Ergebnisse auch nach einer Neuberechnung automatisch exportieren möchten.
- ▶ Schließen Sie das Fenster mit einem Klick auf **OK**.
 - ✓ Sie haben den automatischen Datenexport eingerichtet.

Ergebnisse manuell exportieren

Exportieren Sie Messergebnisse alternativ manuell.

- ▶ Wechseln Sie im Hauptfenster auf die Karte **Ergebnisse**.
- ▶ Markieren Sie die Proben in der Ergebnisliste.
Halten Sie die Strg- oder Umschalttaste gedrückt und wählen Sie die zu exportierenden Daten durch Mausklick auf die jeweilige Probenzeile aus.
Alle Probenzeilen markieren Sie mit dem Menüpunkt **Bearbeiten | Alles markieren**.
- ▶ Wählen Sie den Menüpunkt **Bearbeiten | Auswahl speichern**.
- ▶ Geben Sie im Standardfenster **Speichern unter** einen Dateinamen ein. Bestätigen Sie die Eingabe mit Klick auf **OK**.
 - ✓ Die Software exportiert die Ergebnisse im ASCII/CSV-Format mit der Dateierweiterung ".csv".
- ▶ Bei Auswahl von Menüpunkt **Bearbeiten | Nur sichtbare Spalten kopieren** oder **Alle Spalten kopieren** kopiert die Software die Daten in die Zwischenablage. Sie können die Daten über die Tastenkombination Strg+V in eine geöffnete Excel-Datei übertragen.

Datenformat

Die Software trennt die Einträge der Textdatei durch das spezifizierte Listentrennzeichen. Jede Zeile schließt mit einem Zeilenende (CR/LF) ab.

- Die Exportdatei beginnt mit Kopfdaten, die Angaben über das Gerät, die Version der verwendeten Software und Datum und Uhrzeit der Dateierzeugung enthalten.
- Das Datum wird entsprechend der Einstellung in der Windows Systemsteuerung formatiert. Dabei wird das Datumsformat (kurz) verwendet.
- Nach einer Leerzeile folgt die Liste der zu exportierenden Felder.
- Die Kopfdaten werden nur einmal erzeugt. Nach den Kopfdaten folgen die Messwerte.

Beispiel für eine Exportdatei:

```
Instrument: PQ 9200 #10587200262BB0101 Tech: ICP-OES
SW-Version: ASpect PQ 1.3.2.2007 Created: 29.10.2024 14:04

Nr.;Name;Linie;Typ;Einheit;Konz.1;SD1;RSD%;VB;VF;Einheit;
Konz.2;SD2;RSD%;VB;100%
norm.;QC;QC;QC;Bem.;Ints.;SD(Ints.);RSD%;Datum;Zeit;
Norm.Ints.;SD;RSD%;Masse;Einh.;Feuchte[%];RHF[%];Einw.[mg];
Fehler;Pos;Vor-VF;Einw.[g];Vol.[mL];Ges.einw.
|[g];Name(2);AS-VF;BW-
Korr.;Faktor;Einzelwerte(Ints.);;Untergrund(Ints.);
1;Sample1;Co237.863;0;µg/L;1968;47.49;
2.41;215.9;1;mg/L;1.968;0.0475; 2.41;0.2159;;;;;>
KAL;257059;6194; 2.41;29.10.2024;14:04;;;;;;101;
1.000;;;;; 1;aus;
0.00;256411;251214;263551;20389;9786;27849;
2;Sample1;Ni231.604;0;µg/L;1537;62.95;
4.10;93.89;1;mg/L;1.537;0.0630;
4.10;0.0939;;;;;254729;10328;
4.05;29.10.2024;14:04;;;;;;101; 1.000;;;;; 1;aus;
0.00;246002;252054;266131;4598;16546;33369;
3;Sample2;Co237.863;0;µg/L;2289;17.01;
0.74;254.0;1;mg/L;2.289;0.0170; 0.74;0.2540;;;;;>
KAL;298914;2219; 0.74;29.10.2024;14:04;;;;;;102;
1.000;;;;; 1;aus;
0.00;300902;299321;296520;27198;27379;28180;
4;Sample2;Ni231.604;0;µg/L;1755;20.57;
1.17;108.4;1;mg/L;1.755;0.0206; 1.17;0.1084;;;;;>
KAL;290377;3374; 1.16;29.10.2024;14:04;;;;;;102;
1.000;;;;; 1;aus;
0.00;294115;287557;289459;26485;9243;18241;
```

Abb. 1 CSV-Export

12.2 Probeninformationsdateien importieren

Sie können Probeninformationsdateien (Proben-ID) im ASCII/CSV-Format mit einem LIMS oder mit Microsoft Office-Anwendungen generieren und manuell importieren.

Stellen Sie für einen erfolgreichen Import sicher, dass die einzelnen Zeilen der Probeninformationsdatei durch Zeilenendezeichen (CR/LF) abschließen.

Beispiel für eine gültige Probeninformationsdatei:

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

Abb. 2 CSV-Import

- Proben-ID manuell importieren ► Eine Proben-ID können Sie mit einer der folgenden Alternativen öffnen:
- Klicken Sie in der Werkzeugleiste auf das Symbol  neben dem Feld **Proben**.
 - Wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Probeninformations-Datei öffnen**.
 - Klicken Sie im Fenster **Proben-ID** auf **Öffnen**.
- Wählen Sie im Standardfenster **Öffnen** die Datei aus.
- ✓ Die Proben-ID wird im Fenster **Proben-ID** angezeigt und kann für die nächste Analyse verwendet werden.

