

MagIC Net 4.2



Bedienlehtgang
8.0102.8018DE / v1 / 2023-06-30



Metrohm AG
CH-9100 Herisau
Schweiz
+41 71 353 85 85
info@metrohm.com
www.metrohm.com

MagIC Net 4.2

Bedienlehrgang

Diese Dokumentation ist urheberrechtlich geschützt. Alle Rechte vorbehalten.

Diese Dokumentation wurde mit grösster Sorgfalt erstellt. Dennoch sind Fehler nicht vollständig auszuschliessen. Bitte richten Sie diesbezügliche Hinweise an die obenstehende Adresse.

Haftungsausschluss

Von der Gewährleistung ausdrücklich ausgeschlossen sind Mängel, die auf Umstände zurückgehen, die nicht von Metrohm zu verantworten sind, wie unsachgemässe Lagerung, unsachgemässer Gebrauch etc. Eigenmächtige Veränderungen am Produkt (z. B. Umbauten oder Anbauten) schliessen jegliche Haftung des Herstellers für daraus resultierende Schäden und deren Folgen aus. Anleitungen und Hinweise in der Produktdokumentation der Metrohm sind strikt zu befolgen. Andernfalls ist die Haftung von Metrohm ausgeschlossen.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Aufbau des Bedienlehrgangs	1
1.2	Programmbeschreibung	1
1.3	Darstellungskonventionen	2
2	Konfiguration	3
2.1	Software starten	3
2.2	Geräte konfigurieren	4
2.3	Säule konfigurieren	7
2.4	Eluent definieren	12
2.5	Lösungen anlegen	13
2.6	Zubehör anlegen	14
2.7	Rotor anlegen	16
3	Methode erstellen	18
3.1	Methode für manuelle Injektion	18
3.1.1	Neue Methode erstellen	18
3.1.2	Geräte und Startparameter definieren	20
3.1.3	Zeitprogramm	26
3.1.4	Auswertung	28
3.1.5	Methode speichern	34
3.2	Methode mit Sample Processor	35
3.2.1	Methode kopieren und anpassen	35
3.2.2	Geräte und Startparameter definieren	36
3.2.3	Zeitprogramm	38
3.2.4	Auswertung	42
3.2.5	Methode speichern	42
4	Bestimmung durchführen	43
4.1	Equilibrierung	43
4.2	Retentionszeiten anpassen mittels Einzelbestimmung eines Standards	44
4.3	Standards und Probe manuell messen	46
4.4	Standards und Probe automatisch messen	48
5	Aktionen in der Datenbank	52
5.1	Bestimmungen sichten	52

5.2	Resultate anschauen	56
5.3	Bestimmungen nachbearbeiten	62
5.4	Reportvorlage erstellen	65
5.5	Report drucken	67

1 Einleitung

1.1 Aufbau des Bedienlehrgangs

Der vorliegende Bedienlehrgang beschreibt den ersten Umgang mit der Software **Magic Net**. Anhand der Aufnahme eines Chromatogramms werden Sie in die wichtigsten Bedienungselemente eingeführt. Die Einführung erfolgt anhand der Bestimmung der Konzentrationen der Anionen F^- , Cl^- , NO_2^- , Br^- , NO_3^- , PO_4^{3-} und SO_4^{2-} in Leitungswasser. In den Bestimmungen werden ein 940 Professional IC Vario und eine Metrosep A Supp 19 - 100/4.0 Säule mit integriertem Chip verwendet.

Der Lehrgang ist in 4 Teile gegliedert:

- Hardware konfigurieren, die vom System verwaltet und in der Methode verwendet wird
- Methode zur Durchführung einer Bestimmung erstellen
- Bestimmung durchführen
- Bestimmung begutachten, nachbearbeiten und Report ausgeben

Es wird gezeigt, wie die Bestimmung mit einem einfachen System mit manueller Injektion durchgeführt wird. Zusätzlich wird eine Bestimmung mit einem automatisierten System mit Sample Processor beschrieben.

1.2 Programmbeschreibung

Magic Net besteht aus folgenden Programmteilen:

Arbeitsplatz



- Öffnen/Schliessen von Arbeitsplätzen
- Eingabe von Probanden
- Start von Einzelbestimmungen und Probenserien
- Livedarstellung von Chromatogrammen und Systemparametern (Watch window)
- Reportanzeige

Datenbank



- Öffnen/Schliessen von Datenbanken
- Verwalten von Bestimmungen
- Nachbearbeiten von Bestimmungen
- Erstellen von Reports

2 Konfiguration

Die via USB-Anschluss mit dem Computer verbundenen und eingeschalteten Metrohm-Geräte werden beim Programmstart automatisch erkannt, ebenso die an MSB-Anschlüssen von USB-Geräten angeschlossenen Geräte (Dosinos, Rührer, Pumpen, Remote Box). Gewisse Geräte müssen manuell zur Gerätetabelle hinzugefügt werden. Dazu gehören Geräte, die via RS-232-Schnittstelle an den Computer angeschlossen sind, der Barcodescanner und das 771 IC Compact Interface.

Alle Hardwarebestandteile, die in einer Methode verwendet werden, müssen im Programmteil **Konfiguration** angelegt werden. Dazu können gehören:

- Geräte (940 Professional IC Vario, 858 Professional Sample Processor etc.)
- Säulen
- Eluenten
- Zubehör (Pumpschläuche, Pumpschlauchverbindungen etc.)
- Lösungen
- Common Variablen
- Rackdaten
- Amperometrische Zellen
- Rotoren

2.1 Software starten



HINWEIS

Geräte und intelligente Säulen werden automatisch erkannt. Alle Elemente können vom System überwacht werden.

MagIC Net starten

- 1 Das Symbol von **MagIC Net** auf dem Desktop anklicken.
- 2 Ggf. Anwendername und Passwort eingeben und **[OK]** anklicken.
- 3 Das Symbol **[Konfiguration]** anklicken.



Der Dialog des Programmteils **Konfiguration** wird geöffnet.

Hier können insgesamt 9 Unterfenster angezeigt werden:

Geräte	Anzeige der automatisch erkannten und manuell hinzugefügten Geräte.
Säulen	Anzeige der automatisch erkannten und manuell hinzugefügten Säulen.
Eluenten	Anzeige der manuell hinzugefügten Eluenten.
Zubehör	Anzeige des manuell hinzugefügten Zubehörs.
Lösungen	Anzeige der automatisch erkannten Lösungen in einer Dosiereinheit und der Lösungen, die manuell hinzugefügt wurden.
Rackdaten	Anzeige der automatisch erkannten und manuell importierten Metrohm-Probenracks.
Common Variablen	Anzeige aller Common Variablen.
Amperometrische Zellen	Anzeige der automatisch erkannten und manuell hinzugefügten Zellen des amperometrischen Detektors.
Rotoren	Anzeige der manuell hinzugefügten Rotoren inklusive Rotortyp und Seriennummer.

Die angezeigten Unterfenster können mit dem Symbol oder über den Menüpunkt **Ansicht ► Layout ändern...** bestimmt werden.

2.2 Geräte konfigurieren

Um den **940 Professional IC Vario** das erste Mal zu starten, gehen Sie wie folgt vor:

940 Professional IC Vario anschliessen

1 Gerät anschliessen

Das Gerät **940 Professional IC Vario ONE/SeS/PP (2.940.1500)**
(Beispiel) mit einem USB-Kabel am Computer anschliessen.

2 Gerät einschalten

Die Geräteparameter des **940 Professional IC Vario** werden automatisch erkannt.

3 Gerät in Tabelle speichern

Die erscheinende Meldung mit **[Ja]** bestätigen.

4 Eigenschaften prüfen

Die Angaben im Dialog **Eigenschaften** überprüfen und mit **[OK]** schliessen.

Der **940 Professional IC Vario** wird in die Geräteliste im Unterfenster **Geräte** eingetragen.

5 Gerätenamen ändern (optional)

Um ihrem Gerät einen anderen Namen zu geben, gehen Sie wie folgt vor:

- In der Gerätetabelle auf die Zeile mit dem Eintrag **940 Professional IC Vario** doppelklicken.
- Die Registerkarte **Allgemein** wählen.
- Im Feld **Gerätenamen** den neuen Namen eintragen.

Eigenschaften - 940.1500 Professional IC Vario ONE/SeS/PP - 940 Professional IC Vario 1

LF Detektor 1 | MCS | Degasser | Anschlüsse | GLP

Allgemein | Pumpe

Geräte name: 940 Professional IC Vario 1

Gerätetyp: 940.1500 Professional IC Vario ONE/SeS/PP

Programmversion: 5.940.0102 Aktualisieren

Geräte-Seriennummer: 99002

Inbetriebnahme: 2023-03-29 14:40:37 UTC+2

Lecksensor: angeschlossen

☒ aktiv

Bemerkungen

OK Abbrechen

- Den Dialog mit **[OK]** schliessen.

Falls Sie ihre Bestimmungen mit einem Sample Processor durchführen, müssen Sie das Gerät zunächst anschliessen.

858 Professional Sample Processor anschliessen

1 Gerät anschliessen

Das Gerät **858 Professional Sample Processor – Pump (2.858.0020)** (Beispiel) mit einem USB-Kabel am Computer anschliessen.

2 Gerät einschalten

Die Geräteparameter des **858 Professional Sample Processor** werden automatisch erkannt.

3 Gerät in Tabelle speichern

Die erscheinende Meldung mit **[Ja]** bestätigen.

4 Eigenschaften prüfen

Die Angaben im Dialog **Eigenschaften** überprüfen und mit **[OK]** schliessen.

Der **858 Professional Sample Processor** wird in die Geräteliste im Unterfenster **Geräte** eingetragen.

5 Rackparameter definieren

- In der Gerätetabelle auf die Zeile mit dem Eintrag **858 Professional Sample Processor** doppelklicken.
- Die Registerkarte **Rack** wählen.
Das aufgesetzte Rack wird automatisch angezeigt. Falls das aufgesetzte Rack nicht angezeigt wird, auf **[Rack initialisieren]** klicken.
- Die Schaltfläche **[Rackdaten]** anklicken.
- Die Registerkarte **Liftpositionen** wählen.
- Im Feld **Arbeitsposition** den Wert **125** eintragen.
- Die Registerkarte **Spezialbecher** wählen.
- **[Bearbeiten]** anklicken und den Dialog **Spezialbecher 1** öffnen.
- Im Feld **Rackposition** den Wert **149** wählen.
- Im Feld **Arbeitsposition Turm 1** den Wert **125** eintragen.
- Die weiteren Spezialbecher analog bearbeiten.

Rackdaten

Rackname: 6.2041.440
 Rackcode: 010100
 Anzahl Positionen: 151

Rackparameter | Liftpositionen | **Spezialbecher**

Spezialbecher	Rackposition	Arbeitsposition Turm 1	Arbeitsposition Turm 2	Becherradius	Bechersensor
1	0	0	0	aus	Turm
2	0			aus	Turm
3	0			aus	Turm
4	0			aus	Turm
5	0			aus	Turm
6	0			aus	Turm
7	0			aus	Turm
8	0			aus	Turm
9	0			aus	Turm
10	0			aus	Turm
11	0			aus	Turm

Spezialbecher 1

Rackposition: 149
 Arbeitsposition Turm 1: 125
 Arbeitsposition Turm 2: 0
 Becherradius Proben: aus
 Bechersensor: Turm

OK Abbrechen

Bearbeiten OK Abbrechen

- Alle Dialoge mit **[OK]** schliessen.

2.3 Säule konfigurieren

Säule mit Chip

Eine installierte Säule mit Säulenchip wird beim Anschluss des IC-Geräts automatisch erkannt und in die Säulentabelle im Unterfenster **Säulen** eingetragen. Die Parameter von Metrohm-Säulen mit integriertem Chip werden in den entsprechenden Registerkarten eingetragen.

1 Säule in Halter einsetzen

Die Säule wird von **MagIC Net** erkannt.

2 Säule in der Tabelle speichern

Die erscheinende Meldung mit **[Ja]** bestätigen.

Die Säule wird in die Säulentabelle im Unterfenster **Säulen** eingetragen.

3 Säuleneigenschaften definieren

Die Säuleneigenschaften definieren gemäss *Säuleneigenschaften*, Seite 8.

