

TitriC 2.0



TitriC 2.0



Metrohm AG

CH-9101 Herisau

Switzerland

Phone +41 71 353 85 85

Fax +41 71 353 89 01

info@metrohm.com

www.metrohm.com

TitriC 2.0

Online-Hilfe

8.101.8005DE

Teachware
Metrohm AG
CH-9101 Herisau
teachware@metrohm.com

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.

[illegible][illegible]

3.10	Datenbank archivieren	19
3.11	Einstellungen Datenbank	20
3.12	Administrator-Einstellungen	21
3.12.1	Datenbank-Editor	21
3.12.2	Datenbank generieren	24
3.12.3	Datenbank aktivieren	25
3.12.4	Benutzerdefiniertes Resultat	25
3.12.5	Datenzuordnung	25
4	Einstellungen	29
4.1	Einstellungen tiamo	29
4.2	Einstellungen MagIC Net	30
4.3	Einstellungen TitrIC	31
4.4	Einstellungen Nachbearbeiten	32
5	Wie gehe ich vor?	34
5.1	TitriC starten	34
5.2	TitriC beenden	34
5.3	Nachbearbeiten	35
5.4	Exportieren	36
5.5	Datenbank wiederherstellen	36
	Index	37

1 Einführung

1.1 Willkommen bei TitrIC

Einführung



TitrIC 2.0

TitrIC

TitrIC liefert die vollautomatische Wasseranalyse. In einem Ablauf werden alle nötigen Probenvorbereitungsschritte durchgeführt und die gewünschten titrimetrischen und ionenchromatografischen Ergebnisse ermittelt.

So werden alle ionischen Bestandteile sicher, schnell und reproduzierbar bestimmt. Die Ergebnisse werden in einem gemeinsamen Report ausgegeben und in der integrierten Datenbank abgelegt.

Aufbau

Die TitrIC-Benutzeroberfläche ist in zwei Hauptansichten unterteilt:

- *Arbeitsplatz*
Hier wird die Probentabelle erstellt und der Ablauf gestartet.
- *Datenbank*
Hier werden die Bestimmungen gespeichert, sie können angezeigt, verwaltet, nachbearbeitet und ausgedruckt werden.

Funktionsweise

TitrIC steuert gleichzeitig **tiamo** und **MagIC Net**.

In der Proben­tabelle von **TitrIC** wird definiert, mit welcher tiamo-Methode und mit welcher MagIC Net-Methode die verschiedenen Proben gemessen werden. Beim Start einer Bestimmung leitet **TitrIC** alle relevanten Informationen an tiamo und MagIC Net weiter. Dort laufen die jeweiligen Methoden ab und nach deren Ende werden die gewünschten Resultate zurück an **TitrIC** übergeben. **TitrIC** erstellt einen gemeinsamen Report und legt die Daten in seiner Datenbank ab.

Es muss nur eine Software - **TitrIC** - gestartet werden, alle anderen Programme werden automatisch mitgestartet und beim Beenden von **TitrIC** auch wieder automatisch geschlossen.

1.2 Online-Hilfe

Einführung

Hilfe aufrufen

TitriC verfügt über eine sehr umfangreiche und detaillierte Online-Hilfe, die auf zwei verschiedene Arten aufgerufen werden kann:

- **Allgemeiner Aufruf**

Mit dem Menüpunkt **Hilfe ► TitriC Hilfe** oder dem Symbol  wird die Online-Hilfe mit dem Thema *Willkommen bei TitriC* geöffnet. Von dort kann via **Inhalt**, **Index**, **Suchen** oder persönlichen **Favoriten** zum gewünschten Thema gesprungen werden.

- **Kontext-sensitiver Aufruf**

Mit der Funktionstaste **[F1]** auf der Tastatur wird direkt zum Thema gesprungen, welches Informationen zu dem in **TitriC** aktivierten Element (Dialogfenster, Registerkarte) anzeigt.

Darstellungskonventionen

In der vorliegenden Dokumentation werden folgende Symbole und Formattierungen verwendet:

<i>Datenbank</i>	Link zu anderem Hilfethema, in dem Informationen zum markierten Begriff angezeigt werden.
Methode	Dialogtext Bezeichnung für Namen von Parametern, Menüpunkten, Registerkarten und Dialogfenstern in der Software.
100	Bezeichnung für Parameterwerte in Eingabefeldern.
Datei ► Neu	Menü bzw. Menüpunkt; Pfad um zu einer bestimmten Stelle im Programm zu kommen.
[Weiter]	Schaltfläche

1	Anweisungsschritt Führen Sie diese Schritte nacheinander aus.
	Warnung Dieses Zeichen weist auf eine allgemeine Lebens- oder Verletzungsgefahr hin.
	Warnung Dieses Zeichen warnt vor elektrischer Gefährdung.
	Warnung Dieses Zeichen warnt vor Hitze oder heißen Geräteteilen.
	Warnung Dieses Zeichen warnt vor biologischer Gefährdung.
	Achtung Dieses Zeichen weist auf eine mögliche Beschädigung von Geräten oder Geräteteilen hin.
	Hinweis Dieses Zeichen markiert zusätzliche Informationen und Ratschläge.

1.3 Was ist neu bei TitrIC 2.0?

Einführung

Neue Software

- Titriergeräte werden mit **tiamo 1.3** angesteuert, ältere tiamo-Versionen werden nicht unterstützt.
- Ionenchromatographie-Geräte werden mit **MagIC Net 1.1** angesteuert, ältere MagIC Net-Versionen werden nicht unterstützt. Der Wechsel von IC Net auf MagIC Net bietet eine bessere Integration der Ionenchromatographie in die Gesamtlösung **TitriC** und höhere Prozessstabilität.

2 Arbeitsplatz

Definiton

Als **Arbeitsplatz** bezeichnet man in **TitriC** den Programmteil, in dem der Ablauf von Bestimmungen gesteuert und die Probedaten verwaltet werden.

2.1 Arbeitsplatz - Oberfläche

Programmteil: **Arbeitsplatz**

Arbeitsplatz-Symbol



Durch Klicken auf das Arbeitsplatz-Symbol in der vertikalen Leiste am linken Rand wird der Programmteil **Arbeitsplatz** geöffnet, gleichzeitig wird das Arbeitsplatz-Symbol farbig dargestellt.