12.3 Felder des Ergebnisexports

Feldname	Beschreibung	Datentyp
Nr.	Nummer in der Sequenzliste	Ganzzahl
Name	Name der Probe, des Standards oder der QC-Probe/Standard	Zeichenkette, max. 20 Zeichen
Linie	Elementlinie	Zeichenkette, max. 10 Zeichen
Typ	Analyt oder Interner Standard 0 = Analyt IS1 ... x = Interner Standard	Ganzzahl
Einheit1	Einheit der Konzentration 1 (Konzentration der Analysenprobe)	Zeichenkette, max. 10 Zeichen
Konz.1	Konzentration des Analyten in der Probe/im Standard	Dezimalzahl
SD1	Standardabweichung der Konz. 1 (Mittelwertstatistik)	Dezimalzahl
RSD%	Relative Standardabweichung der Konz. 1 (Mittelwertstatistik)	Dezimalzahl
VB	Vertrauensbereich der Konz. 1	Dezimalzahl
VF	Verdünnungsfaktor bei automatischer Verdünnung der Probe (wird für Konz.-Berechnung berücksichtigt)	Dezimalzahl
Einheit2	Einheit der Konzentration 2 (Konzentration der Originalprobe)	Zeichenkette, max. 10 Zeichen
Konz.2	Konzentration der Originalprobe	Dezimalzahl
SD2	Standardabweichung der Konz. 2 (Mittelwertstatistik)	Dezimalzahl
RSD%	Relative Standardabweichung der Konz. 2 (Mittelwertstatistik)	Dezimalzahl
VB	Vertrauensbereich der Konz. 2	Dezimalzahl
100% norm.	Auf Prozentanteil normierte Konz. 2	Dezimalzahl
QC	QC- und Kalibrierinformationen	Zeichenkette, max. 30 Zeichen
QC	QC- und Kalibrierinformationen	Zeichenkette, max. 30 Zeichen
QC	QC- und Kalibrierinformationen	Zeichenkette, max. 30 Zeichen
Bem.	Bemerkungen	Zeichenkette, max. 40 Zeichen
Ints.	Mittelwert der gemessenen Einzelintensitäten	Dezimalzahl
SD (Ints.)	Standardabweichung (Mittelwertstatistik)	Dezimalzahl
RSD%	Relative Standardabweichung (Mittelwertstatistik)	Dezimalzahl
Datum	Datum der Messung	Windows Einstellung für kurzes Datumsformat, z. B. 30.01.2024

Feldname	Beschreibung	Datentyp
Zeit	Uhrzeit der Messung	hh:mm, z. B. 14:29
Norm.Ints.	(in ASpect PQ nicht verwendet)	/
SD	(in ASpect PQ nicht verwendet)	/
RSD%	(in ASpect PQ nicht verwendet)	/
Masse	(in ASpect PQ nicht verwendet)	/
Einh.	(in ASpect PQ nicht verwendet)	/
Feuchte[%]	(in ASpect PQ nicht verwendet)	/
RHF[%]	(in ASpect PQ nicht verwendet)	/
Einw. [mg]	(in ASpect PQ nicht verwendet)	/
Fehler	Fehlermeldung, wenn Fehler bei Messung aufgetreten	Zeichenkette
Pos	Probenposition im Probengeber	Ganzzahl
Vor-VF	Vorverdünungsfaktor. Faktor, mit dem die Originalprobe verdünnt wurde, bevor sie im Probengeber platziert bzw. bei der Arbeit ohne Probengeber dem Plasma zugeführt wird. Der Faktor ist zur Berechnung der Konzentration der Originalprobe (Konz. 2) notwendig.	Dezimalzahl
Einw. [mg]	Einwaage in Milligramm. Masse der Originalprobe, die in der Probenvorbehandlung in Lösung gebracht wurde (wird bei der Berechnung der Konz. 2 verwendet)	Dezimalzahl
Vol. [mL]	Volumen des Lösungsmittels, in dem die jeweilige Einwaage gelöst wurde in mL (wird bei der Berechnung der Konz. 2 verwendet)	Ganzzahl
Ges.einw. [g]	Gesamteinwaage der Probe und des Lösungsmittels in Gramm	Dezimalzahl
Name(2)	Zusätzliche Probenbezeichnung	Zeichenkette, max. 20 Zeichen
AS-VF	Verdünnungsfaktor des Probengebers oder Verdünnungssystems	Dezimalzahl
BW-Korr.	Blindwertkorrektur aus Es wird keine Blindwertkorrektur durchgeführt. ein Für Berechnung der Konzentration der Originalprobe wird der zuletzt in der Sequenz gemessene Blindwert subtrahiert.	0 1
Faktor	(in ASpect PQ nicht verwendet)	/
Einzelwerte(Ints.)	Einzelwerte der Intensitätsmessungen	Zeichenkette von Dezimalzahlen durch Leerzeichen separiert, max. 1000 Zeichen

Feldname	Beschreibung	Datentyp
Untergrund(Ints.)	Untergrundintensität an der Elementlinie	Zeichenkette von Dezimalzahlen durch Leerzeichen separiert, max. 1000 Zeichen

12.4 Felder der Probeninformationsdateien

Feldname	Beschreibung	Datentyp
Pos	Probenposition im Probengeber	Ganzzahl
Name	Name der Probe, des Standards oder der QC-Probe/Standard	Zeichenkette, max. 20 Zeichen
Vor-VF	Vorverdünnungsfaktor. Faktor, mit dem die Originalprobe verdünnt wurde, bevor sie im Probengeber platziert bzw. bei der Arbeit ohne Probengeber dem Plasma zugeführt wird. Der Faktor ist zur Berechnung der Konzentration der Originalprobe (Konz. 2) notwendig.	Dezimalzahl
Einheit	Einheit für die Konzentration der Probe	Zeichenkette, max. 10 Zeichen
Faktor	Einheitenfaktor Faktor 1 entspricht 1 µg/L bzw. µg/kg, Faktor 1000 entspricht 1 ng/L bzw. ng/kg	Zeichenkette, max. 10 Zeichen
Art	Art der Einheit 0 = flüssig 1 = fest 2 = flüssig gravimetrisch	Ganzzahl
Einw. [mg]	Einwaage in Milligramm. Masse der Originalprobe, die in der Probenvorbehandlung in Lösung gebracht wurde (wird bei der Berechnung der Konz. 2 verwendet)	Dezimalzahl
Vol. [mL]	Volumen des Lösungsmittels, in dem die jeweilige Einwaage gelöst wurde in mL (wird bei der Berechnung der Konz. 2 verwendet)	Ganzzahl
Ges.einw. [g]	Gesamteinwaage der Probe und des Lösungsmittels in Gramm	Dezimalzahl
Name(2)	Zusätzliche Probenbezeichnung	Zeichenkette, max. 20 Zeichen
AS-VF	Verdünnungsfaktor des Probengebers oder Verdünnungssystems	Dezimalzahl
BW-Korr.	Blindwertkorrektur aus Es wird keine Blindwertkorrektur durchgeführt.	0 1