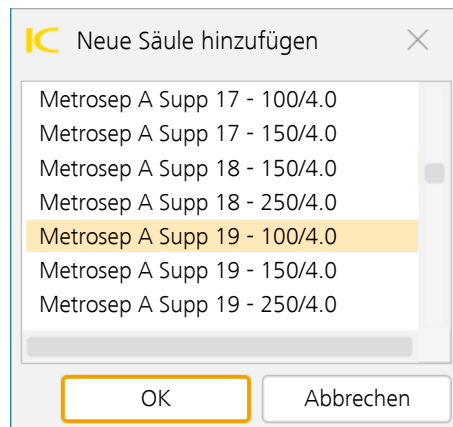
Anschliessend **[OK]** anklicken und den Dialog **Säule - Metrosep A Supp 19 - 100** schliessen.

Säule ohne Chip

Falls Sie eine Säule ohne Chip verwenden, muss sie zuerst konfiguriert werden. Verwenden Sie dazu das Menü **[Bearbeiten]** im Unterfenster **Säulen**. Bei bekannten Säulen werden einige Parameter automatisch eingetragen, bei unbekannten Säulen müssen diese Parameter dem Säulenmerkblatt entnommen und eingetragen werden.

1 Säule hinzufügen

Über das Menü **Bearbeiten ► Neu...** den Dialog **Neue Säule hinzufügen** öffnen.



2 Säule auswählen

Die Säule **Metrosep A Supp 19 - 100/4.0** in der Liste markieren und **[OK]** anklicken.

Der Dialog **Säule** wird geöffnet.

3 Säuleneigenschaften definieren

Die Säuleneigenschaften definieren gemäss *Säuleneigenschaften*,
Seite 8.

Anschliessend **[OK]** anklicken und den Dialog **Säule - Metrosep A Supp 19 - 100** schliessen.

Die Säule wird in die Säulentabelle im Unterfenster **Säulen** eingetragen.

Säuleneigenschaften

Säule	
Säulename	Metrosep A Supp 19 - 100

Säulentyp	Bei Säulen mit Chip sowie bei bekannten Säulen ohne Chip wird der Parameter automatisch eingetragen. Metrosep A Supp 19 - 100/4.0
Bestellnummer	Bei Säulen mit Chip sowie bei bekannten Säulen ohne Chip wird der Parameter automatisch eingetragen. 601034410
Seriennummer	Optional
Batch-Nummer	Optional
Inbetriebnahme	Bei Säulen mit Chip wird der Parameter automatisch eingetragen. Falls die Inbetriebnahme nicht dem aktuellen Datum entspricht, bei Säulen ohne Chip auf <input type="button" value="..."/> klicken und das Datum wählen. Mit [OK] bestätigen.
Kommentar	Optional

Eigenschaften	Bei Säulen mit Chip sowie bei bekannten Säulen ohne Chip werden die Parameter automatisch eingetragen. Bei unbekannten Säulen die Werte dem Säulenmerkblatt entnehmen und eintragen.
Maximalwerte für Betrieb ►	
Druck	Der Maximalwert und der höchste gemessene Wert werden angezeigt. Maximalwert 20.00 MPa
Fluss	Der Maximalwert und der höchste gemessene Wert werden angezeigt. Maximalwert 1.3 mL/min
Empfohlene Werte für Betrieb ►	
Standardfluss	0.7 mL/min
Standard-Anfahrzeit	2 min
Standard-Injektionsvolumen	20.0 µL
Standardtemperatur	25 °C

Standardeluent	8.0 mM Na ₂ CO ₃ / 0.25 mM NaHCO ₃
pH-Bereich	0.0 ... 14.0
Technische Daten ►	
Innendurchmesser	4.0 mm
Länge	100.0 mm
Partikelgrösse	4.6 µm

Vorsäule	<p>Bei Säulen mit Chip sowie bei bekannten Säulen ohne Chip werden die Parameter automatisch eingetragen.</p> <p>Bei unbekannten Säulen die Werte dem Säulenmerkblatt entnehmen und eintragen.</p>
Kontrollkästchen Vorsäule verwenden ►	<p>Aktiv</p> <p>Mit der Aktivierung wird definiert, dass die Vorsäule zusammen mit der Säule überwacht wird.</p>
Vorsäulentyp	Metrosep A Supp 19 Guard/4.0
Bestellnummer Vorsäule	601034500
Seriennummer Vorsäule	Optional
Batch-Nummer	Optional
Inbetriebnahme	Bei Säulen ohne Chip auf <input type="button" value="..."/> klicken und das Datum wählen. Mit [OK] bestätigen.
Technische Daten ►	
Innendurchmesser Vorsäule	4.0 mm
Länge Vorsäule	5.0 mm

Überwachung	<p>Diese Registerkarte ist nur bei automatisch erkannten Säulen mit Chip vorhanden.</p>
--------------------	---

Säule ►	
Bestimmungen ►	Der Grenzwert und der aktuelle Wert werden angezeigt. Grenzwert 1'000 Bestimmungen (Beispiel)
Überwachen	Aktiv
Betriebsstunden ►	Der Grenzwert und der aktuelle Wert werden angezeigt. Grenzwert optional
Überwachen	Aktiv
Vorsäule ►	
Bestimmungen ►	Der Grenzwert und der aktuelle Wert werden angezeigt. Grenzwert 500 Bestimmungen (Beispiel)
Überwachen	Aktiv
Betriebsstunden ►	Der Grenzwert und der aktuelle Wert werden angezeigt. Grenzwert optional
Überwachen	Aktiv
Meldung ►	
Meldung per E-Mail	Inaktiv
Akustisches Signal	Inaktiv
Aktion	Meldung anzeigen
GLP	
	Optional
Datum GLP-Test	Auf <input type="text"/> klicken und das Datum wählen. Mit [OK] bestätigen.
GLP-Gültigkeit überwachen ►	Aktiv
Intervall GLP-Test	100 Tage (Beispiel)

Nächster GLP-Test	Das Datum wird automatisch eingetragen.
Meldung ►	
Meldung per E-Mail	Inaktiv
Akustisches Signal	Inaktiv
Aktion	Meldung anzeigen

2.4 Eluent definieren


Eluenten werden im Unterfenster **Eluent** definiert.

- 1 Über das Menü **Bearbeiten ► Neu...** den Dialog **Eluent** öffnen.
- 2 Die Eluenteneigenschaften definieren gemäss *Eluenteneigenschaften*, Seite 12.

Anschliessend **[OK]** anklicken und den Dialog **Eluent - Std ASUPP19** schliessen.

Eluenteneigenschaften

Eluent	
Eluentnamen	Std-ASUPP19
Bestellnummer	Optional
Hersteller	Optional
Batch-Nummer	Optional
Zusammensetzung	8.0 mmol/L Natriumcarbonat, 0.25 mmol/L Natriumhydrogencarbonat
Kommentar	Optional

Überwachung	
Herstellungsdatum	Falls das Herstellungsdatum nicht dem aktuellen Datum entspricht, auf  klicken und das Datum wählen. Mit [OK] bestätigen.

Kontrollkästchen Eluent überwachen ►	Aktiv
Nutzungsdauer	30 Tage Die Nutzungsdauer ist abhängig vom Eluent.
Verfallsdatum	Das Datum wird automatisch eingetragen.
Meldung ►	
Meldung per E-Mail	Inaktiv
Akustisches Signal	Inaktiv
Aktion	Meldung anzeigen
<hr/>	
GLP	Optional

2.5 Lösungen anlegen

Lösungen, die an einen 800 Dosino mit 807 Dosing Unit angeschlossen sind, werden beim Anschluss automatisch erkannt. Die Parameter vom integrierten Chip werden in den entsprechenden Registerkarten im Unterfenster **Lösungen** eingetragen. Bei unbekannten Lösungen müssen diese Parameter manuell eingetragen werden.

Lösungen für den Suppressor werden im Unterfenster **Lösungen** definiert.

- 1 Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** den Dialog **Lösung** öffnen.
- 2 Die Lösungseigenschaften definieren gemäss *Lösungseigenschaften, Seite 13*.

Anschließend **[OK]** anklicken und den Dialog **Lösung - MSM-Regenerierlösung H₂SO₄** schliessen.

Lösungseigenschaften

Lösung	
Lösungsnamen	MSM-Regenerierlösung H ₂ SO ₄

2 Zubehöreigenschaften definieren

Die Zubehöreigenschaften für den Pumpschlauch definieren gemäss *Zubehöreigenschaften, Seite 15*.

Anschliessend **[OK]** anklicken und den Dialog **Zubehör - Pumpschlauch H₂SO₄** schliessen.

Der Pumpschlauch wird in die Zubehörtabelle im Unterfenster **Zubehör** eingetragen.

Den Schritt wiederholen für die Pumpschlauchverbindung mit Sicherung und Filter (Bestellnummer 6.2744.180). Der Filter hat die Bestellnummer 6.2821.130.

Zubehöreigenschaften

Zubehör	
Zubehörname	Pumpschlauch H ₂ SO ₄
Bestellnummer	6.1826.420
Hersteller	Optional
Kommentar	Optional
Überwachung	
Inbetriebnahme	Falls die Inbetriebnahme nicht dem aktuellen Datum entspricht, auf <input type="button" value="..."/> klicken und das Datum wählen. Mit [OK] bestätigen.
Zubehör überwachen ►	Aktiv
Nutzungsdauer	30 Tage (Beispiel)
Verfallsdatum	Das Datum wird automatisch eingetragen.
Meldung ►	
Meldung per E-Mail	Inaktiv
Akustisches Signal	Inaktiv
Aktion	Meldung anzeigen

2.7 Rotor anlegen

Der Rotor wird im Unterfenster **Rotoren** angelegt.

Neuen Rotor anlegen

1 Rotor hinzufügen

Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** den Dialog **Neuen Rotor hinzufügen** öffnen.

2 Rotor auswählen

Den Rotor **MSM A** auswählen.

Der Dialog **Rotor** wird geöffnet.

3 Rotoreigenschaften definieren

Die Rotoreigenschaften definieren gemäss *Rotoreigenschaften, Seite 16*.

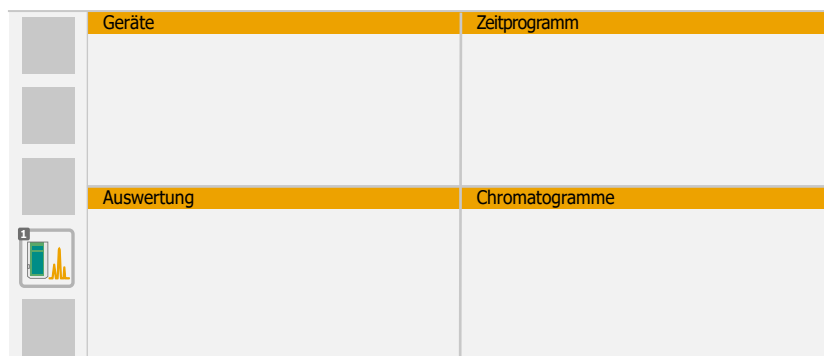
Anschliessend **[OK]** anklicken und den Dialog **Rotor - MSM Rotor** schliessen.

Der Rotor wird in die Rotortabelle im Unterfenster **Rotor** eingetragen.

Rotoreigenschaften

Rotor	
Rotorname	MSM A Rotor
Rotortyp	MSM A Der Rotortyp wird automatisch eingetragen.
Bestellnummer	6.2832.000 Die Bestellnummer wird bei bekannten Rotoren automatisch eingetragen.
Seriennummer	Optional, empfohlen für bessere Nachverfolgbarkeit und das Lösen von möglichen Fehlerfällen.
Kommentar	Optional, empfohlen für bessere Nachverfolgbarkeit und das Lösen von möglichen Fehlerfällen.

17

**Geräte**

Visualisierung der der Methode zugeordneten Geräte und der Analyse.

Zeitprogramm

Darstellung des Zeitprogramms.

Auswertung

Das Unterfenster besteht aus den Bereichen **Integration**, **Komponenten**, **Standards**, **Kalibrierung** und **Resultate**. Bei einer Methode mit UV/VIS-Detektor ist zusätzlich der Bereich **UV / VIS** vorhanden.