Elemente

Die Oberfläche des Programnteils **Arbeitsplatz** umfasst die folgenden Elemente:

- *Menüleiste*
- *Symbolleiste*
- *Ablaufsteuerung*
- *Probentabelle*

2.2 Menüleiste

2.2.1 Arbeitsplatz - Hauptmenüs

Programmteil: **Arbeitsplatz**

Die Menüleiste im Programmteil **Arbeitsplatz** umfasst folgende Hauptmenü-Punkte:

- *Datei*
Neue Probentabelle erstellen, Probentabelle öffnen und speichern.
- *Probentabelle*
Probentabelle bearbeiten.
- *Ansicht*
tiamo oder MagIC Net anzeigen.

- *Einstellungen*
Einstellungen für tiamo, MagIC Net, TitriC und das Nachbearbeiten bearbeiten.
- *Hilfe*
Hilfe öffnen, Info zum Programm anzeigen.

2.2.2 Menü Datei

Menüpunkt: **Arbeitsplatz ▶ Datei**

 Neue Probentabelle	Neue leere Probentabelle erstellen.
 Probentabelle öffnen	Probentabelle öffnen und in den Arbeitsplatz laden.
 Probentabelle speichern unter...	Probentabelle unter einem neuen Namen speichern.
 Beenden	Programm beenden.

2.2.3 Menü Probentabelle

Menüpunkt: **Arbeitsplatz ▶ Probentabelle**

 Neue Zeile einfügen...	Dialog Zeile bearbeiten zum Editieren der Probedaten öffnen und neue Zeile nach der markierten Zeile in die Probentabelle einfügen (<i>siehe Kapitel 2.5.2, Seite 9</i>).
 Zeile bearbeiten...	Dialog Zeile bearbeiten für die markierte Zeile der Probentabelle öffnen (<i>siehe Kapitel 2.5.2, Seite 9</i>).
 Zeile löschen	Markierte Zeile aus der Probentabelle löschen.
 Probentabelle zurücksetzen	Alle Zeilen der Probentabelle in Status vorbereitet zurücksetzen, d. h. sie können wieder ausgeführt werden. Nicht aktiv wenn sich der Arbeitsplatz im Zustand BUSY befindet.
 Markierung entfernen	Markierung von ausgewählten Zeile(n) der Probentabelle entfernen.
 Methoden aktualisieren	Auswahl der Methoden von tiamo und MagIC Net aktualisieren, die beim Editieren der Probedaten zur Verfügung stehen (<i>siehe Kapitel 2.5.2, Seite 9</i>).
 Kopieren	Markierte Zeile kopieren.
 Ausschneiden	Markierte Zeile ausschneiden.



 **Einfügen** Kopierte Zeile vor der markierten Zeile einfügen. Wenn keine Zeile markiert ist, wird die kopierte Zeile am Ende der Probentabelle eingefügt.

2.2.4 Menü Ansicht

Menüpunkt: **Arbeitsplatz / Datenbank ▶ Ansicht**

 tiamo anzeigen	Tiamo Fenster anzeigen.
 MagIC Net anzeigen	MagIC Net Fenster anzeigen.

2.2.5 Menü Einstellungen

Menüpunkt: **Arbeitsplatz / Datenbank** ► **Einstellungen**

 Einstellungen tiamo	Dialogfenster mit den Einstellungen für tiamo öffnen (<i>siehe Kapitel 4.1, Seite 29</i>).
 Einstellungen MagIC Net	Dialogfenster mit den Einstellungen für MagIC Net öffnen (<i>siehe Kapitel 4.2, Seite 30</i>).
 Einstellungen TitriC	Dialogfenster mit den Einstellungen für TitriC öffnen (<i>siehe Kapitel 4.3, Seite 31</i>).
 Einstellungen Nachbearbeiten	Dialogfenster mit den Einstellungen für das Nachbearbeiten öffnen (<i>siehe Kapitel 4.4, Seite 32</i>).

2.2.6 Menü Hilfe

Menüpunkt: **Arbeitsplatz / Datenbank** ► **Hilfe**

-  **Info** Informationen zum Programm und zur Installation anzeigen.
-  **TitrlC Hilfe** TitrlC-Hilfe öffnen.

2.3 Symbolleiste

Programmteil: **Arbeitsplatz**

In der Symbolleiste sind alle Menüpunkte des Menüs **Probentabelle** direkt über Symbole zugänglich.

2.4 Ablaufsteuerung

Programmteil: **Arbeitsplatz**

In der Ablaufsteuerung wird die Probentabelle gestartet, angehalten oder gestoppt.

Bedienungselemente



Bestimmung starten

Start der ersten Bestimmung in der Probentabelle die den Status **vorbereitet** besitzt. Die Schaltfläche wechselt auf **[STOP]**, sobald die eine Bestimmung läuft.



Bestimmung stoppen

Sofortiger Stopp der laufenden Bestimmung einer Probentabelle. Die Schaltfläche wechselt auf **[START]**, sobald die Bestimmung beendet ist.



tiamo-Bestimmung unterbrechen

Mit dieser Schaltfläche wird die laufende tiamo-Bestimmung unterbrochen. Die Schaltfläche wird aktiv, sobald eine Bestimmung läuft. Wenn die Funktion ausgelöst werden kann, ist sie gelb, sonst grau. Nach dem Drücken von **[Pause]** wird anstelle dieser Schaltfläche **[Cont]** angezeigt.



tiamo-Bestimmung fortsetzen

Unterbrochene tiamo-Bestimmung starten. Die Schaltfläche ist nur vorhanden im Status **PAUSE** (tiamo-Bestimmung unterbrochen). Nach dem Drücken von **[Cont]** wird anstelle dieser Schaltfläche wieder **[Pause]** angezeigt.

Statusanzeige

Status

Zeigt den Status des Arbeitsplatzes und der markierten Bestimmung an.

Auswahl **READY** | **BUSY** | **PAUSE** | **ERROR**

READY

Bereit für den Start einer Bestimmung.