Feldname	Beschreibung	Datentyp
	ein Für Berechnung der Konzentration der Originalprobe wird der zuletzt in der Sequenz gemessene Blindwert subtrahiert.	
Probentyp	Probe oder Leerwert 0 = Probe 1 = Reagenz - Leerwert	Ganzzahl
Elemente	In der Probe zu analysierende Elemente oder Linien alle = alle Elemente der Methode Elementsymbole durch Kommata getrennt, z. B. Fe, Co, Ni	Zeichenkette, max. 10 Zeichen

13 Optionales FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul

Das optionale FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul für ASpect PQ beinhaltet folgende Funktionen gemäß den FDA-Anforderungen zu Electronic Records und Electronic Signatures (21 CFR Part 11):

- Benutzerverwaltung
- Elektronische Signaturen
- Audit Trail
- AJ File Protection zum Schutz der Dateien gegen beabsichtigte und unbeabsichtigte Datenmanipulation

In der Benutzerverwaltung sind standardmäßig 6 Benutzerebenen angelegt. Die Benutzerebenen können frei konfiguriert und durch weitere Benutzerebenen ergänzt werden.

Bei installierter und konfigurierter Benutzerverwaltung wird der Menüpunkt **System** in ASpect PQ aktiviert, mit dem auf die Funktionen der Benutzerverwaltung zugegriffen werden kann.

Alle Änderungen an den Benutzerdaten werden mit dem Schließen des jeweiligen Fensters permanent in einer verschlüsselten Datenbank gespeichert.

13.1 Benutzerverwaltung

13.1.1 Benutzerverwaltung – Anzeigen und Einstellungen

Die Benutzerverwaltung kann beim ersten Start der Benutzerverwaltung nach der Installation oder zu einem späteren Zeitpunkt von Benutzern mit Administratorrechten eingerichtet werden.

Für jeden Benutzer wird ein Konto angelegt, in dem das Benutzerprofil gespeichert ist. Wird ein Benutzerkonto nicht mehr benötigt, kann es deaktiviert oder gesperrt werden. Benutzerkonten können nicht gelöscht werden.

- ▶ In ASpect PQ den Menüpunkt **System | Benutzerverwaltung** öffnen.
- ▶ Alternativ können Sie die Benutzerverwaltung außerhalb von ASpect PQ über das Windows-Menü **ASpect PQ | Benutzerverwaltung** öffnen.
- ▶ Anmeldedaten eines Nutzers mit Berechtigungen für die Benutzerverwaltung eingeben.
 - ✓ Das Fenster **Benutzerverwaltung** erscheint.

Fenster Benutzerverwaltung

Das Fenster enthält eine Liste mit den eingetragenen Benutzernamen und den dazugehörigen vollständigen Namen. Auf der rechten Seite des Fensters werden die Einzelheiten des Benutzerprofils des ausgewählten Nutzers angezeigt.

Einzelheiten des Benutzerprofils

Für einen in der Liste markierten Benutzer werden folgende Daten angezeigt:

Option	Beschreibung
Benutzername	Anmeldename des Benutzers
Benutzerebene	Zugewiesene Benutzerebene mit Benutzerrechten
Vollstd. Name	Vollständiger Name des Benutzers
E-Signatur	Ja: Der Benutzer kann Ergebnisdaten elektronisch signieren. Nein: Der Benutzer kann nicht elektronisch signieren.

Option	Beschreibung
Status	Aktiv: Der Benutzername kann verwendet werden (grüner Kreis). Inaktiv: Benutzername ist deaktiviert und kann nicht verwendet werden (roter Kreis).
Kennwortschutz	Aktiv: Die Benutzeranmeldung erfordert ein Kennwort. Nicht aktiv: Benutzeranmeldung ist ohne Kennwort möglich. Mit Klick auf das Schlosssymbol öffnet sich das Fenster Benutzerdaten ändern. Wenn das Schloss geschlossen ist, ist der Kennwortschutz aktiviert.
Gültig bis	Unbegrenzt: Das Kennwort läuft nie ab. Datum/Tage: Der Anwender muss das Kennwort nach Ablauf der spezifizierten Frist ändern. Die Option wird nicht angezeigt, wenn die Anmeldung über Active Directory erfolgt.

Schaltflächen

Schaltfläche	Beschreibung
Neu ...	Neuen Benutzer anlegen Das Fenster Benutzerdaten hinzufügen erscheint.
Ändern ...	Benutzerdaten für markierte Tabellenzeile ändern Das Fenster Benutzerdaten ändern für einen markierten Benutzer erscheint. Das Fenster kann auch durch Doppelklick auf den Benutzer aufgerufen werden.
Nur aktive Benutzer	Nur aktive Benutzer anzeigen
Audittrail	Ereignisprotokoll öffnen
Berechtigungen	Benutzerberechtigungen in der Software zuweisen
Beenden	Anwendung beenden

13.1.2 Benutzerebenen konfigurieren

Ab FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul Version 2.0 besitzt die Benutzerverwaltung eine neue Funktionalität für die Einrichtung der Benutzerebenen. Während in den vorhergehenden Software-Versionen die verfügbaren Berechtigungen der Benutzerebenen festgelegt waren, können Sie nun die Benutzerebenen frei konfigurieren. In einer Liste von Software-Funktionen aktivieren oder deaktivieren Sie die Funktionen, die für eine Benutzerebene zugänglich sein soll.