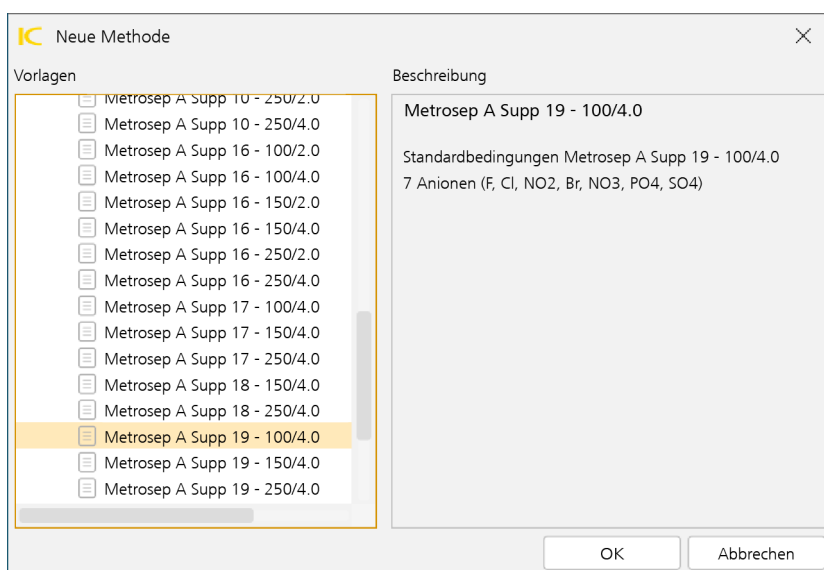
Chromatogramme

Anzeige der Chromatogramme der letzten mit dieser Methode aufgenommenen Bestimmung, der Chromatogramme der Standards, die zur Kalibrierung der Proben verwendet werden, und der Kalibrierkurven.

2 Über das Menü **Datei ► Neu...** den Dialog **Neue Methode** öffnen.

3 Unter **Vorlagen**, im linken Teil des Fensters, **Anionen ► Metrosep A Supp 19 - 100/4.0** markieren und mit **[OK]** bestätigen.

Die Methodenvorlage wird geöffnet.




Im Unterfenster **Geräte** wird das Symbol der Analysemethode **Anions** dargestellt. Das Unterfenster **Auswertung - Komponenten** zeigt die Komponententabelle mit den Ionen der Methodenvorlage und deren Retentionszeiten.


3.1.2 Geräte und Startparameter definieren

Geräte zusammenstellen

- 1 Im Unterfenster **Geräte** das Menü **Bearbeiten ► Hinzufügen ► Geräte** anklicken.
- 2 Im Dialog **Geräte hinzufügen** die Option **Aus Gerätetabelle** wählen.
- 3 Im Feld **Name** das Gerät **940 Professional IC Vario 1** auswählen und **[OK]** anklicken.



Gerät hinzufügen



☒ Aus Gerätetabelle

☐ Neues Gerät

Name

940 Professional IC Vario 1

▼

Gerätetyp

940 Professional IC Vario 1

858 Professional Sample Processor 1

Anschlüsse

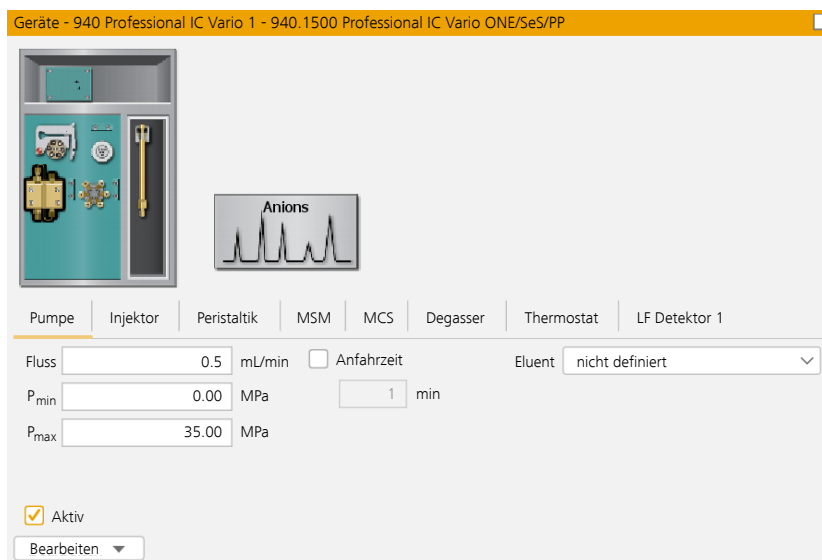
Detektor 1

Leitfähigkeitsdetektor

OK

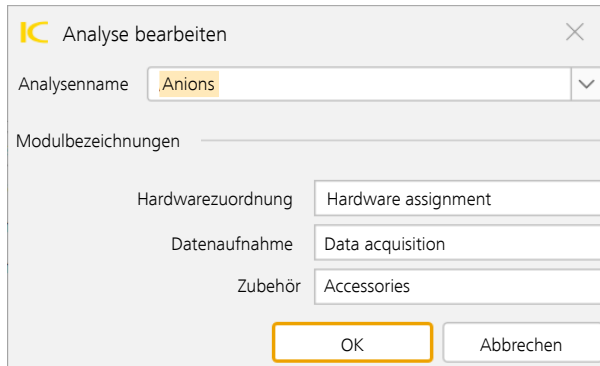
Abbrechen

Im oberen Teil des Unterfensters **Geräte** erscheint die Abbildung des **940 Professional IC Vario**.



Analysennamen ändern (optional)

- 1 Im oberen Teil des Unterfensters **Geräte** das Symbol der Analyse **Anions** anklicken.
- 2 Über das Menü **Bearbeiten** ► **Bearbeiten** den Dialog **Analyse ändern** öffnen.



- 3 Im Feld **Analysennamen** optional den neuen Namen **Leitungswasser** eintragen und mit **[OK]** bestätigen.

Im hier gezeigten Beispiel wird der Analysenname nicht geändert. Die Analyse heisst weiterhin **Anions**.

Parameter für Analyse definieren

- 1 Das Symbol **Anions** anklicken.

2 Die Parameter definieren gemäss *Parameter Analyse*, Seite 22.

Parameter Analyse

Hardwarezuordnung	
Datenquelle	<p>LF Detektor 1 (940 Professional IC Vario 1)</p> <p>Auf  klicken. 940 Professional IC Vario 1 ► LF Detektor 1 ► Leitfähigkeit wählen und [OK] anklicken.</p>
Kanal	<p>Leitfähigkiet</p> <p>Der Kanal wird automatisch eingetragen.</p>
Injektionsventil	<p>Injektor (940 Professional IC Vario 1)</p> <p>Auf  klicken. 940 Professional IC Vario 1 ► Injektor wählen und [OK] anklicken.</p>
Pumpe	<p>Pumpe (940 Professional IC Vario 1)</p> <p>Auf  klicken. 940 Professional IC Vario 1 ► Pumpe wählen und [OK] anklicken. Die Meldung Neue Hochdruckpumpe erscheint:</p> <p>Neue Hochdruckpumpe - Sie haben der Analyse 'Analysenname' eine neue Hochdruckpumpe zugeordnet. - Wollen Sie die Standardwerte der Säule 'Säulenname' als Startparameter der Hochdruckpumpe eintragen?</p> <p>Die Meldung mit [Ja] bestätigen.</p> <p>Mit dem Bestätigen der Meldung werden die Standardparameter der Säule (Fluss, Pmin, Pmax etc.) als Startparameter für die Hochdruckpumpe eingetragen.</p>
Säule	<p>Metrosep A Supp 19 - 100</p> <p>Auf  klicken. Säulentabelle ► Metrosep A Supp 19 - 100 wählen und [OK] anklicken. Die Meldung Neue Säule erscheint:</p> <p>Neue Säule - Sie haben der Analyse 'Analysenname' eine neue Säule zugeordnet. - Wollen Sie die Standardwerte der Säule als Startparameter der Hochdruckpumpe 'Pumpenname' eintragen?</p> <p>Die Meldung mit [Ja] bestätigen.</p> <p>Mit dem Bestätigen der Meldung werden die Standardparameter der Säule (Fluss, Pmin, Pmax etc.) als Startparameter für die Hochdruckpumpe eingetragen.</p>
Maximalwerte der Säule überwachen ►	
Maximaler Fluss	Aktiv

Maximaler Druck	Aktiv
Datenaufnahme	
Aufnahmedauer	15 min
Zubehör	
Zubehörtabelle	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Pumpschlauch H_2SO_4 Auf [Hinzufügen] klicken. In der Auswahlliste den Pumpschlauch H_2SO_4 auswählen. Mit [OK] bestätigen. [OK] anklicken. ▪ Pumpschlauchverbindung Die Pumpschlauchverbindung auf die gleiche Art hinzufügen wie den Pumpschlauch.

Startarameter für IC-Gerät definieren

- 1 Die Abbildung des **940 Professional IC Vario 1** anklicken.

Die Registerkarten der Module des **940 Professional IC Vario 1** erscheinen.

Um die Startarameter der Module zu editieren, die entsprechende Registerkarte wählen oder in der Abbildung auf das entsprechende Symbol klicken.



HINWEIS

Damit ein Modul in einer Methode verwendet werden kann, muss das Kontrollkästchen **Aktiv** aktiviert sein (Standardeinstellung). Das Kontrollkästchen **Aktiv** für alle Module aktivieren.

Die Startarameter definieren gemäss *Startarameter IC-Gerät, Seite 23*.

Startarameter IC-Gerät

Pumpe	
Fluss	0.7 mL/min Der Standardwert der Säule wird automatisch eingelesen.
Pmin	0.00 MPa

	Der Standardwert der Säule wird automatisch eingelesen.
Pmax	20.00 MPa
	Der Standardwert der Säule wird automatisch eingelesen.
Anfahrzeit	aktiv, 2 min
	Der Standardwert der Säule wird automatisch eingelesen.
Eluent	Std-ASUPP19
Injektor	
Stellung	Aktuelle Stellung beibehalten
Peristaltik	
Status	Ein
Geschwindigkeit	3 (Beispiel) Es gibt 7 Geschwindigkeitsstufen mit 6 Umdrehungen/min pro Stufe.
Lösung 1	MSM-Regenerierlösung H ₂ SO ₄
Lösung 2	nicht definiert
MSM - Regeneration mit Peristaltikpumpe	
Beim Equilibrieren automatisch weiter-schalten	Aktiv
Intervall	10.0 min
Dosierer	nicht definiert Der Suppressor wird mit einer Peristaltikpumpe regeneriert. Die Parameter für die Dosino-Regeneration müssen nicht definiert werden. Für Dosino-Regeneration, siehe <i>MSM - Dosino-Regeneration, Seite 25</i> .
Anschluss	-----
Lösung 1	nicht definiert, inaktiv
Lösung 2	nicht definiert, inaktiv

Kontrollkästchen Dosierer	Inaktiv
Rotor	MSM A Rotor
MSM - Dosino-Regeneration	
Beim Equilibrieren automatisch weiter-schalten	Aktiv
Intervall	10.0 min
Dosierer	Suppressor Dosino (Voraussetzung: Der Dosino wurde in MagIC Net als Suppressor Dosino konfiguriert.) Metrohm empfiehlt, für die Dosino-Regeneration eine 2 mL Dosiereinheit zu verwenden (Druckstabilität).
Anschluss	940 Professional IC Vario 1 - MSB 'Nummer des verwendeten MSB-Anschluss'
Lösung 1	MSM-Regenerierlösung H ₂ SO ₄ , aktiv
Bearbeiten ►	
Dosieren ►	
Port	1
Volumen	0.9000 mL
Zeit	9 min
Dosierrate	Wird aus den Werten von Volumen und Zeit automatisch berechnet.
Füllen ►	
Port	2
Kommentar	Optional
Lösung 2	nicht definiert, inaktiv
Rotor	MSM A Rotor
MCS	
Status	Ein

Degasser	
Status	Ein
Thermostat	
Status	Ein
Temperatur	30.0 °C
Temperaturstabilität überwachen	Aktiv
LF Detektor 1	
Temperaturkoeffizient	2.3 %/°C
Warngrenze	9999 µS/cm