BUSY

Bestimmung läuft.

PAUSE

tiamo-Bestimmung unterbrochen.

ERROR

Fehler.

2.5 Probentabelle

2.5.1 Eigenschaften Probentabelle

Programmteil: **Arbeitsplatz**

In der Probestabelle werden die Probedaten und der Status einer Bestimmung tabellarisch dargestellt.

Jede Zeile entspricht einer Bestimmung.

Die Tabelle ist nicht direkt editierbar und nicht sortierbar. Zeilen die vom Benutzer ausgewählt wurden, sind **grün** markiert.

Probedaten

Zur Bedeutung dieser Spalten (siehe Kapitel 2.5.2, Seite 9).

Status

Der Status einer Bestimmung wird durch folgende Spalten beschrieben:

Status

Zeigt den Status der Bestimmung an, abhängig davon wird die Probentabellenzeile der Bestimmung farbig markiert.

Auswahl	vorbereitet läuft beendet abgebrochen
Standardwert	vorbereitet

vorbereitet

Die Bestimmung kann gestartet werden. Die Zeile ist **hellgrau**.

läuft

Die Bestimmung läuft, die Probedaten sind zum Editieren gesperrt. Die Zeile ist **dunkelgrau**.



Probentyp MagIC Net

Auswahl des Probenotyps für MagIC Net-Methode. Die Auswahl hängt von der MagIC Net-Methode ab.

Volumen MagIC Net

Volumen für MagIC Net-Methode.

Status

Anzeige des Status der Probe (siehe "Status", Seite 8).

Funktionen

[OK]

Eingetragene Probedaten in die entsprechende Zeile der Proben-tabelle übernehmen. Die gleiche Funktion kann auch durch Drücken der Taste **[Enter]** ausgelöst werden.

[Abbrechen]

Das Eingabefenster schliessen. Die aktuellen Probedaten werden dabei nicht in die Probentabelle übernommen.

[<]

Eingetragene Probedaten in die entsprechende Zeile der Proben-tabelle übernehmen und zur vorhergehenden Zeile springen.

[>]

Eingetragene Probedaten in die entsprechende Zeile der Proben-tabelle übernehmen und zur nächsten Zeile springen.

2.5.3 Dateiformat Probentabelle

TitriC-Probentabellen werden als CSV-Dateien gespeichert.

3 Datenbank

Definiton

Als **Datenbank** bezeichnet man in **TitriC** den Programmteil, in dem gespeicherte Bestimmungen angezeigt, verwaltet, nachbearbeitet und Reports erstellt werden können.

3.1 Datenbank - Oberfläche

Programmteil: **Datenbank**

Datenbank-Symbol



Durch Klicken auf das Datenbank-Symbol in der vertikalen Leiste am linken Rand wird der Programmteil **Datenbank** geöffnet, gleichzeitig wird das Datenbank-Symbol farbig dargestellt.

Elemente

Die Oberfläche des Programmteils **Arbeitsplatz** umfasst die folgenden Elemente:

- *Menüleiste*
- *Symbolleiste*
- *Filterauswahl*
- *Bestimmungsübersicht*

3.2 Menüleiste

3.2.1 Datenbank - Hauptmenüs

Programmteil: **Datenbank**

Die Menüleiste im Programmteil **Datenbank** umfasst folgende Hauptmenü-Punkte:

- *Datei*
Neue Probentabelle erstellen, Probentabelle öffnen und speichern.
- *Datenbank*
Datenbank bearbeiten.
- *Ansicht*
Tiamo oder MagIC Net anzeigen.

- *Einstellungen*
Einstellungen für Tiamo, MagIC Net, TitrIC und das Nachbearbeiten bearbeiten.
- *Hilfe*
Hilfe öffnen, Info zum Programm anzeigen.

3.2.2 Menü Datei

Menüpunkt: **Datenbank ► Datei**

 Aktueller Report	Report der aktuellen Bestimmung anzeigen (<i>siehe Kapitel 3.6, Seite 15</i>).
 Datenbank-Report	Report der markierten Bestimmung anzeigen (<i>siehe Kapitel 3.6, Seite 15</i>).
Alles markieren	Alle Bestimmungen der Datenbank markieren.
Resultate exportieren	Markierte Bestimmungen als CSV-Datei exportieren (<i>siehe Kapitel 3.7, Seite 17</i>).
 Beenden	Programm beenden.

3.2.3 Menü Datenbank

Menüpunkt: **Datenbank ▶ Datenbank**

 Filter bearbeiten...	Dialog Einstellungen Filter zum Verwalten und Editieren der Datenbank-Filter öffnen (<i>siehe Kapitel 3.8, Seite 17</i>).
 Nachbearbeiten...	Dialog Einstellungen Nachbearbeiten für die markierten Bestimmungen öffnen (<i>siehe Kapitel 4.4, Seite 32</i>).
 Bestimmungen löschen	Markierte Zeilen aus der Bestimmungsübersicht löschen.
Archivieren	Dialog Datenbank archivieren öffnen (<i>siehe Kapitel 3.10, Seite 19</i>).
Einstellungen	Dialog Einstellungen Datenbank öffnen (<i>siehe Kapitel 3.11, Seite 20</i>).
 Administrator-Einstellungen ►  Datenbank-Editor starten  Datenbank generieren  Datenbank aktivieren	Dialog Datenbank-Editor öffnen, um TitrIC-Datenbanken zu verwalten und zu editieren (<i>siehe Kapitel 3.12.1, Seite 21</i>). Neue TitrIC-Datenbank erzeugen und speichern (<i>siehe Kapitel 3.12.2, Seite 24</i>). Datenbank aktivieren (<i>siehe Kapitel 3.12.3, Seite 25</i>).



Benutzerdefiniertes Resultat

Benutzerdefiniertes Resultat erzeugen (*siehe Kapitel 3.12.4, Seite 25*).

3.2.4 Menü Ansicht

Menüpunkt: **Arbeitsplatz / Datenbank ► Ansicht**



tiamo anzeigen

Tiamo Fenster anzeigen.



MagIC Net anzeigen

MagIC Net Fenster anzeigen.