Anzahl verfügbare Benutzerebenen

In der Benutzerverwaltung sind standardmäßig 6 Benutzerebenen angelegt. Die Benutzerebenen können frei konfiguriert und durch weitere Benutzerebenen ergänzt werden.

- Administratorebene (Ebene 0)
Der Administrator hat vollständige Rechte für die Benutzerverwaltung und kann die Benutzerverwaltung einrichten, Rechte in den Benutzerebenen konfigurieren und Benutzer anlegen oder sperren. In der Voreinstellung hat der Administrator keine Berechtigung für ASpect PQ und kann sich nicht in der Software anmelden.
- Ebene 1
Benutzer dieser Ebene besitzen alle Berechtigungen für ASpect PQ für Methodenentwicklung und Routine und können die Software konfigurieren.
- Ebene 2 bis 4
Benutzer dieser Ebene haben abgestufte Berechtigungen für den Analysenbetrieb, wobei gilt: Ebene 2 > Ebene 3 > Ebene 4. Sie haben keine Berechtigungen zur Konfiguration von ASpect PQ.

■ Benutzerebene 5

Die Benutzer dieser Ebene besitzen Berechtigungen für die Anmeldung an der Benutzerverwaltung und ASpect PQ mit minimalen Berechtigungen, z.B. für Auditzwecke.

Optional können bis zu 4 weitere Ebenen (6 bis 9) für spezielle Konfigurationen angelegt werden.

Benutzerebenen konfigurieren

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Benutzerverwaltung** auf **Berechtigungen**.
✓ Das Fenster **Benutzerberechtigungen ändern** erscheint.
- ▶ In der Matrix Berechtigung/Ebenen können Sie durch Anhaken der Kontrollkästchen eine Funktion in einer Ebene aktivieren.
Wenn Sie einen Rechtsklick auf ein Kontrollkästchen ausführen, können Sie über das Kontextmenü alle Häkchen in der Ebene setzen oder entfernen oder die Berechtigungen einer anderen Ebene übernehmen.
- ▶ Wenn Sie zusätzliche Ebenen der Matrix hinzufügen möchten, klicken Sie auf **Konfigurieren**. Aktivieren Sie die Option **Zusätzliche Benutzerebenen (max.4)**: und stellen Sie die gewünschte Anzahl in der Liste ein.
- ▶ Wenn Sie die Rechtevergabe auf die Voreinstellungen zurücksetzen möchten, klicken Sie auf **Konfigurieren**. Aktivieren Sie die Option **Benutzerrechte und -ebenen auf Voreinstellung zurücksetzen**. Wenn zusätzliche Benutzerebenen schon Benutzern zugewiesen wurden, erscheint eine Aufforderung zur Änderung des entsprechenden Benutzerprofils.
- ▶ Jeder Funktionsberechtigung ist eine ID zugeordnet. Wenn ein Benutzer eine Tätigkeit ausführen möchte, zu der er keine Berechtigung hat, wird in der Warnung/Fehlermeldung diese ID ausgegeben. Mit der ID können Sie die fehlende Berechtigung eindeutig identifizieren. Aktivieren Sie bei Bedarf die Option **Spalte "ID" anzeigen**.

Hinweise zu Benutzerrechten

Einzelne Benutzerrechte sind mit den allgemeinen Einstellungen in der Benutzerverwaltung verknüpft. Diese Einstellungen erreichen Sie im Fenster **Benutzerverwaltung** über den Menüpunkt **Extras | Einstellungen**.

Recht	Beschreibung
Kalibrierintervall ignorieren (ME003)	In den Einstellungen der Benutzerverwaltung können Sie optional eine Gültigkeitszeitspanne für die Kalibrierung festlegen. Wenn Sie diese Zeitspanne aktiviert haben und der Benutzer nicht dieses Recht besitzt, kann er keine Messung starten.
Messung mit nicht freigegebenen Methoden (Kategorien) (ME004)	Sie können für die Methoden beim Speichern das Merkmal Kat. (Kategorie) vergeben und so Methoden für die Verwendung kennzeichnen. In der Benutzerverwaltung können Sie bis zu 5 Bezeichnungen für Kategorien angeben, durch die Methoden als freigegeben gekennzeichnet sind. Wenn ein Benutzer dieses Recht besitzt, kann er eine Messung mit einer nicht freigegebenen Methode starten.

Hinweise zum Update

Wenn Sie bereits eine Benutzerverwaltung eingerichtet haben, werden den Benutzern die neuen Benutzerebenen Admin und Ebene1 bis Ebene 4 zugeordnet. Prüfen Sie, ob die eingestellten Berechtigungen ihren Bedürfnissen entsprechen und ändern Sie die Rechte in den Ebenen. Achten Sie besonders darauf, dass in der neuen Installation der Administrator standardmäßig nur Zugang zur Benutzerverwaltung und keine Rechte mehr zur Bedienung von ASpect PQ hat.

13.1.3 Allgemeine Einstellungen der Benutzerverwaltung konfigurieren

Im Fenster **Einstellungen** können Sie mit folgenden Optionen die Benutzerverwaltung generell konfigurieren:

- Anmeldung und Richtlinien für das Kennwort
- Verwendung von Datenverzeichnissen
- Einstellungen für die Verwendung von Kalibrierungen und Methoden
- Signaturen

Die Einstellungen gelten für neu erstellte Benutzerkonten und sind daher zweckmäßigerweise nach der Installation durchzuführen, bevor Benutzerkonten angelegt werden.

- ▶ Wählen Sie im Fenster **ASpect PQ Benutzerverwaltung** den Menüpunkt **Extras | Einstellungen....**
Das Fenster **Einstellungen** erscheint.
- ▶ Wählen Sie auf der linken Seite die zu ändernde Aktionsgruppe.
- ▶ Nehmen Sie die Konfiguration vor.
Mit Klick auf **Auf Standardwerte setzen** stellen Sie die Voreinstellungen für die ausgewählte Aktionsgruppe wieder her. Die Einstellungen der anderen Gruppen bleiben davon unberührt.
- ▶ Übernehmen Sie die Einstellungen mit Klick auf **OK**.