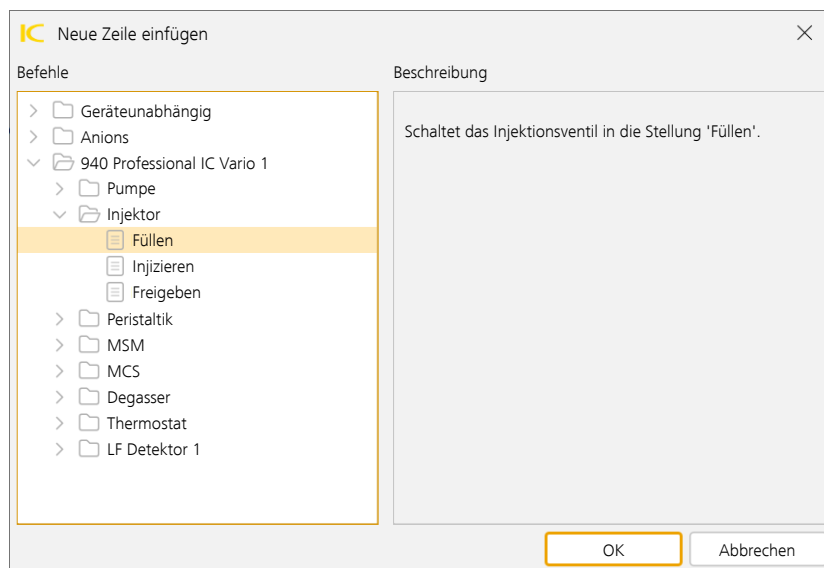
3.1.3 Zeitprogramm

Das Zeitprogramm ist Bestandteil jeder Methode. Es beschreibt Schritt für Schritt den Ablauf der Bearbeitung einer Probe. Die Erstellung des Zeitprogramms erfolgt im Unterfenster **Zeitprogramm** des Programnteils **Methode**.

Zeitprogramm definieren

1 Injektionsventil auf Füllen schalten


- Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** den Dialog **Neue Zeile einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **940 Professional IC Vario ► Injektor ► Füllen** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.
Der Dialog **940 Professional IC Vario - Injektor - Füllen** wird geöffnet.
- Die Zeitangabe **0** min übernehmen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

2 Programm unterbrechen

Das Programm wird angehalten, um das Injektionsventil manuell zu füllen.

- Die unterste Zeile des Zeitprogramms markieren. Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** den Dialog **Neue Zeile einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **Geräteunabhängig ► Warten** wählen.
- Mit **[OK]** bestätigen.
Der Dialog **Warten** wird geöffnet.
- Die Option **Programm anhalten und warten auf [Weiter]** markieren.
- Die Schaltfläche  anklicken und einen Text für die Meldung eingeben, zum Beispiel: Füllen Sie die Probenschleife mit der zu injizierenden Lösung und klicken Sie anschließend auf **[Weiter]**.
- Zweimal mit **[OK]** bestätigen.

3 Injektionsventil auf Injizieren schalten

- Die unterste Zeile des Zeitprogramms markieren. Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** den Dialog **Neue Zeile einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **940 Professional IC Vario ► Injektor ► Injizieren** wählen.

- Mit **[OK]** bestätigen.
Der Dialog **940 Professional IC Vario - Injektor - Injizieren** wird geöffnet.
- Die Zeitangabe **0** min übernehmen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

4 Datenaufnahme starten

- Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** den Dialog **Neue Zeile einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **Anions ► Start Datenaufnahme** wählen.
- Mit **[OK]** bestätigen.
Der Dialog **Anions - Start Datenaufnahme** wird geöffnet.
- Die Zeitangabe **0** min übernehmen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

Das vollständige Zeitprogramm für das manuelle Füllen des Injektionsventils sieht wie folgt aus:

Tabelle 1 Zeitprogramm – Manuelle Injektion

Zeit	Gerät	Modul	Befehl	Parameter	Kommentar	Nr.
0.0	940 Professional IC Vario 1	Injektor	Füllen			1
			Warten	Manuell weiter		2
0.0	940 Professional IC Vario 1	Injektor	Injizieren			3
0.0	Anions		Start Datenaufnahme			4

3.1.4 Auswertung

Im Unterfenster **Auswertung** werden die Parameter zur Auswertung der Chromatogramme definiert. Jede Analyse besitzt einen eigenen Satz an Auswerteparametern.

Integration

\int^x

Die Integrationsparameter sind in der Methodenvorlage definiert.

Analyse	Anions
Einstellungen	
Glättung	30
Empfindlichkeit	50

Peakerkennung	
Minimale Höhe	0.01 $\mu\text{S}/\text{cm}$
Minimale Fläche	0.001 ($\mu\text{S}/\text{cm}$) x min
Integrationsstart	1.0 min
Polarität	+
Negative Peaks	Inaktiv
Driftkompensation	Inaktiv
Blindprobe subtrahieren	Inaktiv
Overflow ignorieren	Inaktiv

Ereignisse	Integrationsereignisse sind zeitlich gesteuerte Integrationsparameter. Ihre Zeitan- gabe bezieht sich auf die Zeitachse des Chromatogramms. In diesem Beispiel werden keine Ereignisse definiert.
-------------------	---

Komponenten



Die Komponenten und die Parameter für die Identifikation sind in der Methodenvorlage definiert.

Komponententabelle	Die Komponententabelle (<i>siehe "Komponenten", Seite 29</i>) enthält die Komponenten einer Analyse und die Kriterien wie sie den Peaks eines Chromatogramms zugeordnet werden.
Retentionszeit aktualisieren	Keine Änderung notwendig.
Totzeit	Manuell Der Wert muss nicht geändert werden.

Tabelle 2 Komponententabelle

Name	Zeit [min]	Fenster [%]	Referenz
Fluoride	2.9	5.0	keine
Chloride	4.8	5.0	keine
Nitrite	6.1	5.0	keine
Bromide	8.0	5.0	keine
Nitrate	9.1	5.0	keine
Phosphate	10.2	5.0	keine
Sulfate	11.5	5.0	keine

Identifikation	
Referenzkomponenten	Höhe
Andere Komponenten	Zeit
Retentionszeit nachführen	aus

Standards



Im Bereich Standards werden die Konzentrationen der Komponenten in den Standardlösungen angegeben.

Konzentrations-einheit	ppm
------------------------	-----

Standards	<p>In der Standardtabelle sind alle Komponenten aufgelistet, die in der Methodenvorlage definiert sind. Standards definieren gemäss der Prozedur <i>Standards definieren</i>, Seite 30.</p>
------------------	---

Standards definieren

- 1 Auf der Registerkarte **Standards** über das Menü **Bearbeiten ► Neu** den Dialog **Neuer Standard** öffnen.

IC Neuer Standard ✕

Standard

Fluoride	<input type="text" value="0"/>	ppm
Chloride	<input type="text" value="0"/>	ppm
Nitrite	<input type="text" value="0"/>	ppm
Bromide	<input type="text" value="0"/>	ppm
Nitrate	<input type="text" value="0"/>	ppm
Phosphate	<input type="text" value="0"/>	ppm
Sulfate	<input type="text" value="0"/>	ppm


- 2 Im Feld **Fluorid** den Konzentrationswert **0.5** eintragen. In den Feldern **Chlorid** und **Nitrit** als Wert jeweils **1**, und in den Feldern **Bromid**, **Nitrat**, **Phosphat** und **Sulfat** jeweils den Wert **2** eingeben.
- 3  anklicken, um den nächsten Standard zu öffnen.
- 4 Die Schritte **3** bis **5** für die Eingabe der Konzentrationen von Standard 2 und Standard 3 wiederholen. Die Nummer des nächsten Standards ist im Feld **Standard** automatisch eingetragen. Die Konzentrationen der Komponenten in Standard 2 und Standard 3 sind in der folgenden Tabelle angegeben:

Tabelle mit den Standardkonzentrationen:

Tabelle 3 Standardkonzentrationen

	Name	Standard 1	Standard 2	Standard 3
1	Fluoride	0.5	1	2
2	Chloride	1	2.5	5
3	Nitrite	1	2.5	5
4	Bromide	2	5	10
5	Nitrate	2	5	10
6	Phosphate	2	5	10
7	Sulfate	2	5	10

Funktionstyp	Messgrösse = f(Konzentration)
Punkt im Ursprung zur Kalibrierkurve hinzufügen	Inaktiv
Blindwertkorrektur für Inline-Kalibrierung	Inaktiv

Überwachung	
Gültigkeit der Kalibrierung	Unbegrenzt
Meldung	Keine Meldung
Aktion	Meldung dokumentieren

Resultate

\pm
 \pm

Die Resultate der Bestimmungen werden in der Standarddatenbank **MagIC Net** abgelegt.

Datenbank	
Datenbankname	MagIC Net (Standard) Weitere Datenbanken können im Bereich Datenbank , über die Datenbankverwaltung erstellt werden.

Report	Ein Report kann ausgegeben werden, sobald die Auswertung beendet ist. Den Report definieren gemäss der Prozedur <i>Report definieren (optional)</i> , Seite 34.
Pharmakopöe	USP Neben USP stehen weitere Pharmakopöen zur Auswahl (USP aktuell, EP aktuell, EP, JP aktuell, JP. Weitere Informationen finden Sie in der Hilfe zu MagIC Net 4.2.
Dezimalstellen der Resultate	Keine Änderung notwendig.

Report definieren (optional)

Falls ein Report definiert wird (optional), wird dieser direkt nach Abschluss der Bestimmung gedruckt.

1.
 - Die Registerkarte **Report** auswählen.
 - Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** den Dialog **Report definieren** öffnen.
 - Im Auswahlfeld **Reportvorlage** die Vorlage **Result and Calibration** markieren.
 - Im Bereich **Reportausgabe** das Kontrollkästchen **Drucker** aktivieren.
 - In der Auswahlliste **Drucker** einen Drucker auswählen.

Report definieren

Reportvorlage: Reportvorlage: Result and Calibration

Reportausgabe: ☒ Drucker: Standarddrucker

☐ PDF-Datei

☐ E-Mail senden E-Mail...

Dateiname: ☒ Fixer Dateiname ☐ Bestimmungs-ID ☐ Probenidentifikation: Ident ☐ Batchname

Zielverzeichnis:

0 von 0 OK Schliessen

- Mit **[OK]** bestätigen.

Reporte können auch später aus der Datenbank gedruckt werden mit
Datei ► Drucken ► Report....

Sie haben auch die Möglichkeit, eine eigene Reportvorlage zu erstellen .

3.1.5 Methode speichern

Methode speichern

Nachdem Sie alle relevanten Parameter für die Methode eingegeben haben, speichern Sie die Methode wie folgt ab:

- Über das Menü **Datei ► Speichern unter...** den Dialog **Methode speichern** öffnen.

- 2 Im Feld **Methodenname** als Name für die Methode **Leitungswasser** eingeben.
- 3 **[Speichern]** anklicken.

3.2 Methode mit Sample Processor

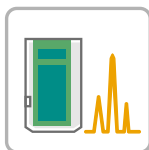
Die Erstellung einer Methode für eine Bestimmung mit einem Sample Processor unterscheidet sich von der Methode für eine manuelle Injektion nur in den Punkten:

- Geräte und Startparameter definieren
- Zeitprogramm

3.2.1 Methode kopieren und anpassen

Methode Leitungswasser kopieren

- 1 Das Symbol des Programmteils **Methode** anklicken.



- 2 In der Symbolleiste das Symbol **Methodenverwaltung öffnen**  anklicken.

Der Dialog **Methoden verwalten** wird geöffnet.

- 3 Die Methode **Leitungswasser** kopieren mit **Bearbeiten ► Kopieren**.

Die Methode **Kopie von Leitungswasser** wird erstellt.

- 4 Mit **Bearbeiten ► Umbenennen...** den Dialog **Methode umbenennen** öffnen.

Im Feld **Methodennamen** als Name für die Methode **Leitungswasser (auto)** eingeben. Mit **[OK]** bestätigen.

Den Dialog **Methoden verwalten** mit **[Schliessen]** schliessen.

- 5 In der Symbolleiste das Symbol **Bestehende Methode öffnen**  anklicken.

Der Dialog **Methoden öffnen** wird geöffnet.