3.2.5 Menü Einstellungen

Menüpunkt: **Arbeitsplatz / Datenbank ► Einstellungen**



Einstellungen tiamo

Dialogfenster mit den Einstellungen für tiamo öffnen (*siehe Kapitel 4.1, Seite 29*).



**Einstellungen
MagIC Net**

Dialogfenster mit den Einstellungen für MagIC Net öffnen (*siehe Kapitel 4.2, Seite 30*).



Einstellungen TitrIC

Dialogfenster mit den Einstellungen für TitrIC öffnen (*siehe Kapitel 4.3, Seite 31*).



**Einstellungen Nach-
bearbeiten**

Dialogfenster mit den Einstellungen für das Nachbearbeiten öffnen (*siehe Kapitel 4.4, Seite 32*).

3.2.6 Menü Hilfe

Menüpunkt: **Arbeitsplatz / Datenbank ► Hilfe**



Info

Informationen zum Programm und zur Installation anzeigen.



TitrIC Hilfe

TitrIC-Hilfe öffnen.

3.3 Symbolleiste

Programmteil: **Datenbank**

In der Symbolleiste sind einige Funktionen des Programmteils Datenbank direkt über Symbole zugänglich.



Dialog **Einstellungen Filter bearbeiten** zum Verwalten und Editieren der Datenbank-Filter öffnen (*siehe Kapitel 3.8, Seite 17*).



Dialog **Einstellungen Nachbearbeiten** für die markierten Bestimmungen öffnen (siehe Kapitel 4.4, Seite 32).



Markierte Zeilen aus der Bestimmungsübersicht löschen.



Report der aktuellen Bestimmung anzeigen (siehe Kapitel 3.6, Seite 15).



Report der markierten Bestimmung anzeigen (siehe Kapitel 3.6, Seite 15).



Bestimmungen in der Übersicht nach **Datum aufsteigend** oder **absteigend** sortieren.

3.4 Filterauswahl

Programmteil: **Datenbank**

Filter auswählen und auf die Datenbank anwenden. Es stehen alle in TitrIC definierten Filter zur Verfügung.

IC-Daten

Welche IC-Daten im Report ausgegeben werden, kann in den Einstellungen der Datenbank geändert werden.

Bilanzen

In den Bilanzen werden Titrations- und IC-Daten zusammengefasst. Diese Resultate werden immer erzeugt, es kann in den Einstellungen der Datenbank eingestellt werden ob sie im Report erscheinen.



Hinweis

Um verschiedene Ionen vergleichen und eine Ionen-Bilanz erstellen zu können, werden alle ermittelten Konzentrationen auf den Äquivalenzwert für einwertige Ionen [mEq/L] umgerechnet.

1 mEq/L entspricht 1mmol/L eines einwertigen Ions.

Summe Anionen [mEq/L]

Summe der Konzentrationen aller Anionen.

Summe Kationen [mEq/L]

Summe der Konzentrationen aller Kationen.

Ionenbilanz [mEq/L]

= Summe Kationen [mEq/L] – Summe Anionen [mEq/L].

- **Positiver Wert**
Es wurden mehr mEq/L Kationen als Anionen gefunden.
- **Negativer Wert**
Es wurden mehr mEq/L Anionen als Kationen gefunden.

Ionenbilanz [%]
$$= 100 \cdot \text{Ionenbilanz [mEq/L]} / (\text{Summe Kationen [mEq/L]} + \text{Summe Anionen [mEq/L]}).$$

Funktionen

[Drucken]

Standard-Druckdialog öffnen, der TitrIC-Report kann auf einem beliebigen Drucker ausgegeben werden.

[<]

Report der vorherigen Bestimmung in der Datenbank anzeigen.

$$[\geq]$$

Report der nächsten Bestimmung in der Datenbank anzeigen.

3.7 Export

Menüpunkt: **Datenbank ► Datei ► Resultate exportieren**

Die Daten werden in eine **CSV-Datei** exportiert.

Es werden immer alle Datenfelder exportiert, die in der Datenbank vorhanden sind.

Jede Bestimmung entspricht einer Zeile in der CSV-Datei.

Jedes Datenfeld entspricht einer Spalte. In den TitrIC-Einstellungen kann konfiguriert werden, ob die Titel der Feldbezeichnungen als Spaltenüberschriften in die CSV-Datei exportiert werden.

3.8 Einstellungen Filter

Menüpunkt: **Datenbank ► Filter bearbeiten...**

Filterliste

Auf der linken Seite des Dialogs befindet sich die Liste der Filter, die in TitrIC definiert sind.

Filtereigenschaften

Die Eigenschaften des markierten Filters werden auf der rechten Seite des Dialogs angezeigt. Die Bedeutung der Eigenschaften ist im Dialog *Filter bearbeiten* beschrieben.

Funktionen

[Neu]

Dialog *Filter bearbeiten* für neuen Filter öffnen.

[Bearbeiten]

Dialog *Filter bearbeiten* für den markierten Filter öffnen.

[Löschen]

Markierten Filter löschen.

[OK]

Schliesst den Dialog und wendet den markierten Filter auf die Datenbank an.

[Abbrechen]

Schliesst den Dialog.

3.9 Filter bearbeiten

Menüpunkt: **Datenbank ▶ Filter bearbeiten... ▶ Einstellungen Filter ▶ Neu / Bearbeiten**

Name

Eingabe des Names für den Filter.

Feld

Auswahl des Datenfeldes, für die eine Bedingung formuliert werden soll.

Auswahl

'Feldname'

'Feldname'

Es wird nach dem ausgewählten Feld gefiltert.

Operator

Auswahl des Vergleichsoperators für die Filterbedingung.

Auswahl

= | > | < | <>

Wert

Eingabe des Vergleichswertes für die Filterbedingung.

Eingabe

Beliebiger Text oder Zahlenwert

Funktionen

[OK]

Änderungen speichern und zum Dialog **Einstellungen Filter** zurückkehren.

[Abbrechen]

Änderungen verwerfen und zum Dialog **Einstellungen Filter** zurückkehren.