Anmeldung

Sie können die Anmeldung lokal über die Benutzerverwaltung oder über einen Anmelde-
server über Active Directory konfigurieren.

Für die lokale Anmeldung wählen Sie auf der Seite **Anmeldung** die Option **Lokal (über Benutzerverwaltung)** und konfigurieren Sie die allgemeinen Richtlinien für neue Anmeldungen und Kennwörter:

Option	Beschreibung
Anzahl der Anmeldeversuche:	Anzahl der ungültigen Anmeldeversuche (max. 10) Bei Überschreitung wird ASpect PQ nach einer Wartezeit beendet und muss für eine weitere Anmeldung erneut gestartet werden. Es erfolgt ein Eintrag (Warnung) in die Audittrail-Datei.
Bei Überschreitung Benutzer sperren	Benutzer nach Überschreiten der Anzahl Anmeldeversuche sperren
Mindestlänge des Benutzernamens:	Mindestanzahl der Zeichen für neu angelegte Benutzernamen (max. 10)
Kennwortvergabe erzwingen	Für neu erteilte Benutzernamen muss ein Kennwort vergeben werden.
Kennwort muss Buchstaben und Ziffern enthalten	Nur Kennwörter, die sowohl Buchstaben als auch Ziffern enthalten, können vergeben werden. Diese Richtlinie wird auch bei der Kennwortänderung angewendet.
Benutzername und Kennwort unterschiedlich	Nur Kennwörter, die sich vom Benutzernamen unterscheiden, können vergeben werden. Diese Richtlinie wird auch bei der Kennwortänderung angewendet.
Kennwort bei der nächsten Anmeldung ändern aktivieren	Neuangelegte Benutzer müssen standardmäßig bei der ersten Anmeldung ihr Kennwort ändern.
Kennwort läuft ab nach:	Nach Ablauf der Frist wird der Benutzer bei der Anmeldung zum Ändern des Kennworts aufgefordert. Das Kennwort wird dann um die in den Richtlinien eingestellte Frist (max. 999 Tage) verlängert. Der Wert wird als Vorgabe übernommen.
Mindestlänge des Kennworts:	Mindestanzahl der Zeichen für neu angelegte Kennwörter Anzahl Zeichen: 3 bis 10

Für die serverbasierte Anmeldung aktivieren Sie die Option **Serverbasiert (über Active Directory)** und konfigurieren Sie Folgendes:

Option	Beschreibung
Domain-Name(n)	Domainnamen des Anmeldeservers Es können 2 Server angegeben werden.
Lokale Anmeldung erlauben, wenn Anmeldeserver nicht erreichbar	Wenn die Anmeldung über den Server fehlschlägt, können sich die mit den entsprechenden Rechten ausgestatteten Benutzer lokal in der Benutzerverwaltung über das Windows Startmenü anmelden. Für diesen Zweck muss den Benutzern auch ein lokales Passwort zugewiesen sein. In der Benutzerverwaltung können die berechtigten Benutzer die Option Lokal (über Benutzerverwaltung) aktivieren, sodass eine lokale Anmeldung in ASpect PQ möglich ist.
Lokale Anmeldung für AJService Konto erlauben	Die Aktivierung dieser Option ermöglicht AJ Service-Personal Wartungen am Gerät ohne zusätzliche Unterstützung des Administrators auszuführen.

Ordner

Das Arbeitsverzeichnis der Steuer- und Auswertesoftware und das Verzeichnis für die Audittrail-Datei können spezifiziert werden.

Option	Beschreibung
ASpect-Arbeitsverzeichnis	Einstellung des Arbeitsverzeichnisses Das Arbeitsverzeichnis enthält die Methoden- und Sequenzdatenbanken und die Ergebnisdateien. Das Arbeitsverzeichnis wurde bei der Installation von ASpect PQ festgelegt und kann hier geändert werden.
Audittrail	Einstellung des Pfads der Audittrail-Datei Der Pfad kann geändert werden.
Ordner mit Benutzerdatenbank	Anzeige des Pfads der Benutzerdatenbank Dieser Pfad kann nur mit Hilfe des Installationsprogramms geändert werden.
AJ File Protection	Zusätzlichen Schutz bietet die optionale Software AJ File Protection. Diese schützt Dateien gegen beabsichtigte und unbeabsichtigte Datenmanipulation, z. B. Löschen oder Verändern von Daten. Bei installierter AJ File Protection ist die Schaltfläche aktiv und zeigt den Schutzstatus durch eine Markierung an. Grün – Dateischutz ist aktiv; Rot – Dateischutztreiber ist nicht aktiv. Nach Klick auf die Schaltfläche erscheint ein Fenster mit einer Liste der geschützten Verzeichnisse.

Berechtigungen (Details)

In dieser Gruppe werden generelle Einstellungen für Methoden und Kalibrierungen getroffen, die Auswirkungen auf die Berechtigungen in den Benutzerebenen haben.

Option	Beschreibung
Gültigkeitsdauer der Kalibrierung [h:mm]:	Optional Gültigkeitszeitraum der Kalibrierung spezifizieren Wenn die Berechtigung Kalibrierintervall ignorieren für einen Benutzer deaktiviert ist (siehe Benutzerebenen), kann der Benutzer nach Ablauf der Gültigkeitsdauer keine Sequenz starten. Wenn die Berechtigung Kalibrierintervall ignorieren aktiviert ist, kann der Benutzer die Sequenz starten. Es wird ein Hinweis angezeigt, dass die Gültigkeitsdauer der Kalibrierung abgelaufen ist.