- 6** Die Methode **Leitungswasser (auto)** markieren.

Die Methode öffnen mit **[Öffnen]**.


Die Methode **Leitungswasser (auto)** wird geöffnet. Die Methode kann nun bearbeitet werden.

3.2.2 Geräte und Startparameter definieren

Sample Processor hinzufügen

Das Gerät **940 Professional IC Vario** ist bereits in der Methode vorhanden.

- 1 Im Unterfenster **Geräte** das Menü **Bearbeiten ► Hinzufügen ► Geräte** anklicken.
- 2 Im Dialog **Geräte hinzufügen** die Option **Aus Gerätetabelle** wählen.
- 3 Im Feld **Name** das Gerät **858 Professional Sample Processor** auswählen und **[OK]** anklicken.

Gerät hinzufügen

☒ Aus Gerätetabelle

☐ Neues Gerät

Name

858 Professional Sample Processor 1

Gerätetyp

940 Professional IC Vario 1

858 Professional Sample Processor 1

Anschlüsse

Detektor 1

Leitfähigkeitsdetektor

OK

Abbrechen

Im oberen Teil des Unterfensters **Geräte** erscheint die Abbildung des **858 Professional Sample Processor**.

1 Die Abbildung des **858 Professional Sample Processor** anklicken.

Um die Parameter der Module zu editieren, die entsprechende Registerkarte wählen oder in der Abbildung auf das entsprechende Symbol klicken.

Parameter für Sample Processor

■■■■■■■ 37

Geschwindigkeit	8
Pumpe 1 und 2 ►	
Status	Aus
Lösung	nicht definiert

3.2.3 Zeitprogramm

Das Zeitprogramm ist Bestandteil jeder Methode. Es beschreibt Schritt für Schritt den Ablauf der Bearbeitung einer Probe. Die Erstellung des Zeitprogramms erfolgt im Unterfenster **Zeitprogramm** des Programmteils **Methode**. Das Zeitprogramm für einen automatisierten Ablauf von Bestimmungen enthält im Gegensatz zu einer manuellen Methode zusätzliche Befehle für den Sample Processor.

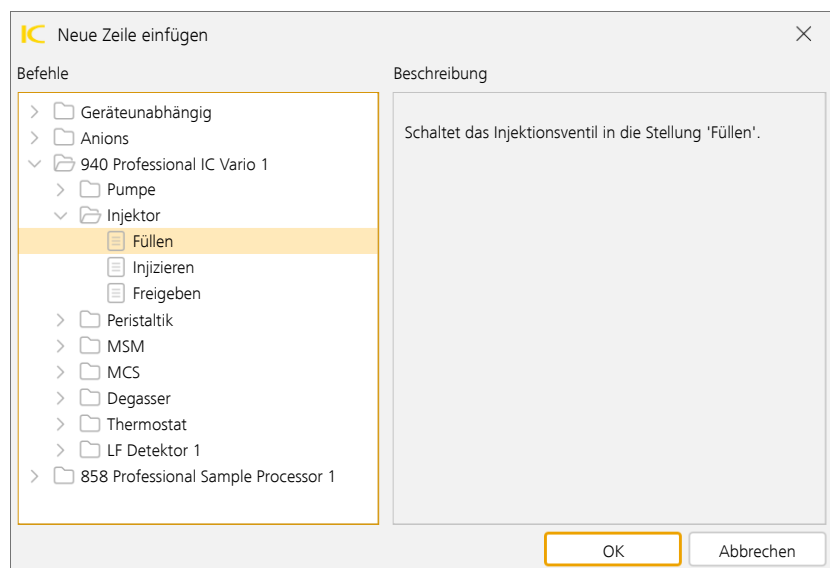
Zeitprogramm definieren

1 Bestehende Zeitprogrammbefehle löschen

- Alle Zeitprogrammbefehle markieren.
- Alle Zeitprogrammbefehle löschen über das Menü **Bearbeiten ► Löschen**.

2 Injektionsventil auf Füllen schalten

- Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** den Dialog **Neue Zeile einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **940 Professional IC Vario ► Injektor ► Füllen** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.
Der Dialog **940 Professional IC Vario - Injektor - Füllen** wird geöffnet.
- Die Zeitangabe **0** min übernehmen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

3 Probenposition anfahren

- Die unterste Zeile des Zeitprogramms markieren. Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** den Dialog **Neue Zeile einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor ► Turm ► Drehen (Rack)** wählen.
- Mit **[OK]** bestätigen.
Der Dialog **858 Professional Sample Processor - Turm - Drehen (Rack)** wird geöffnet.
- Die Feldwerte übernehmen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

4 Ansaugnadel in Probe eintauchen

- Die unterste Zeile des Zeitprogramms markieren. Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** den Dialog **Neue Zeile einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor ► Turm ► Lift** wählen.
- Mit **[OK]** bestätigen.
Der Dialog **858 Professional Sample Processor - Turm - Lift** wird geöffnet.
- In der Auswahlliste **Liftposition** den Eintrag **Arbeitsposition** wählen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

5 Injektionsventil mit Probe füllen

- Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** den Dialog **Neue Zeile einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor ► Peristaltik ► Ein/Aus** wählen.
- Mit **[OK]** bestätigen.
Der Dialog **858 Professional Sample Processor - Peristaltik - Ein/Aus** wird geöffnet.
- Im Feld **Zeit** die Zeitangabe **0** min übernehmen.
- Die anderen Feldwerte ebenfalls übernehmen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

6 Peristaltikpumpe des Sample Processor ausschalten

- Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** den Dialog **Neue Zeile einfügen** öffnen.

- Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor ► Peristaltik ► Ein/Aus** wählen.
- Mit **[OK]** bestätigen.
Der Dialog **858 Professional Sample Processor - Peristaltik - Ein/Aus** wird geöffnet.
- Im Feld **Zeit** die Zeitangabe **2.5** eintragen.
- Im Bereich **Geschwindigkeit** die Option **Aus** wählen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

7 Injektionsventil auf Injizieren schalten

- Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** den Dialog **Neue Zeile einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **940 Professional IC Vario ► Injektor ► Injizieren** wählen.
- Mit **[OK]** bestätigen.
Der Dialog **940 Professional IC Vario - Injektor - Injizieren** wird geöffnet.
- Im Feld **Zeit** den Wert **2.5** eintragen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

8 Datenaufnahme starten

- Die unterste Zeile des Zeitprogramms markieren. Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** den Dialog **Neue Zeile einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **Anions ► Start Datenaufnahme** wählen.
- Mit **[OK]** bestätigen.
Der Dialog **Anions - Start Datenaufnahme** wird geöffnet.
- Im Feld **Zeit** den Wert **2.5** eintragen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

9 Spezialbecherposition anfahren

Die sogenannten Spezialbecher besitzen ein grosses Volumen (z. B. 250 mL) und sie enthalten meistens die Spüllösung. Bevorzugt werden diese Becher auf hohe Rackpositionen gesetzt, um mit Probenserien bei Position 1 beginnen zu können. Für Spezialbecher müssen die Liftpositionen separat zugewiesen werden.

- Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** den Dialog **Neue Zeile einfügen** öffnen.
 - Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor ► Turm ► Drehen (Rack)** wählen.
 - Mit **[OK]** bestätigen.
- Der Dialog **858 Professional Sample Processor - Turm - Drehen (Rack)** wird geöffnet.

- ## 10 Ansaugnadel in Spezialbecher eintauchen

- ## 11 Spülen einschalten

- ## 12 Spülen ausschalten

- Das vollständige Zeitprogramm sieht wie folgt aus:

Tabelle 5 Zeitprogramm – Injektion mit Sample Processor


Zeit	Gerät	Modul	Befehl	Parameter	Kommentar	Nr.
0.0	940 Professional IC Vario 1	Injektor	Füllen			1
	858 Professional Sample Processor	Turm	Drehen (Rack)	Probenposition		2
	858 Professional Sample Processor	Turm	Lift	Arbeitsposition		3
0.0	858 Professional Sample Processor	Peristaltik	Ein/Aus	Ein, Geschwindigkeit = 3		4
2.5	858 Professional Sample Processor	Peristaltik	Ein/Aus	Aus		5
2.5	940 Professional IC Vario 1	Injektor	Injizieren			6
2.5	Anions		Start Datenaufnahme			7
	858 Professional Sample Processor	Turm	Drehen (Rack)	Spezialbecher 1		8
	858 Professional Sample Processor	Turm	Lift	Arbeitsposition		9
						10
0.0	940 Professional IC Vario 1	Peristaltik	Ein/Aus	Ein, Geschwindigkeit = 1		11
1.5	940 Professional IC Vario 1	Peristaltik	Ein/Aus	Aus		12

3.2.4 Auswertung

(siehe Kapitel 3.1.4, Seite 28)

3.2.5 Methode speichern

Methode speichern

Nachdem Sie alle relevanten Parameter für die Methode eingegeben haben, die Methode speichern. Dazu in der Symbolleiste das Symbol **Aktuelle Methode speichern**  anklicken.

4 Bestimmung durchführen

In diesem Kapitel lernen Sie:

- Retentionszeiten der Analyten zu überprüfen
- Probandaten einzugeben
- Standards und Proben zu messen.

Diese Schritte führen Sie im Programmteil **Arbeitsplatz** durch. Es stehen folgende Unterfenster zur Verfügung:

Ablauf	Steuerung von Abläufen und Verwaltung der Probandaten
Liveanzeige 1	Darstellung des Chromatogramms während der Analyse
Report	Anzeige der Reporte von Analysen
Watch window	Informationen über die Methode und die zugehörigen Geräte
Zeitprogramm	Visualisierung des Ablaufs der Methode
Liveanzeige 2	Darstellung eines parallel ablaufenden 2. Chromatogramms

Die angezeigten Unterfenster können mit dem Symbol  oder über den Menüpunkt **Ansicht ► Layout ändern...** bestimmt werden.


4.1 Equilibrierung

Equilibrierung starten

Bevor die Analyse durchgeführt wird, muss das IC-Gerät etwa 30 Minuten equilibriert werden, bis die Basislinie stabil ist.

- 1 In den Programmteil **Arbeitsplatz** wechseln.



- 2 Im Unterfenster **Ablauf** die Registerkarte **Equilibrierung** wählen.
- 3 Im Feld **Methode** auf die Schaltfläche  klicken.
- 4 Im Dialog **Methode öffnen** die Methode **Leitungswasser** oder **Leitungswasser (auto)** markieren.

Falls bereits mehrere Methodengruppen bestehen, muss im Auswahl-
feld **Methodengruppe** zuerst die Gruppe ausgewählt werden, in
welche die Methode gespeichert wurde.

5 **[Start HW]** anklicken.

Mit **[Start HW]** wird das IC-Gerät mit den in der Methode definierten Parametern gestartet. Die Aufzeichnung der Basislinie beginnt. Sobald die Basislinie stabil ist, kann mit der Messung begonnen werden (nach ca. 30 min).

4.2 Retentionszeiten anpassen mittels Einzelbestimmung eines Standards

Um die in der Methode vorgegebenen Retentionszeiten der 7 Komponenten Fluorid, Chlorid, Nitrit, Bromid, Nitrat, Phosphat und Sulfat zu überprüfen und eventuell anzupassen, wird der mittlere Standard in einer Einzelmessung gemessen.

Einzelmessung eines Standards

- 1 In den Programmteil **Arbeitsplatz** wechseln.
- 2 Im Unterfenster **Ablauf** die Registerkarte **Einzelbestimmung** wählen.
- 3 Im Feld **Methode** die Methode **Leitungswasser** oder **Leitungswasser (auto)** wählen.
- 4 In der Auswahlliste **Probentyp** den **Standard 2** wählen.
- 5 Geben Sie in die Felder folgende Werte ein:
 - **Ident:** Standard 2
 - **Position:** 1
 - **Volumen:** 20 µL
 - **Verdünnung:** 1
 - **Probenmenge:** 1
 - **Batchname:** Batch 1
- 6 Die Schaltfläche **[Start]** anklicken.


Die Bestimmung wird gestartet und das Zeitprogramm abgearbeitet.

- 7 Falls eine Methode mit manueller Injektion benutzt wird:
 - Sobald die Meldung zum Füllen erscheint, den Injektor manuell füllen.
 - Meldung mit **[Weiter]** bestätigen.