Menüpunkt: **Datenbank** ► **Archivieren**



3.11 Einstellungen Datenbank

Menüpunkt: **Datenbank ► Einstellungen Datenbank**

In dem Dialogfenster **Einstellungen Datenbank** kann die Ausgabe der Bestimmungsdaten bearbeitet werden. Es wird konfiguriert, welche Daten in der **Bestimmungsübersicht** und im **TitrlC-Report** angezeigt werden.

Welche Bestimmungsdaten zur Verfügung stehen ist eine Eigenschaft der TitrIC-Datenbank. Die **Allgemeinen Daten** und die **Bilanzen** sind immer vorhanden, **Titrimationsdaten** und **IC-Daten** sind datenbankspezifisch.

Allgemeine Daten

Die Allgemeinen Daten werden zu jeder Bestimmung erzeugt.

Proben-ID

Proben-ID der Bestimmung.

Datum

Datum an dem die Bestimmung aufgenommen wurde.

Zeit

Zeit zu der die Bestimmung aufgenommen wurde.

Kommentar

Kommentar zu der Bestimmung.

Titrationdaten

Die Titrationsdaten einer Bestimmung werden im Datenbank-Editor konfiguriert.

IC-Daten

Die IC-Daten einer Bestimmung werden im Datenbank-Editor konfiguriert.

Bilanzen

In den Bilanzen werden Titrations- und IC-Daten zusammengefasst. Diese Resultate werden immer erzeugt.



Hinweis

Um verschiedene Ionen vergleichen und eine Ionen-Bilanz erstellen zu können, werden alle ermittelten Konzentrationen auf den Äquivalenzwert für einwertige Ionen [mEq/L] umgerechnet.

1 mEq/L entspricht 1 mmol/L eines einwertigen Ions.

Summe Anionen [mEq/L]

Summe der Konzentrationen aller Anionen.

Summe Kationen [mEq/L]

Summe der Konzentrationen aller Kationen.

Ionenbilanz [mEq/L]

= Summe Kationen [mEq/L] – Summe Anionen [mEq/L].

- **Positiver Wert**
Es wurden mehr mEq/L Kationen als Anionen gefunden.
- **Negativer Wert**
Es wurden mehr mEq/L Anionen als Kationen gefunden.

Ionenbilanz [%]
$$= 100 \cdot \text{Ionenbilanz [mEq/L]} / (\text{Summe Kationen [mEq/L]} + \text{Summe Anionen [mEq/L]}).$$

Funktionen

[OK]

Einstellungen übernehmen und Dialog schliessen.

[Abbrechen]

Änderungen verwerfen und Dialog schliessen.

3.12 Administrator-Einstellungen



Hinweis

Die Administrator-Einstellungen sollten nur von sehr erfahrenen Anwendern editiert werden.

In diesem Bereich wird die Datenbank konfiguriert, es können neue Datenbanken erzeugt und aktiviert werden.

Bei falscher Handhabung können Daten verloren gehen!

3.12.1 Datenbank-Editor

3.12.1.1 Datenbank-Editor - Oberfläche

Menüpunkt: **Datenbank ▶ Administrator-Einstellungen ▶ Datenbank-Editor starten**

Die Oberfläche des Dialogfensters **Datenbank-Editor** umfasst die folgenden Elemente:

- *Menüleiste*
- *Symbolleiste*

- *Resultattabelle*

3.12.1.2 Menüleiste

3.12.1.2.1 Datenbank-Editor - Hauptmenü

Menüpunkt: **Datenbank ▶ Administrator-Einstellungen ▶ Datenbank-Editor starten**

Die Menüleiste im Dialogfenster **Datenbank-Editor** umfasst folgende Hauptmenü-Punkte:

- *Datenbank*
Datenbanken verwalten.
- *Resultattabelle*
Resultattabelle der Datenbank bearbeiten.
- *Info*
Informationen zum Datenbank-Editor.

3.12.1.2.2 Menü Datenbank

Menüpunkt: **Datenbank-Editor ▶ Datenbank**

 Neue Datenbank...	Neues leeres Datenbank-Schema erstellen.
 Datenbank öffnen...	Gespeichertes Datenbank-Schema (*.con) auswählen und öffnen.
 Datenbank speichern	Aktuell geöffnete Datenbank speichern. Es wird das Datenbank-Schema (*.con) gespeichert und die zugehörige Datenbank-Datei (*.script) erzeugt und gespeichert.
 Datenbank speichern unter...	Geöffnete Datenbank unter einem anderen Namen speichern. Es wird das Datenbank-Schema (*.con) gespeichert und die zugehörige Datenbank-Datei (*.script) erzeugt und gespeichert.
 Datenbank löschen	Gespeichertes Datenbank-Schema (*.con) auswählen und löschen.
 Beenden	Datenbank-Editor schliessen.

3.12.1.2.3 Menü Resultattabelle

Menüpunkt: **Datenbank-Editor** ► **Resultattabelle**

 Zeile einfügen	Dialog Resultat bearbeiten zum Editieren des Resultats öffnen und neue Zeile vor der markierten Zeile in der Resultattabelle einfügen (<i>siehe Kapitel 3.12.1.5, Seite 24</i>).
 Zeile bearbeiten	Dialog Resultat bearbeiten für die markierte Zeile der Resultattabelle öffnen (<i>siehe Kapitel 3.12.1.5, Seite 24</i>).
 Zeile löschen	Markierte Zeile aus der Resultattabelle löschen.

3.12.1.2.4 Menü Info

Menüpunkt: **Datenbank-Editor ► Info**

 Info	Informationen zum Datenbank-Editor anzeigen.
--	--

3.12.1.3 Symbolleiste

Menüpunkt: **Datenbank ► Administrator-Einstellungen ► Datenbank-Editor starten**

In der Symbolleiste sind einige Funktionen des Dialogfensters **Datenbank-Editor** direkt über Symbole zugänglich.



Aktuell geöffnete Datenbank speichern. Es wird das Datenbank-Schema (*.con) gespeichert und die zugehörige Datenbank-Datei (*.script) erzeugt und gespeichert.



Geöffnete Datenbank unter einem anderen Namen speichern. Es wird das Datenbank-Schema (*.con) gespeichert und die zugehörige Datenbank-Datei (*.script) erzeugt und gespeichert.