Option	Beschreibung
Methoden-Kategorien für freigegebene Methoden	Sie können hier bis zu 5 Kategorien angeben, mit denen Sie die Methoden als freigegeben kennzeichnen. Die Kategorien geben Sie jeweils beim Speichern der Methode im Feld Kat. ein. Wenn die Berechtigung Messung mit nicht freigegebenen Methoden (Kategorien) für einen Benutzer deaktiviert ist, kann dieser Benutzer keine Sequenz starten, wenn die dazugehörige Methode nicht mit einer der vorgegebenen Kategorien gekennzeichnet ist.

Signaturen

Die Liste zeigt die Signaturbedeutungen und die dazugehörigen Benutzerebene an, die beim Signieren ausgewählt werden können.

Schaltfläche	Beschreibung
Neu	Neue Signaturbedeutung hinzufügen Nach Klick auf die Schaltfläche erscheint das Fenster Signaturbedeutungen bearbeiten, in dem eine neue Signaturbedeutung und die gültige Benutzerebene ausgewählt werden können.
Ändern	Markierte Signaturbedeutung editieren
Entfernen	Markierte Signaturbedeutung löschen

13.1.4 Neues Benutzerkonto anlegen

Nur Benutzer mit den entsprechenden Benutzerrechten können ein neues Benutzerkonto einrichten. In den Voreinstellungen der Benutzerebenen sind der Ebene Admin die Rechte für die Benutzerverwaltung zugeteilt. Die Konfiguration eines neuen Benutzers mit entsprechenden Rechten erfolgt im Fenster **Benutzerdaten hinzufügen**.

Optionen im Fenster Benutzerdaten hinzufügen

Option	Beschreibung
Benutzername	Mit diesem Namen meldet sich der Benutzer an. Groß- und Kleinschreibung wird nicht geprüft. Die Mindestlänge hängt von den allgemeinen Konfigurationen der Benutzerverwaltung ab.
Vollstd. Name	Vollständiger Name des Benutzers Dieser Name wird als Bestandteil der elektronischen Signatur verwendet. Max. Anzahl Zeichen: 32
Beschreibung	Feld für Notizen Die Eingabe ist optional.
Benutzerebene	Auswahl der Benutzerebene mit den entsprechenden Rechten
Kennwort	Kennwort festlegen Bei Kennwörtern wird Groß-/Kleinschreibung unterschieden. Bei Bestätigung des Kennwortdialogs ohne Eingabe eines Kennworts wird der Kennwortschutz aufgehoben. Die Mindestlänge und andere Kennwortrichtlinien werden in den allgemeinen Konfigurationen der Benutzerverwaltung spezifiziert. Max. Kennwortlänge: 20 Zeichen
Schloss-Symbol	Geschlossen: Der Kennwortschutz ist durch die Vergabe eines Kennworts aktiviert. Offen: Der Kennwortschutz wurde noch nicht aktiviert.

Option	Beschreibung
Kennwort läuft nie ab	Wenn aktiviert, ist das Kennwort unbefristet gültig. Wenn deaktiviert, läuft das Kennwort in einer vorgegebenen Frist ab. Der vorgegebene Wert wird aus den Kennwort-Richtlinien übernommen. Der Benutzer kann das Kennwort auch vorher verlängern. Diese Einstellung ist ausgeblendet, wenn die Anmeldung über den Anmeldeserver und Active Directory erfolgt.
Benutzerspezifisches Arbeitsverzeichnis	Für den Benutzer wird ein eigenes Arbeitsverzeichnis entsprechend folgendem Schema eingestellt: \ASpect-Arbeitsverzeichnis\Benutzername. Die Verzeichnisstruktur wird bei der Erstanmeldung des Benutzers angelegt.
E-Signatur verwenden	Der Benutzer darf Messergebnisse elektronisch signieren. Ihm stehen dabei die Signaturbedeutungen seiner Benutzerebene zur Verfügung.
Benutzernamen sperren	Das Benutzerkonto deaktivieren Der Benutzername kann zeitweise deaktiviert werden. Durch die Deaktivierung eines Benutzerkontos, wird verhindert, dass für neu angelegte Benutzer der Benutzername erneut vergeben werden kann.
Benutzer muss Kennwort bei nächster Anmeldung ändern	Bei der nächsten Anmeldung wird der Benutzer zur Kennwortänderung aufgefordert.

Benutzerdaten spezifizieren

- ▶ Im Fenster **Benutzerverwaltung** auf **Neu ...** klicken.
Das Fenster **Benutzerdaten hinzufügen** erscheint.
- ▶ In den Feldern und Optionen die Einstellungen vornehmen und mit Klick auf **OK** bestätigen.
 - ✓ Das neue Benutzerkonto erscheint im Fenster **ASpect PQ Benutzerverwaltung**.

Sehen Sie dazu auch

📖 Allgemeine Einstellungen der Benutzerverwaltung konfigurieren [▶ 155]

13.1.5 Bestehendes Benutzerkonto ändern

Sie können die Eigenschaften eines Benutzerkontos ändern.

- ▶ Im Fenster **Benutzerverwaltung** das Benutzerkonto markieren und auf **Ändern ...** klicken.
Das Fenster **Benutzerdaten ändern** mit den Einstellungen des Kontos erscheint.
- ▶ Die Einstellungen vornehmen und auf **OK** klicken.
 - ✓ Die Änderungen werden übernommen und sind bei der nächsten Anmeldung des Benutzers wirksam.

Sehen Sie dazu auch

📖 Neues Benutzerkonto anlegen [▶ 157]

13.2 Kennwort ändern

Diese Funktion gibt es nur bei lokaler Anmeldung in ASpect PQ oder der Benutzerverwaltung. Bei Anmeldungen über einen Anmeldeserver werden die Passwörter und deren Gültigkeit dort verwaltet.

Je nach Vereinbarung im Benutzerkonto muss der Benutzer bei lokaler Anmeldung das zugeteilte Kennwort in regelmäßigen Abständen ändern.