Korrektur der Retentionszeiten

Vergleichen Sie die Retentionszeiten aus dem Chromatogramm mit denjenigen in der Methodenvorlage. Falls es Abweichungen gibt, tragen Sie die neuen Retentionszeiten aus dem Chromatogramm in die Komponententabelle der Methode ein. Dafür gibt es 2 Möglichkeiten:

- Die Retentionszeiten im Programmteil **Arbeitsplatz** unter **Live-Anzeige ► Analysenname ► Auswerteparameter ► Live-Änderungen - Auswertung** anpassen (siehe *MagIC Net Online-Hilfe - Live-anzeige - Auswerteparameter ändern*).
- Die Retentionszeiten im Programmteil **Methode** anpassen. Dieses Vorgehen ist in den folgenden Schritten beschrieben.

- 1 In den Programmteil **Methode** wechseln.
- 2 Im Unterfenster **Auswertung** die Schaltfläche **[Komponente]** anklicken und die Registerkarte **Komponententabelle** wählen.
- 3 Die Zeile mit der Komponente, deren Retentionszeit korrigiert werden soll, anklicken.
- 4 Im Unterfenster **Chromatogramme** die blaue Linie in den entsprechenden Peak ziehen.
- 5 Im Unterfenster **Auswertung** auf die Schaltfläche **[Retentionszeit aktualisieren]** klicken.
Die Retentionszeit aus dem Chromatogramm wird in die Komponententabelle übertragen.
- 6 Wiederholen Sie die Schritte 4 bis 6 für alle zu korrigierenden Komponenten.
- 7 Die Methode mit dem Menüpunkt **Datei ► Speichern...** oder dem Symbol  speichern.

4.3 Standards und Probe manuell messen

Standards

- 1 In den Programmteil **Arbeitsplatz** wechseln.
- 2 Im Unterfenster **Ablauf** die Registerkarte **Einzelbestimmung** wählen.
- 3 Im Feld **Methode** kontrollieren, ob die Methode **Leitungswasser** ausgewählt ist.
- 4 In der Auswahlliste **Probentyp** den **Standard 1** wählen.
- 5 Geben Sie in die Felder folgende Werte ein:
 - **Ident:** Standard 1
 - **Position:** 1
 - **Volumen:** 20 µL
 - **Verdünnung:** 1
 - **Probenmenge:** 1
 - **Batchname:** Batch 1

- 6** Die Schaltfläche **[Start]** anklicken.

Die Bestimmung wird gestartet und das Zeitprogramm abgearbeitet.

Rot markierte Zeilen zeigen den aktuellen Programmschritt an, grau markierte Zeilen die abgearbeiteten Programmschritte.

- 7 Falls eine Methode mit manueller Injektion benutzt wird:
 - Sobald die Meldung zum Füllen erscheint, den Injektor manuell füllen mit Hilfe einer Spritze.
 - Meldung mit **[Weiter]** bestätigen.

Die Datenaufnahme wird gestartet und die Bestimmung zu Ende geführt.

Die Schritte **4** bis **7** für die Messungen von Standard 2 und Standard 3 wiederholen. In der Auswahlliste **Probentyp Standard 2** bzw. **Standard 3** auswählen. Im Feld **Ident** den Namen **Standard 2** bzw. **Standard 3** eintragen.

Die Aufzeichnung des aktuellen Chromatogramms kann im Unterfenster **Liveanzeige** verfolgt werden.

Im Unterfenster **Watch window** sind Informationen über die Methode und die zugehörigen Geräte angegeben. Diese Anzeige kann individualisiert werden. Dazu mit der rechten Maustaste in das **Watch window** klicken. Den Menüpunkt **Eigenschaften Watch Window** wählen. Die Anzeige wie gewünscht anpassen und die Einstellungen mit **[OK]** bestätigen.

Probe

- 1 In der Auswahlliste **Probentyp** den Eintrag **Probe** wählen.
- 2 Geben Sie in die Felder folgende Werte ein:
 - **Ident:** Leitungswasser
 - **Position:** 1
 - **Volumen:** 20 µL
 - **Verdünnung:** 1
 - **Probenmenge:** 1
 - **Batchname:** Batch 1
- 3 Die Schaltfläche **[Start]** anklicken.
Die Bestimmung wird gestartet und das Zeitprogramm abgearbeitet.
- 4 Falls eine Methode mit manueller Injektion benutzt wird:
 - Sobald die Meldung zum Füllen erscheint, den Injektor manuell mit Leitungswasser füllen.
 - Meldung mit **[Weiter]** bestätigen.
- 5 Nach der Messung aller Proben und Standards das Gerät ausschalten. Dazu die Registerkarte **Equilibrierung** wählen und **[Stop HW]** anklicken.

4.4 Standards und Probe automatisch messen

Genau wie bei einer manuellen Messung wird das IC-Gerät zuerst equilibriert (*siehe "Equilibrierung starten", Seite 43*) und die Retentionszeiten werden angepasst (*siehe Kapitel 4.2, Seite 44*). Anschliessend wird die Probentabelle erstellt und die Standards und die Probe gemessen.

Probentabelle erstellen

- 1 In den Programmteil **Arbeitsplatz** wechseln.
- 2 Im Unterfenster **Ablauf** die Registerkarte **Bestimmungsserie** wählen.

Ablauf

☐ Equilibrierung
 ☐ Einzelbestimmung
 ☒ Bestimmungsserie


Status

Probanddaten
 Anmerkung

	Methode	Ident	Probentyp	Position	Injektionen	Status	Volumen
▶ *							

☒ Hardware stoppen wenn Probentabelle beendet ist

- 3 Über das Menü **Bearbeiten ► Zeile bearbeiten** den Dialog **Zeile bearbeiten - Arbeitsplatzprobentabelle** öffnen.
- 4 Die Methode **Leitungswasser (auto)** wählen.

Falls bereits mehrere Methodengruppen bestehen, zuerst auf die Schaltfläche  klicken. Im Auswahlfeld **Methodengruppe** die Gruppe wählen, zu der die Methode gehört.
- 5 **Werte für Standard 1 eingeben**

Geben Sie in die Felder folgende Werte ein:
 - **Ident:** Standard 1
 - **Probentyp:** Standard 1
 - **Position:** 1

- **Injektionen:** 1
- **Volumen:** 20 µL
- **Verdünnung:** 1
- **Probenmenge:** 1
- **Batchname:** Batch 1

Auf **[Übernehmen]** klicken.

Die Werte werden in die erste Zeile der Probentabelle geschrieben.

6 Werte für Standard 2 eingeben

- Im Feld **Zeile** auf die Schaltfläche  klicken.

Im Feld **Position** wird der nächst höhere Wert automatisch eingetragen. In den Feldern **Injektion**, **Volumen**, **Verdünnung**, **Probenmenge** und **Batchname** werden die Werte von Standard 1 ebenfalls automatisch übernommen.

- Im Feld **Ident** den Namen **Standard 2** eingeben.
- In der Auswahlliste **Probentyp** den **Standard 2** wählen.
- Auf **[Übernehmen]** klicken.

7 Werte für Standard 3 eingeben

Um Standard 3 einzugeben, gehen Sie analog Schritt **6** vor:

- Im Feld **Ident** den Namen **Standard 3** eintragen.
- In der Auswahlliste **Probentyp** den **Standard 3** wählen.
- Auf **[Übernehmen]** klicken.

8 Werte für Probe eingeben

Um die Probendaten einzugeben, gehen Sie analog Schritt **6** vor:

- Im Feld **Ident** den Namen **Leitungswasser** eintragen.
- In der Auswahlliste **Probentyp** den Eintrag **Probe** wählen.
- Auf **[Übernehmen]** klicken.
- Sind alle Daten für die Standards und die Probe eingegeben, die Schaltfläche **[Schliessen]** anklicken und zur Registerkarte **Bestimmungsserie** zurückkehren.

9 Hardware stoppen

- Das Kontrollkästchen **Hardware stoppen wenn Probentabelle beendet ist** aktivieren.



HINWEIS

Das Kontrollkästchen **Hardware stoppen wenn Proben-tabelle beendet ist** muss aktiviert werden, wenn die Geräte nach dem Beenden der Messungen automatisch abgeschaltet werden sollen (z. B. bei Messungen über Nacht).

10 Probentabelle speichern



- Über das Menü **Probentabelle ► Speichern unter...** den Dialog **Probentabelle speichern** öffnen.
- Im Feld **Name** den Namen **Probe Leitungswasser** eintragen.
- **[Speichern]** anklicken.

Die vollständige Tabelle mit Standards und Probe sieht wie folgt aus:

Tabelle 6 Probentabelle

Methode	Ident	Proben- typ	Posi- tion	Injek- tionen	Status	Volu- men	Verdün- nung	Proben- menge	Info 1	Batch- name
Leitungswas- ser (auto)	Standard 1	Standard 1	1	1	READY 0/1	20	1	1		Batch 1
Leitungswas- ser (auto)	Standard 2	Standard 2	2	1	READY 0/1	20	1	1		Batch 1
Leitungswas- ser (auto)	Standard 3	Standard 3	3	1	READY 0/1	20	1	1		Batch 1
Leitungswas- ser (auto)	Leitungswasser	Probe	4	1	READY 0/1	20	1	1		Batch 1

11 Bestimmungsserie überprüfen

- Mit dem Menüpunkt **Extras ► Ablauftest** oder dem Symbol  für die Methode den **Ablauftest** durchführen. Dabei wird die Probentabelle sowie die nötige Hardware überprüft. Alternativ, falls nur die Probendaten angepasst wurden, kann mit dem Menüpunkt **[Probentabelle] ► Probentellentest...** oder dem Symbol  der Probentellentest durchgeführt werden. Dabei wird nur überprüft, ob alle Probendaten korrekt sind.

Standards und Proben messen

- 1 Die Proben in Probenvials abfüllen und entsprechend der erstellten Probentabelle auf das Rack stellen. Den Spülbecher mit Reinstwasser füllen und auf das Rack stellen.

- 2 Auf der Registerkarte **Bestimmungsserie** die Schaltfläche **[Start]** anklicken.

Zunächst werden die Chromatogramme der 3 Standards gemessen, anschliessend das Chromatogramm der Probe. Die Aufzeichnung eines Chromatogramms kann im Unterfenster **Liveanzeige** verfolgt werden.

Im Unterfenster **Watch window** ist die aktuelle Rackposition angegeben sowie verschiedene IC-Parameter, wie Leitfähigkeit, Druck, Fluss, Degasser etc. Diese Anzeige kann individualisiert werden. Dazu mit der rechten Maustaste in das **Watch window** klicken. Den Menüpunkt **Eigenschaften Watch Window** wählen. Die Anzeige wie gewünscht anpassen und die Einstellungen mit **[OK]** bestätigen.

Proben, die gerade bearbeitet werden, sind rot unterlegt, fertig gemessene Proben grau.

5 Aktionen in der Datenbank

Der Programmteil **Datenbank** beinhaltet folgende Unterfenster:

Bestimmungsübersicht	Im Unterfenster Bestimmungsübersicht werden Bestimmungen angezeigt und können gesichtet werden.
Resultate	Im Unterfenster Resultate erscheint eine Tabelle mit den Komponenten, ihren Konzentrationen, Retentionszeiten etc.
Kurven 1 - 5	In den Unterfenstern Kurven 1 - 5 werden wahlweise das Chromatogramm und die Kalibrierkurve, der Fluss oder der Druck dargestellt.
Informationen	Im Unterfenster Informationen werden über die einzelnen Registerkarten Angaben zur Probe, zu den Geräten etc. angezeigt.

5.1 Bestimmungen sichten

Sie haben mehrere Möglichkeiten, ihre Bestimmungen auszuwählen und zu sichten:

- nach einer Spalte sortieren
- über einen Schnellfilter finden
- mit einem Spezialfilter finden
- über das Menü **Suchen**
- über einen Batch (benutzerdefinierter Filter) auswählen

Sortieren

- 1** Klicken Sie auf das Symbol des Programnteils **Datenbank**.



- 2** Öffnen Sie die Datenbank, in die Sie ihre Daten gespeichert haben.