Gespeichertes Datenbank-Schema (*.con) auswählen und löschen.



Dialog **Resultat bearbeiten** zum Editieren des Resultats öffnen und neue Zeile vor der markierten Zeile in der Resultattabelle einfügen (siehe Kapitel 3.12.1.5, Seite 24).



Dialog **Resultat bearbeiten** für die markierte Zeile der Resultattabelle öffnen (siehe Kapitel 3.12.1.5, Seite 24).



Markierte Zeile aus der Resultattabelle löschen.

3.12.1.4 Resultattabelle

Menüpunkt: **Datenbank ► Administrator-Einstellungen ► Datenbank-Editor starten**

In der Resultattabelle des Datenbank-Editors werden alle benutzerdefinierten Resultate der aktuellen TitrIC-Datenbank tabellarisch dargestellt.

Jede Zeile entspricht einem Resultat. Zur Bedeutung der Spalten siehe den Dialog **Resultat bearbeiten**.

Die Resultattabelle kann nicht direkt editiert oder sortiert werden. Die Resultate werden über das Menü **Resultattabelle** oder Doppelklick auf eine Zeile bearbeitet.

3.12.1.5 Resultat bearbeiten

Menüpunkt: **Datenbank ▶ Administrator-Einstellungen ▶ Resultat bearbeiten**



Hinweis

Der Name eines Resultats muss in TitrIC eindeutig sein!

Name

Resultatname der in TitrIC angezeigt wird. Wird als Beschriftung der Spalte in der Bestimmungsübersicht und als Feldname im TitrIC-Report verwendet.

Kategorie

Diese Einstellung bestimmt, aus welcher Quelle TitrIC das Resultat extrahiert und wie es im TitrIC-Report dargestellt wird.

Auswahl	TIT IC
TIT	Das Resultat wird aus den Daten der tiamo-Bestimmung extrahiert und im TitrIC-Report unter den Titrationsdaten dargestellt.
IC	Das Resultat wird aus den Daten der MagIC Net-Bestimmung extrahiert und im TitrIC-Report unter den IC-Daten dargestellt.

Suchschlüssel

Zeichenfolge nach der TitrIC in den Resultaten der tiamo- bzw. MagIC Net-Bestimmung sucht, um das gewünschte Resultat zu extrahieren.

3.12.2 Datenbank generieren

Menüpunkt: **Datenbank ▶ Datenbank ▶ Administrator-Einstellungen ▶ Datenbank generieren**

Ein existierendes Datenbank-Schema (***.con-Datei**) auswählen und daraus eine neue Datenbank erzeugen.



Hinweis

Mit dieser Funktion können sehr schnell Datenbanken mit identischer Konfiguration erzeugt werden, z. B. wenn die aktuelle Datenbank voll ist.

3.12.3 Datenbank aktivieren

Menüpunkt: **Datenbank** ▶ **Administrator-Einstellungen** ▶ **Datenbank aktivieren**

Eine existierende Datenbank-Datei auswählen und zur aktiven TitriC-Datenbank machen.



Hinweis

Die Dateien (*.log, *.properties, *.script) der Datenbank, die aktiviert werden soll, müssen sich in dem Verzeichnis ...\\Application Data\\Titric\\Database befinden.



Hinweis

Diese Aktion erfordert einen Neustart von TitrIC.

TitrlC wird geschlossen und die bisherige Datenbank wird automatisch als **Db_Backup#.script** gespeichert.

3.12.4 Benutzerdefiniertes Resultat

Menüpunkt: **Datenbank ► Administrator-Einstellungen ► Benutzerdefiniertes Resultat**

Es öffnet sich der Dialog **Resultat bearbeiten**. Mit diesem Menüpunkt lassen sich direkt benutzerdefinierte Resultate bearbeiten, ohne dass die Datenbank über den Datenbank-Editor bearbeitet werden muss.



Hinweis

Es können nur Resultate bearbeitet werden, die in der Datenbank mit dem Namen **Benutzerdefiniertes Resultat #** angelegt worden sind.

Wenn ein benutzerdefiniertes Resultat umbenannt worden ist, kann es nicht mehr direkt bearbeitet werden.

In der mitgelieferten Datenbank sind **5 benutzerdefinierte Resultate** enthalten, die direkt bearbeitet werden können.

3.12.5 Datenzuordnung

Die Resultate werden von tiamo und MagIC Net per **CSV-Datei** an TitrIC übermittelt. Damit das reibungslos funktioniert müssen folgende Bedingungen erfüllt sein:

- Die verwendete tiamo-Methode muss einen entsprechenden Export-Befehl enthalten.
Wenn TitrIC-Bestimmungen nachbearbeitet werden, muss die verwendete tiamo- und MagIC Net-Methode einen entsprechenden Export-Befehl enthalten.
- Die Export-Vorlage muss die richtigen Einstellungen verwenden.
- Die Export-Dateien müssen die richtigen Resultatfelder in der richtigen Reihenfolge enthalten.
- Die Resultatnamen in tiamo bzw. MagIC Net müssen mit den Suchschlüsseln in der Datenbank übereinstimmen.



Hinweis

In der Online-Hilfe von tiamo und MagIC Net finden Sie detaillierte Informationen zu den Themen:

- Methodenerstellung
- Datenexport und Exportvorlagen
- Definition von Resultaten und Namenskonventionen

3.12.5.1 Export-Vorlage tiemo

Einstellungen

Zielverzeichnis

Muss in TitrIC und der Export-Vorlage von tiamo übereinstimmen.

- Muss mit **Export-Datei** im Dialog **Einstellungen tiamo** übereinstimmen.
- Muss mit **Export-Datei tiamo** im Dialog **Einstellungen Nachbearbeiten** übereinstimmen.

Dateityp

Es muss der Typ ***.csv (Comma Separated)** ausgewählt sein.

Dateiname

Es muss die Option **Fixer Dateiname (Daten anhängen)** ausgewählt sein.

Der Name muss in TitrIC und der Export-Vorlage von tiamo übereinstimmen.