- ▶ In **ASpect PQ** den Menüpunkt **System | Kennwort ändern** wählen.
Das Fenster **Kennwort ändern** erscheint.
- ▶ Das alte Kennwort und zweimal das neue Kennwort eingeben und mit Klick auf **OK** bestätigen.
 - ✓ Bei fehlerfreier Eingabe erscheint die Meldung **Kennwort wurde geändert**.

13.3 Audittrail anzeigen, drucken und exportieren

In der Audittrail-Datei werden Systemereignisse und zusätzlich alle Warn- und Fehlermeldungen von ASpect PQ und der Benutzerverwaltung aufgezeichnet. Für das Anzeigen des Audittrails müssen die Rechte im Benutzerkonto erteilt sein.

Den Audittrail öffnen Sie in ASpect PQ über den Menüpunkt **System | Audit-Trail** oder in der Benutzerverwaltung mit Klick auf **Audittrail**.

Folgende Funktionen stehen für den Audittrail zur Verfügung:

- Ansicht
- Filter
- Aktualisierung
- Drucken
- Export als CSV-Datei (nur wenn der Audittrail aus dem Fenster Benutzerverwaltung aufgerufen wurde)

Folgende Parameter werden im Audittrail dokumentiert:

Tabellenspalte	Beschreibung
Typ	Anzeige des Ereignistyps Im Audittrail werden folgende Ereignistypen vermerkt und durch Symbole gekennzeichnet: Info, Warnung, Fehler, Login und Logout
Datum/Zeit	Datum und Zeit des Ereignisses (PC-Uhr) Mit den [+] und [-] Schaltflächen im Tabellenkopf beider Spalten können die Einträge nach auf- und absteigenden Zeiten oder Datum sortiert werden.
Zeitzone	Zum Zeitpunkt des Ereignisses gültige Zeitzone (Windows Systemsteuerung)
Benutzer	Zum Zeitpunkt des Ereignisses angemeldeter Benutzer
Quelle	Unterscheidung nach Ereignissen in der Benutzerverwaltung oder in ASpect PQ
Beschreibung	Ausführliche Angaben zum markierten Ereignis

Ansicht auswählen

Wenn Sie den Audittrail im Fenster **Benutzerverwaltung** geöffnet haben, sehen Sie sowohl die Ereignisse in ASpect PQ als auch in der Benutzerverwaltung. In der Liste Ansicht können Sie die Anzeige auf Ereignisse in ASpect PQ oder administrative Ereignisse einschränken.

Wenn Sie den Audittrail in ASpect PQ mit dem Menüpunkt **System | Audittrail** geöffnet haben, werden Ihnen nur Ereignisse in ASpect PQ angezeigt.

Audittrail filtern

Mit Klick auf **Filtern** können Sie nach angemeldeten Benutzern, Eintragstypen oder Zeiträumen suchen. Außerdem können Sie die Suche auf Aktionen betreffend Methoden, Sequenzen, Ergebnisse oder Worksheets eingrenzen. Mit Klick auf **Filter deaktivieren** heben Sie die Einschränkungen des gesetzten Filters wieder auf.

Audittrail aktualisieren	Mit Klick auf Aktualisieren aktualisieren Sie die Eintragsliste des Audittrails. Dies kann notwendig sein, wenn bei bereits geöffneter Audittrail-Anzeige weitere Einträge hinzugefügt werden.
Audittrail drucken	Sie können den Audittrail drucken. Wenn Sie die Einträge gefiltert haben, werden nur die gefilterten Einträge gedruckt. ▶ Starten Sie den Ausdruck der aktuellen Audittrail-Ansicht mit Klick auf Drucken. Es öffnet sich das Druckfenster. ▶ Wählen Sie in der Liste Ausgabe auf das Ausgabeformat. ▶ Starten Sie den Ausdruck mit Klick auf Starten. ✓ Der Audittrail wird im gewählten Ausgabeformat ausgegeben.
Audittrail exportieren	Sie können die Audittrail-Einträge in eine CSV-Datei exportieren. Die Exportfunktion ist nur verfügbar, wenn der Audittrail in der Benutzerverwaltung geöffnet wurde. Bei aktivierten Filter werden nur die gefilterten Einträge exportiert. ▶ Öffnen Sie mit Klick auf Exportieren das Fenster Speichern unter. ▶ Geben Sie einen Pfad und den Namen ein und klicken Sie auf OK bestätigen. ✓ Die Audittrail-Datei wird exportiert.

13.4 Elektronische Signaturen

In ASpect PQ können Ergebnisdaten elektronisch signiert werden. Die Signatur schließt die Arbeit an einer Datei ab, spätere Dateiänderungen führen zu einem ungültigen Signaturstatus. Signaturbedeutungen und ihre Zugehörigkeit zu einer Berechtigungsebene werden in den allgemeinen Einstellungen der Benutzerverwaltung angelegt. Die Einstellung, dass ein Nutzer ein Dokument signieren kann, wird im Benutzerkonto vorgenommen. Ein Benutzer kann also ein Dokument signieren, wenn diese Funktion in seinem Benutzerkonto aktiviert wurde und wenn für seine Berechtigungsebene Signaturen vorgesehen sind.

Durch den Signaturvorgang werden die Dateien verschlüsselt, mit einem Signaturstatus und den Daten des signierenden Benutzers versehen. Zusätzlich wird eine verschlüsselte Signaturdatei mit gleicher Bezeichnung wie die Ergebnisdatei, jedoch mit der Dateierweiterung ".sig" angelegt. Diese Datei enthält die Prüfsummen der Ergebnisdatei einschließlich (wenn vorhanden) der Spektrendatei.

Eine Datei kann von mehreren Benutzern signiert werden.

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Allgemeine Einstellungen der Benutzerverwaltung konfigurieren [▶ 155]
- 📖 Benutzerebenen konfigurieren [▶ 153]

13.4.1 Messergebnisse signieren

Messergebnisdateien können im Anschluss an die Messung oder nach späterem Laden der Datei durch berechtigte Benutzer im Fenster **Signieren** mit einer elektronischen Signatur versehen werden.