- 3** Erster Klick in der Tabelle mit allen Datensätzen auf einen Spaltentitel, nach dem sortiert werden soll.

Die Tabelle wird nach der ausgewählten Spalte in aufsteigender Reihenfolge sortiert.

4

Die Tabelle wird nach der ausgewählten Spalte in absteigender Reihenfolge sortiert.

Schnellfilter

1

Der Cursor erhält ein spezielles Filtersymbol. Beim Navigieren innerhalb der Tabelle werden die Zellen, in denen sich der Cursor befindet, gelb hinterlegt.

2

Die Datensätze werden nach dem Inhalt des gewählten Tabellenfeldes gefiltert. Innerhalb der gefilterten Tabelle kann der Schnellfilter erneut angewendet werden.

3

Spezialfilter

Mit dem Spezialfilter haben Sie die Möglichkeit, die Filterbedingungen detailliert festzulegen.

1

2

3

4

Im Unterfenster **Bestimmungsübersicht** erscheint die Tabelle mit allen Datensätzen der Methode **Leitungswasser**.

Die Daten eines markierten Datensatzes erscheinen in den anderen Unterfenstern.

Filterbedingung	Neuer Filter bearbeiten
Verknüpfung	UND
Feld	Methodenname Den Eintrag wählen über Weitere... ► Methode ► Identifikation.
Typ	Text
Operator	=
Vergleichswert	Leitungswasser

Suchen

Mit dieser Funktion können Sie beispielsweise nach Bestimmungen mit einem bestimmten Anwender suchen.

- 1 Über das Menü **Bestimmungen** ► **Suchen** den Dialog **Suchen - Datenbank 'MaglC Net'** öffnen.
- 2 Im Abschnitt **Suchen in** auf die Schaltfläche **[Weitere...]** klicken und im Dialog unter **Bestimmung** ► **Aufnahme** den Eintrag **Anwender (Kurzname)** auswählen.
- 3 Im Feld **Suchbegriff** Ihren Kurznamen eingeben.
- 4 **[Weitersuchen]** anklicken.

Die erste Zeile, die dem Suchbegriff entspricht, wird markiert.

Batch (benutzerdefinierter Filter)

- ## 1 Neues Batch erstellen
- Über das Menü **Bestimmungen ► Batch ► Neues Batch** den Dialog **Neues Batch** öffnen.

- Im Feld **Batchname** den Namen **Anionen** eintragen.
- **[OK]** anklicken.

2 Bestimmungen zu Batch hinzufügen

- In der Tabelle die Datensätze markieren, die dem Batch hinzugefügt werden sollen.
- Über das Menü **Bestimmungen ► Batch ► An Batch anhängen** den Dialog **An Batch anhängen** öffnen.
- Im Auswahlfeld **Batchname** den Namen **Batch Leitungswasser** wählen.
Datensätze können auch einem Batch hinzugefügt werden, der im **Arbeitsplatz** erstellt wurde. Dazu im Auswahlfeld **Batchname** den Namen eines entsprechenden Batches wählen.
- Die Option **Ausgewählte Bestimmungen** markieren.
- **[OK]** anklicken.

Die in der Bestimmungsübersicht ausgewählten Datensätze werden dem Batch hinzugefügt und stehen jederzeit wieder als Auswahl zur Verfügung.

Es können maximal 500 Datensätze an einen Batch angehängt werden.

3 Batch öffnen

Im Unterfenster **Bestimmungsübersicht** im Auswahlfenster **Batch** den gewünschten Batch wählen.

Es werden alle Datensätze angezeigt, die an den gewählten Batch angehängt wurden.

4 Batch löschen

- Über das Menü **Bestimmungen ► Batch ► Batch löschen** den Dialog **Batch löschen** öffnen.
- Im Auswahlfeld **Batchname** den Namen **Batch Leitungswasser** wählen.
- **[OK]** anklicken.

Der Batch wird aus der Datenbank gelöscht.

5 Angewendete Filter entfernen

Über das Menü **Bestimmungen ► Filter ► Filter entfernen** werden ein aktuell angewendeter Spezial- oder Schnellfilter sowie ein ausgewählter Batch entfernt. Alle Datensätze werden wieder angezeigt.

5.2 Resultate anschauen

Sie haben mehrere Möglichkeiten, die Resultate, Chromatogramme und Kurven zu betrachten und darzustellen. Die folgenden Herangehensweisen werden in diesem Kapitel beschrieben:

- Resultate anzeigen.
- Ausgewählte Bereiche des Chromatogramms vergrössern über Zoom mit Maus oder Zoom mit Dialog.
- Die Darstellung der Chromatogramme ändern.
- Die Kalibrierkurve darstellen.
- Detailübersicht zu mehreren Bestimmungen anzeigen.
- Kurven überlagern.

Resultate anzeigen

Im Unterfenster **Resultate** werden verschiedene Parameter angezeigt.

- 1 Im Unterfenster **Bestimmungsübersicht** den gewünschten Datensatz anklicken.

Im Unterfenster **Resultate** werden Parameter des ausgewählten Datensatzes angezeigt.

- 2** Die Parameter der Tabelle können im Dialog **Eigenschaften Resultatfenster** zusammengestellt werden.

Den Dialog **Eigenschaften Resultatfenster** öffnen durch Doppelklicken in das Feld der Resultatanzeige oder über das Menü **Ansicht ► Eigenschaften ► Eigenschaften Resultate**.

- 3** In der Auswahlliste **Verfügbare Spalten** einen gewünschten Parameter anklicken. Den gewählten Parameter mit der Schaltfläche  in die Liste **Angezeigte Spalten** verschieben.

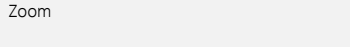
- 4** Schritt 3 für jeden gewünschten Parameter wiederholen.

- Die gewählten Parameter werden im Unterfenster **Resultate** angezeigt.

Mit Hilfe der Zoomfunktion können einzelne Bereiche eines Chromatogramms vergrössert dargestellt werden.

- ## Ausgewählte Bereiche des Chromatogramms vergrössern über Zoom mit Dialog

- 1 In der Übersichtstabelle einen Datensatz markieren.
Das dazugehörige Chromatogramm wird im Unterfenster **Kurven 1** dargestellt.
- 2 Mit rechter Maustaste in das Chromatogramm klicken.
- 3 Über das Kontextmenü **Zoom** den Dialog **Zoom** zur Eingabe des Zoombereichs öffnen.
- 4 Im Bereich **X-Achse** im Feld **von** den Wert **4.5** und im Feld **bis** den Wert **5.5** eingeben.



Zoom

X-Achse
von 4.5 min bis 12 min

Y-Achse
von 5.5 µS/cm bis 9.0 µS/cm

OK Abbrechen Übernehmen

- 57

Der entsprechende Bereich wird vergrössert dargestellt.

Ausgewählte Bereiche des Chromatogramms verkleinern

- 1 Mit rechter Maustaste in das Chromatogramm klicken. Im Kontextmenü **Unzoom** anklicken.
- 2 Alternativ kann die Anzeige mit einem Doppelklick ins Chromatogramm zurückgesetzt werden.

Das Chromatogramm wird in seiner ursprünglichen Grösse dargestellt.

Darstellung der Chromatogramme ändern

Sie haben die Möglichkeit, die Eigenschaften eines Chromatogramms zu bearbeiten. Sie können die Darstellung des Chromatogramms, die Beschriftung der Achsen oder die Beschriftung in den Chromatogrammen ändern. Nachfolgend ändern Sie die Beschriftung der Peaks und der Achsen im Chromatogramm. Gehen Sie wie folgt vor:

1 Peakbeschriftung ändern

- Mit der rechten Maustaste in das Chromatogramm klicken.
Eigenschaften ► Kurve wählen.
- Das Kontrollkästchen **Retentionszeit** deaktivieren und das Kontrollkästchen **Konzentration** aktivieren.
- **[OK]** anklicken.

2 Achsenbeschriftung ändern

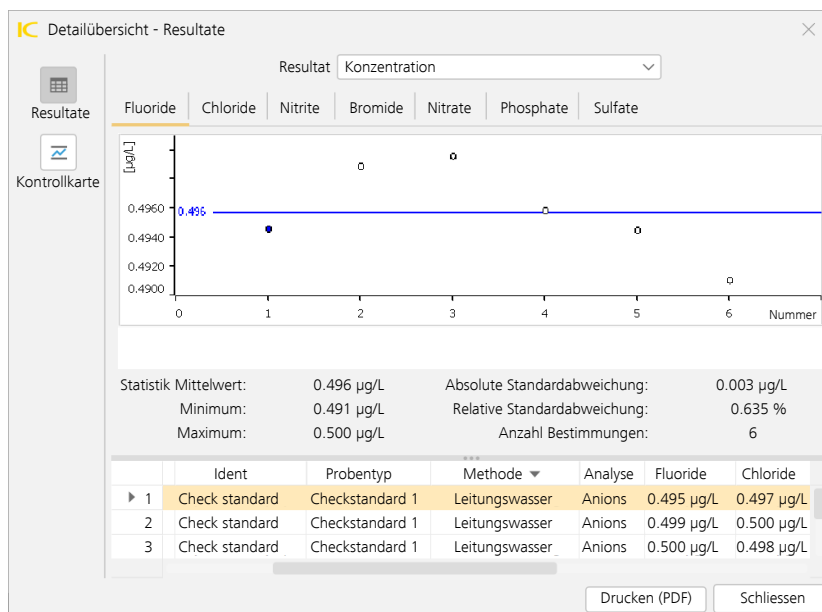
- Mit der rechten Maustaste in das Chromatogramm klicken.
Eigenschaften ► Achsen wählen.
- Im Bereich **x-Achse** in das Feld **Achsenbeschriftung** klicken und **Retentionszeit** eintragen.
- Im Bereich **y-Achse** in das Feld **Achsenbeschriftung** klicken und **Leitfähigkeit** eintragen.
- **[OK]** anklicken.

Kalibrierkurve darstellen

- 1 In der Übersichtstabelle einen Datensatz markieren.
- 2 Im **Unterfenster Kurven 1** die Option **Kalibrierkurve** auswählen.

- ### Details darstellen

- Beispiel:



- 6** Bei Bedarf eine PDF-Datei der Kurvenüberlagerung erzeugen. Dazu **[Drucken (PDF)]** anklicken.

Der Dialog **Resultatübersicht drucken (PDF)** wird geöffnet.

- 7** Im Dialog **Resultatübersicht drucken (PDF)** die gewünschten Komponenten und das gewünschte Format anwählen.

Über **[OK]** den Dialog **Resultatübersicht drucken (PDF)** schließen.

Eine PDF-Datei wird erzeugt.

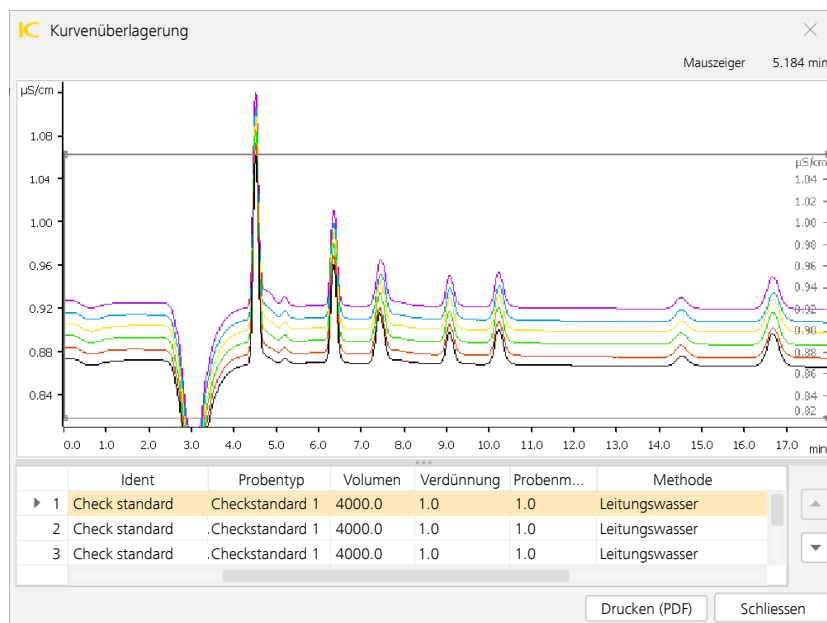
- 8** Über **[Schliessen]** den Dialog **Detailübersicht - Resultate** schließen.