- Muss mit **Export-Datei** im Dialog **Einstellungen ti amo** übereinstimmen.
- Muss mit **Export-Datei ti amo** im Dialog **Einstellungen Nachbearbeiten** übereinstimmen.

Datenfelder

Am Anfang **müssen** folgende Felder in dieser Reihenfolge stehen:

- Anschliessend kommen die Resultate, die von tiamo nach TitrIC übertragen werden sollen. Die Reihenfolge der Resultate ist nicht entscheidend, jedoch müssen für jedes Resultat die Felder **RSxx.Name**, **RSxx.Wert** und **RSxx.Einheit** in dieser Reihenfolge vorhanden sein.

Für die Zuordnung der Resultate in der TitrIC-Datenbank zu den tiamo-Resultaten gelten folgende Regeln:

- 

Folgende Resultate müssen in tiamo immer vorhanden sein, sie werden zur Berechnung der Bilanzen (*siehe Kapitel 3.11, Seite 20*) verwendet:

- ### 3.12.5.2 Export-Vorlage MagIC Net

Zielverzeichnis

- Muss mit **Export-Datei MagIC Net** im Dialog **Einstellungen Nachbearbeiten** übereinstimmen.

Es muss der Typ ***.csv (Comma Separated)** ausgewählt sein.

Es muss die Option **Fixer Dateiname (Daten anhängen)** ausgewählt sein.
Der Name muss in TitriC und der Export-Vorlage von MagIC Net übereinstimmen.

- 27



Datenfelder

Am Anfang **müssen** folgende Felder in dieser Reihenfolge stehen:

- **Startzähler** (aus **Bestimmung** ► **Identifikation**)
- **Info 1** (aus **Probe** ► **Identifikationen**)
- **Ident** (aus **Probe** ► **Identifikationen**)

Anschliessend kommen die Resultate, die von MagIC Net nach TitrIC übertragen werden sollen. Die Reihenfolge der Resultate ist nicht entscheidend.

Resultatzuordnung

Für die Zuordnung der Resultate in der TitrIC-Datenbank zu den MagIC Net-Resultaten gelten folgende Regeln:

- TitrIC-Resultate mit der **Kategorie IC** werden MagIC Net-Resultaten zugeordnet.
- Das TitrIC-Resultat wird zugeordnet:
 - Wenn sein **Suchschlüssel** mit dem **Resultatname** eines **benutzerdefinierten** MagIC Net-Resultats übereinstimmt (**RS.'Suchschlüssel'**).
 - Wenn sein **Suchschlüssel** mit dem **Komponentenname** des **Komponentenresultats CONC** von MagIC Net übereinstimmt (**RS.'Analysename'. 'Suchschlüssel'.CONC**).



Hinweis

Folgende Resultate müssen in MagIC Net immer vorhanden sein, sie werden zur Berechnung der Bilanzen (*siehe Kapitel 3.11, Seite 20*) verwendet:

- anions IC
- cations IC

4.2 Einstellungen MagIC Net

Menüpunkt: **Einstellungen** ► **Einstellungen MagIC Net**

Einstellungen

IC-Geräte automatisch ausschalten

ein | aus (Standardwert: **ein**)

IC-Geräte werden automatisch abgeschaltet, nachdem die TitrIC-Proben-tabelle abgearbeitet wurde.

MagIC Net Fenster

Die Einstellung definiert wie MagIC Net angezeigt wird.

Auswahl	anzeigen	minimieren	verstecken
	anzeigen Das Fenster wird angezeigt, es ist normal zugänglich.	minimieren Das Fenster wird minimiert, es kann über die Taskleiste von Windows wieder geöffnet werden.	verstecken Das Fenster wird versteckt, es ist über Windows nicht zugänglich.

Programmverzeichnis

Pfad zu dem Verzeichnis, in dem sich die Datei **Magicremote.exe** befindet.
Der Pfad wird bei der Installation von TitrIC automatisch eingetragen.



Dialog zur Auswahl des Verzeichnisses öffnen.

TCP/IP Port

Eingabe des TCP/IP Ports, über den TitrIC mit MagIC Net kommuniziert. Der Port wird bei der Installation von TitrIC automatisch vergeben.

MagIC Net-Arbeitsplatz

Auswahl des MagIC Net-Arbeitsplatzes auf dem die TitrIC-Bestimmungen ausgeführt werden.

Funktionen

[Verbindungstest]

Es wird überprüft ob die Kommunikation mit MagIC Net über den TCP/IP Port funktioniert.

Die Einstellungen werden gespeichert und der Dialog geschlossen.

Der Dialog wird geschlossen, Änderungen werden verworfen.

Menüpunkt: **Einstellungen** ▶ **Einstellungen TitrIC**

Nach jeder Bestimmung TitrIC-Resultate exportieren.

Grenzwert für Ionenbilanz [%]

Eingabe des Grenzwerts. Der Wert wird überwacht, das Ergebnis im **System-Kommentar** des TitrIC-Reports ausgegeben.

Backup

Täglicher Datenbank-Backup

ein | aus (Standardwert: **ein**)

Die aktuelle TitritC-Datenbank wird täglich gesichert.

Zielverzeichnis

Verzeichnis, in das das Datenbank-Backup gespeichert werden soll.



Dialog zur Auswahl des Verzeichnisses öffnen.

Backup-Zeit

Eingabe der Zeit, zu der das Backup erfolgen soll. Format: **hh:mm:ss**

Funktionen

[OK]

Die Einstellungen werden gespeichert und der Dialog geschlossen.

[Abbrechen]

Der Dialog wird geschlossen, Änderungen werden verworfen.

4.4 Einstellungen Nachbearbeiten

Menüpunkt: **Einstellungen** ► **Einstellungen Nachbearbeiten**

Einstellungen

Titrationdaten nachbearbeiten

ein | aus (Standardwert: **ein**)

Die Export-Datei von tiamo wird ausgelesen und die TitrIC-Resultate werden damit neu berechnet.

IC-Daten nachbearbeiten

ein | aus (Standardwert: **ein**)

Die Export-Datei von MagIC-Net wird ausgelesen und die TitrIC-Resultate werden damit neu berechnet.