Optionen im Fenster Signieren

Option	Beschreibung
Benutzername	Anmeldename des aktuellen Benutzers Der Benutzername kann geändert werden. Dies ermöglicht das Signieren durch weitere Benutzer.
Kennwort	Kennwort des Benutzers
Bedeutung	Signaturbedeutung Die Liste der Signaturbedeutungen wird durch den Administrator der Benutzerverwaltung festgelegt.
Kommentar	Optionale Bemerkungen (max. 256 Zeichen)
Signieren	Dokument mit den oben getätigten Einstellungen signieren

Ergebnisse signieren

- ▶ Messergebnisse zum Signieren im Hauptfenster der Software anzeigen.
- ▶ Den Menüpunkt **System | Ergebnisse signieren** wählen.
- ▶ Benutzernamen und Kennwort eingeben.
- ▶ Signaturbedeutung wählen.
- ▶ Auf **Signieren** klicken.
 - ✓ Es erfolgt eine Rückfrage, ob die Signatur erteilt oder der Vorgang abgebrochen werden soll. Die erfolgreiche Erteilung der Signatur wird bestätigt.

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Neues Benutzerkonto anlegen [▶ 157]
- 📖 Allgemeine Einstellungen der Benutzerverwaltung konfigurieren [▶ 155]

13.4.2 Signatur anzeigen

Bei der Vorschau oder dem Ausdruck signierter Ergebnisdaten wird am Ende des Protokolls ein Abschnitt **Signaturen** angehängt. Dieser enthält alle elektronischen Signaturen der entsprechenden Datei:

Option	Beschreibung
Erteilt von	Vollständiger und Anmeldename des Benutzers, der die Datei signiert hat
Signiert am	Datum/Zeit der Signaturerteilung
Status	Der Signaturstatus kann eine der folgenden Bedeutungen annehmen: Gültig Signatur und Ergebnisdaten sind vollständig und korrekt. Die berechneten Prüfsummen der Dateien zeigen keine Differenzen zu den in der Signaturdatei gespeicherten Prüfsummen zum Zeitpunkt der Signatur. Ungültig (Fehlende oder ungültige Signaturdatei) Die zum Datensatz gehörende Signaturdatei wurde nicht gefunden oder ist fehlerhaft. Ungültig (TPS-Daten) Die Ergebnisdatei wurde nach dem Signieren geändert. Der Vergleich zwischen den neu berechneten und den gespeicherten Prüfsummen zeigt Differenzen. Ungültig (SPK-Daten) Die Datei mit den Spektrenrohdaten wurde nach dem Signieren geändert. Der Vergleich zwischen den neu berechneten und den gespeicherten Prüfsummen zeigt Differenzen.

Option	Beschreibung
Bedeutung	Signaturbedeutung
Kommentar	Optionaler Kommentar in der Signatur

13.5 AJ File Protection

Die optionale Software AJ File Protection schützt Dateien gegen beabsichtigte und unbeabsichtigte Datenmanipulation, z. B. Löschen oder Verändern von Daten. Dabei erlaubt ein Filtertreiber Verzeichniszugriffe durch hierfür autorisierte Anwendungen, Zugriffe durch andere Anwendungen werden blockiert. Die Funktion von Virenscannern sowie professioneller Replikations-, Synchronisations- oder Datensicherungssoftware wird bei Einhaltung der Microsoft-Standards nicht beeinträchtigt.

AJ File Protection muss durch den Systemadministrator installiert und konfiguriert werden. Die Installation erfordert Administratorrechte.

Eine detaillierte Beschreibung der Installation und der Konfiguration der Software finden Sie auf dem Installations-Datenträger.

In Verbindung mit den separaten Rechten zum automatischen Speichern und Exportieren gewährleistet die Software AJ File Protection eine lückenlose Datensicherheit der Methodenerstellung, der Datenaufnahme und Auswertung.

14 Anhang

14.1 Übersicht über Markierungen in der Werteanzeige

Bemerkung	Bedeutung	Werte	Ausgabe
> Kal	Probenmittelwert ist größer als der Arbeitsbereich der Kalibrierkurve	Mittelwerte	Ablauf- und Ergebnisfenster
< Kal	Probenmittelwert ist kleiner als der Arbeitsbereich der Kalibrierkurve	Mittelwerte	Ablauf- und Ergebnisfenster
< NWG	Probenwert ist kleiner als die Nachweisgrenze	Mittelwerte	Ablauf- und Ergebnisfenster
< BG	Probenwert ist kleiner als die Bestimmungsgrenze und größer als die Nachweisgrenze	Mittelwerte	Ablauf- und Ergebnisfenster
RSD!	Probenmittelwert oder Standardmittelwert liegt außerhalb des Bereichs der vorgegebenen relativen Standardabweichung	Mittelwerte	Ablauf- und Ergebnisfenster
RR!	Probenmittelwert oder Standardmittelwert liegt außerhalb des Bereichs der vorgegebenen relativen Spannweite	Mittelwerte	Ablauf- und Ergebnisfenster
Faktor!	Grenzüberschreitung des Rekalibrierfaktors für die Kalibrierkurve	Kalibrierkurve	Ablauf- und Ergebnisfenster
R_2 (adj.) bzw. R	Bestimmtheitsmaß der Regression R_2 (adj.) oder R (je nach Auswahl im Fenster Optionen Analysenablauf) der Kalibrierkurve unterschreitet den vorgegebenen Wert	Kalibrierkurve	Ablauf- und Ergebnisfenster Fenster Kalibrierung
#MAN.	Probeneinzelwert oder Standardeinzelwert wurde manuell aus der Berechnung der Probenmittelwerte ausgeschlossen	Probeneinzelwerte	Fenster Probeneinzelwerte
#KOR.	Probeneinzelwert oder Standardeinzelwert wurde automatisch durch Grubbs-Ausreißertest aus der Berechnung der Probenmittelwerte ausgeschlossen	Probeneinzelwerte	Fenster Probeneinzelwerte