Kurven überlagern

- 1** Im Unterfenster **Bestimmungsübersicht** die gewünschten Bestimmungen markieren.
- 2** Über das Menü **Bestimmungen ► Kurven überlagern...** den Dialog **Kurven überlagern** öffnen.
- 3** Die Option **Ausgewählte Bestimmungen** wählen.
- 4** Über **[OK]** den Dialog **Kurven überlagern** schließen.

Der Dialog **Kurvenüberlagerung** zeigt die Kurvenüberlagerung der gewählten Bestimmungen.

Beispiel:



- 5** Bei Bedarf eine PDF-Datei der Kurvenüberlagerung erzeugen. Dazu **[Drucken (PDF)]** anklicken.

Der Dialog **Kurvenübersicht drucken (PDF)** wird geöffnet.

- 6** Im Dialog **Kurvenübersicht drucken (PDF)** das gewünschte Format anwählen.

Über **[OK]** den Dialog **Kurvenübersicht drucken (PDF)** schliessen.

Eine PDF-Datei wird erzeugt.

- 7** Über **[Schliessen]** den Dialog **Kurvenüberlagerung** schliessen.

5.3 Bestimmungen nachbearbeiten

Beim Nachbearbeiten von Bestimmungen können Probanddaten, Auswerteparameter und Kurvenauswertung geändert und die Resultate neu berechnet werden.

Als Beispiel 1 wird die Auswertung über die Peakhöhe anstelle der Auswertung über die Peakfläche beschrieben, welche in der Methodenvorlage definiert ist. Die Kalibrierkurven werden neu berechnet.

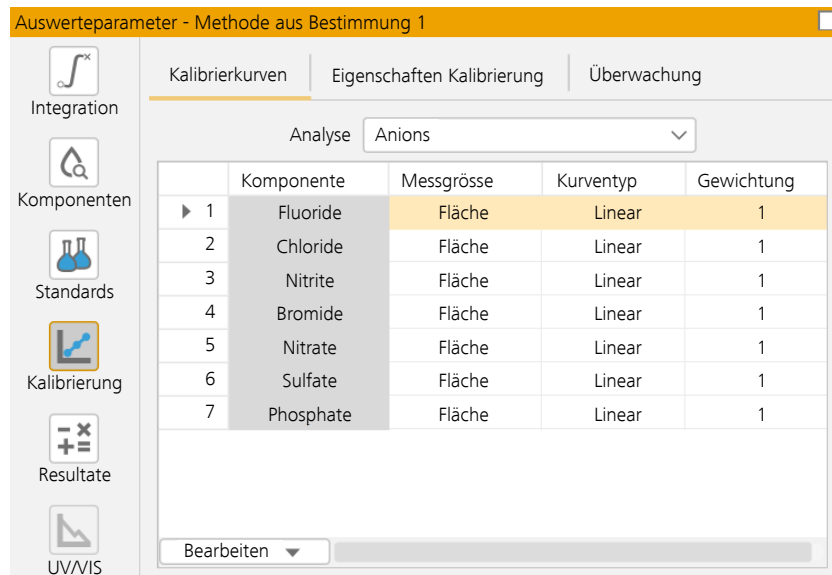
Als Beispiel 2 werden die Integrationsparameter angepasst. Die bestehende Kalibrierung wird beibehalten.

Detailübersicht - Kalibrierung

Beispiel zum Anpassen der Kalibrierung.

1 Kalibrierkurve nachbearbeiten

- Im Unterfenster **Bestimmungsübersicht** die 3 Standards markieren.
- Über das Menü **Bestimmungen ► Nachbearbeiten...** den entsprechenden Dialog öffnen.
- Im Unterfenster **Auswerteparameter** auf die Schaltfläche **[Kalibrierung]** klicken.
- Die Registerkarte **Kalibrierkurven** wählen.
- In der Tabelle die erste Komponente (Fluorid) markieren.



- Über das Menü **Bearbeiten ► Bearbeiten** den Dialog **Kalibrierkurve Fluorid** öffnen:

Kalibrierkurve Fluoride

Messgröße: Fläche

Kurventyp: Fläche

Gewichtung: Höhe

1 von 7 OK Schliessen

- Im Feld **Messgröße** als neuen Parameter **Höhe** wählen und **[OK]** anklicken.
- Über das Menü **Bearbeiten ► Einstellungen für alle Komponenten übernehmen** die neue Messgröße für alle Komponenten in der Tabelle übernehmen.
- **[Aktualisieren]** anklicken.

Mit **[Aktualisieren]** wird die markierte Bestimmung aktualisiert.

Um die Änderung auf alle Bestimmungen zu übertagen auf **[Nachbearbeiten]** klicken (siehe nächster Schritt).

2 Über die Schaltfläche **[Nachbearbeiten]** den Dialog **Nachbearbeiten** öffnen.

Bezüglich Kalibrierung gibt es 2 Optionen:

Nachbearbeiten

Die Auswerteparameter der markierten Bestimmung werden angewendet. Zusätzlich eine der folgenden Optionen wählen.

Kalibrierung

Eine bestehende Kalibrierung anwenden oder eine neue Kalibrierung erzeugen und anwenden.

☐ Kalibrierung aus markierter Bestimmung auf alle Bestimmungen anwenden.

☒ Neue Kalibrierung aus Standards der Nachbearbeitungstabelle erstellen und anwenden.

Öffnen Sie die Hilfe mit F1 für weiterführende Informationen.

Integration

☒ Manuelle Integration beibehalten

OK Abbrechen

Da der Auswerteparameter von **Fläche** zu **Höhe** geändert wurde, die Kalibrierung neu berechnen. Daher die Option **Neue Kalibrierung aus Standards der Nachbearbeitungstabelle erstellen und anwenden.** wählen.

Beim Nachbearbeiten werden neue Kalibrierungen aus den Standards erzeugt. Dafür werden die Auswerteparameter der markierten Bestimmung verwendet. Die Nachbearbeitungstabelle wird von oben nach unten abgearbeitet.

3 Über **[OK]** den Dialog **Nachbearbeiten** schliessen.

Die geänderten Daten werden gespeichert.

Detailübersicht - Integration

Beispiel zum Anpassen der Integrationsparameter.

1 Integrationsparameter nachbearbeiten

- Im Unterfenster **Bestimmungsübersicht** Standard 3 und eine Probe markieren.
- Über das Menü **Bestimmungen ► Nachbearbeiten...** den entsprechenden Dialog öffnen.
- Im Unterfenster **Auswerteparameter** auf die Schaltfläche **[Integration]** klicken.
- Die Registerkarte **Peakerkennung** wählen.
- Der Injektionspeak ist nicht von Interesse. Daher den **Integrationsstart** auf den Wert von **5 min** stellen.

Auswerteparameter - Methode aus Bestimmung 1

Analyse: Anionen

Einstellungen | Peakerkennung | Ereignisse

Minimale Höhe	<input type="text" value="0.01"/>	$\mu\text{S/cm}$
Minimale Fläche	<input type="text" value="0.001"/>	$(\mu\text{S/cm}) \times \text{min}$
Integrationsstart	<input type="text" value="5"/>	min
Polarität	+ ▾	<button>Filter</button>

☐ Negative Peaks
☐ Driftkompensation

☐ Blindprobe subtrahieren
☐ Overflow ignorieren

Die Peakdaten des Standards werden neu berechnet. Um die Auswirkungen des geänderten Integrationsstarts zu sehen, auf **[Aktualisieren]** klicken.

- Über die Schaltfläche **[Nachbearbeiten]** den Dialog **Nachbearbeiten** öffnen.

Bezüglich Kalibrierung gibt es 2 Optionen:

Die Option **Kalibrierung aus markierter Bestimmung auf alle Bestimmungen anwenden.** wählen.

Die Kalibrierung (Standardchromatogramme, Kalibrierpunkte und Kalibrierkurven) der markierten Bestimmung wird beim Nachbearbeiten zur Kalibrierung aller Bestimmungen in der Tabelle verwendet.

- 3 Im aktualisierten Probenchromatogramm prüfen, ob die Änderung der Integrationszeit passend ist.

- 4 Über **[OK]** den Dialog **Nachbearbeiten** schliessen.

Die geänderten Daten werden gespeichert.


5.4 Reportvorlage erstellen

Um einen Report mit den Analyseergebnissen zu erstellen, können Sie eine bestehende Reportvorlage anpassen oder eine neue Reportvorlage definieren.

Nachfolgend passen Sie eine bestehende Reportvorlage mit Kalibrierkurve an. Zudem erstellen Sie eine neue Reportvorlage mit Resultattabelle und dem Chromatogramm der Probe Leitungswasser.

Reportvorlage anpassen für Kalibrierkurve

- 1
 - Über das Menü **Extras ► Reportvorlage ► Öffnen...** den Dialog **Reportvorlage öffnen** öffnen.
 - Die Reportvorlage **Result and Calibration** markieren.
 - **[Öffnen]** anklicken.


- Auf die Schaltfläche  klicken, um auf Seite 2 zu wechseln.
- Durch Doppelklick auf das Feld **Kalibrierkurve** den Dialog **Eigenschaften - Kalibrierkurvenfeld** öffnen.

Falls die Einstellungen so beibehalten werden, werden die Kalibrierkurven aller Komponenten im Report dargestellt. Um einzelne Kalibrierkurven, wie z. B. nur von Nitrat, im Report darzustellen, mit Schritt 2 fortfahren.

- Im Auswahlfeld **Komponente** als Beispiel die Komponente **Nitrat** eingeben.
 - Im Bereich **Kurvendarstellung** des Dialogs **Eigenschaften - Kalibrierkurvenfeld** die Option **aus Datenbank** wählen.
 - **[OK]** anklicken.
 - Über das Menü **Datei ► Seitenansicht** das Fenster **Reportvorschau** öffnen. Das Fenster **Reportvorschau** zeigt eine Vorschau des Reports mit den gewählten Daten.
- Wenn gemäss dem Fenster **Reportvorschau** alle Einstellungen korrekt sind, über das Menü **Datei ► Speichern unter...** den Dialog **Reportvorlage speichern** öffnen.
 - Im Dialog **Reportvorlage speichern** im Feld **Name** den Namen **Kalibrierkurve** eintragen.
 - **[Speichern]** anklicken.

Neue Reportvorlage erstellen für Resultattabelle/Chromatogramm

1 Resultattabelle erstellen

- Über das Menü **Extras ► Reportvorlage ► Neu ► Formular-report** den Dialog **Reportvorlage - Neuer Formularreport** öffnen.
- In der Symbolleiste das Symbol **Kurve + Resultattabelle**  anklicken.
- Den Cursor, der nun die Form eines Kreuzes hat, in der Reportvorlage platzieren, und bei gedrückter linker Maustaste die gewünschte Fläche erzeugen.

Der Dialog **Eigenschaften - Kurven + Resultattabellenfeld** wird geöffnet.

- Im Feld **Analyse** den Analysennamen **Anions** eintragen.
- Die Schaltfläche **Resultat** anklicken.

- 3
 - Den Dialog **Reportvorlage - Neuer Formularreport** schliessen und die Meldung **Vorlage speichern** mit **[Ja]** bestätigen.
 - Im Dialog **Reportvorlage speichern** im Feld **Name** den Namen **Resultate** eintragen.
 - **[Speichern]** anklicken.

Kalibrierkurven drucken

- 1 Im Unterfenster **Bestimmungsübersicht** die Zeile von Standard 3 markieren.
- 2 Über das Menü **Datei ► Drucken ► Report...** den Dialog **Reportausgabe** öffnen.
- 3 Die Parameter für den Report definieren gemäss *Reportausgabe, Seite 68*. Die Reportvorlage **Kalibrierkurve** und den Dateinamen **Kalibrierkurven** wählen.
Den Dialog **Reportausgabe** mit **[OK]** schliessen.

- 1 Im Unterfenster **Bestimmungsübersicht** die Zeile mit dem Eintrag **Leitungswasser** markieren.
- 2 Über das Menü **Datei ► Drucken ► Report...** den Dialog **Reportausgabe** öffnen.