Export-Datei tiamo

Datei aus der die nachbearbeiteten tiamo-Daten ausgelesen werden.



Dialog zur Auswahl der Export-Datei öffnen.

Export-Datei MagIC Net

Datei aus der die nachbearbeiteten MagIC Net-Daten ausgelesen werden.



Dialog zur Auswahl der Export-Datei öffnen.

Funktionen**[OK]**

Die Einstellungen für das Nachbearbeiten werden gespeichert und der Dialog geschlossen.

**Hinweis**

Wenn der Dialog über den Menüpunkt **Datenbank ► Datei ► Nachbearbeiten...** geöffnet wurde, wird gleichzeitig das Nachbearbeiten der markierten Bestimmungen gestartet. Die Daten der markierten Bestimmungen in TitrIC werden mit den nachbearbeiteten Werten überschrieben.

[Abbrechen]

Der Dialog wird geschlossen, Änderungen an den Einstellungen für das Nachbearbeiten werden verworfen.

5.3 Nachbearbeiten

Wie gehe ich vor?

Funktionsweise

Das eigentliche Nachbearbeiten findet ausserhalb von TitrIC statt. Die betroffenen Bestimmungen werden erst in tiamo und MagIC Net getrennt nachbearbeitet, dann werden aus beiden Programmen CSV-Exports der nachbearbeiteten Bestimmungen erstellt und diese von TitrIC eingelesen.

Die CSV-Exports müssen eine bestimmte Datenstruktur besitzen, damit sie von TitrIC korrekt eingelesen werden können. Ausserdem müssen die Dateinamen und Austauschverzeichnisse der Export-Dateien zwischen tiamo und MagIC Net einerseits und TitrIC andererseits übereinstimmen.

Vorgehen



Hinweis

Wenn mehrere Bestimmungen miteinander nachbearbeitet werden, muss die **Proben-ID** innerhalb der Bestimmungen eindeutig sein.

- 1 Stellen Sie sicher, dass die **Export-Vorlagen** von **tiamo** und **MagIC Net**, für den CSV-Export der nachbearbeiteten Daten, richtig konfiguriert sind.
- 2 Bestimmungen in **tiamo** nachbearbeiten und CSV-Export mit der passenden Export-Vorlage erzeugen.
- 3 Bestimmungen in **MagIC Net** nachbearbeiten und CSV-Export mit der passenden Export-Vorlage erzeugen.

4



Hinweis

Bevor in TitrIC das Nachbearbeiten gestartet wird, müssen tiamo- und MagIC Net-Export mit den nachbearbeiteten Daten vorliegen.

Im Programmteil **Datenbank** mit dem Menüpunkt **Datenbank ► Nachbearbeiten...** den Dialog **Einstellungen Nachbearbeiten** öffnen.

- 5** Definieren welche Daten nachbearbeitet werden sollen und Pfade zu den Export-Dateien der nachbearbeiteten Titrations- bzw. IC-Daten angeben. Mit **[OK]** wird das Nachbearbeiten gestartet.

5.4 Exportieren

Wie gehe ich vor?

- 1 In den Programmteil **Datenbank** wechseln.
- 2 Alle Bestimmungen markieren die exportiert werden sollen.
- 3 Mit dem Menüpunkt **Datei ► Resultate exportieren** den Dialog zum Speichern öffnen.
- 4 Zielverzeichnis wählen, Dateiname angeben und speichern.

5.5 Datenbank wiederherstellen

Wie gehe ich vor?



Hinweis

Die Dateien (*.log, *.properties, *.script) der Datenbank, die aktiviert werden soll, müssen sich in dem Verzeichnis ...\\Application Data\\Titric\\Database befinden.

- 1 Im Programmteil **Datenbank** mit dem Menüpunkt **Datenbank ► Administrator-Einstellungen ► Datenbank aktivieren** den Dialog zur Auswahl der Datenbank öffnen.
- 2 Gewünschte Datenbank-Datei (***.script**) auswählen und aktivieren.



Hinweis

Diese Aktion erfordert einen Neustart von TitrIC.

TitriC wird geschlossen und die bisherige Datenbank wird automatisch als **Db_Backup#.script** gespeichert.

Index

A

Ablaufsteuerung	
Arbeitsplatz	7
Arbeitsplatz	
Ablaufsteuerung	7
Elemente	4
Menüleiste	4
Oberfläche	4
Probentabelle	8
Symbol	4
Symbolleiste	7

C

CSV-Datei	
Export	17

D

Datenbank	
Aktivieren	25
Archivieren	19
Einstellungen	20
Elemente	11
Filter	17
Generieren	24
Menüleiste	11
Oberfläche	11
Symbol	11
Symbolleiste	14
Wiederherstellen	25, 36
Datenbank-Editor	
Menüleiste	22
Resultat bearbeiten	24
Resultattabelle	23
Symbolleiste	23
Datenzuordnung	
TitriC - tiamo/MagIC Net	25

E

Eigenschaften	
Probentabelle	8
Einstellungen	
Datenbank	20
MagIC Net	30
Nachbearbeiten	32
tiamo	29
TitriC	31
Export	
CSV-Datei	17
Export-Vorlage	
MagIC Net	27
tiamo	26
Exportieren	36

F

Filter	
Bearbeiten	18
Einstellungen	17

H

Hilfe	2
-------------	---

M

MagIC Net	
Einstellungen	30
Export-Vorlage	27
Menüleiste	
Arbeitsplatz	4
Datenbank	11
Datenbank-Editor	22

N

Nachbearbeiten	35
Einstellungen	32

tiamo	29
-------------	----

O

Online-Hilfe	2
--------------------	---

P

Probentabelle	
Arbeitsplatz	8
Eigenschaften	8
Programmteil	
Arbeitsplatz	4
Datenbank	11

R

Report	
Aktueller Report	15
Datenbank-Report	15
Resultat bearbeiten	
Datenbank-Editor	24
Resultattabelle	
Datenbank-Editor	23

S

Symbolleiste	
Arbeitsplatz	7
Datenbank	14
Datenbank-Editor	23

T

tiamo	
Export-Vorlage	26
TitriC	
Beenden	34
Einstellungen	31
Starten	34