

Mag IC Net



Metrohm AG
CH-9101 Herisau
Schweiz
Telefon +41 71 353 85 85
Fax +41 71 353 89 01
info@metrohm.com
www.metrohm.com



Bedienungslehrgang

8.102.2401

05.2007 ek

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.



Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Aufbau des Bedienungslehrgangs	1
1.2	Programmbeschreibung	2
1.3	Darstellungskonventionen	3
2	Konfiguration	4
2.1	Software starten	4
2.2	Geräte konfigurieren	5
2.3	Säule konfigurieren	9
2.4	Eluent definieren	14
2.5	Lösungen anlegen	17
2.6	Zubehör anlegen	19
3	Methode erstellen	23
3.1	Methode für manuelle Injektion	23
3.1.1	Neue Methode erstellen	23
3.1.2	Geräte und Startparameter definieren	26
3.1.3	Zeitprogramm	35
3.1.4	Auswertung	40
3.1.5	Methode speichern	47
3.2	Methode mit Sample Processor	47
3.2.1	Neue Methode erstellen	47
3.2.2	Geräte und Startparameter definieren	48
3.2.3	Zeitprogramm	61
3.2.4	Auswertung	73
3.2.5	Methode speichern	74



4	Bestimmung durchführen	75
4.1	Equilibrierung	76
4.2	Standards und Probe manuell messen	77
4.3	Standards und Probe automatisch messen	80
4.4	Retentionszeiten manuell anpassen	84
5	Bestimmungen bearbeiten	87
5.1	Bestimmungen sichten	87
5.2	Resultate anschauen	92
5.3	Bestimmungen nachbearbeiten	95
5.4	Reportvorlage erstellen	97
5.5	Report drucken	100

1 Einleitung

1.1 Aufbau des Bedienungslehrgangs

Der vorliegende Bedienungslehrgang 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 der Bestimmung wird ein 850 Professional IC Anion MCS und eine Metrosep A Supp 5 Säule mit integriertem Chip verwendet.

Der Lehrgang ist in vier 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

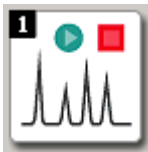
Es wird gezeigt, wie die Bestimmung mit einem einfachen System mit manueller Injektion durchgeführt wird. Zusätzlich wird eine Bestimmung mit einem automatisierten System mit Probenwechsler beschrieben.



1.2 Programmbeschreibung

Magic Net besteht aus folgenden Programmteilen:

Arbeitsplatz



- Öffnen/Schliessen von Arbeitsplätzen
- Eingabe von Probanddaten
- Start von Einzelbestimmungen und Probenserien
- Livedarstellung von Chromatogrammen und Systemparametern (Watch Window)

Datenbank



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

Methode



- Eingabe der verwendeten Gerätekombination und deren Parameter
- Definition des Zeitprogramms
- Eingabe der Integrationsparameter
- Eingabe der Analyten
- Resultatdefinition

Konfiguration



- Informationen zu Geräten, Säulen, Eluenten, Zubehör, Lösungen, Common Variablen und Rackdaten
- Anwenderverwaltung
- Sicherheitseinstellungen
- Programmadministration


Manuelle Bedienung



- Manuelle Bedienung eines Arbeitsplatzes
- Manuelle Bedienung aller Geräte

1.3 Darstellungskonventionen

In der vorliegenden Dokumentation werden folgende Symbole und Formatierungen verwendet:

1	Anweisungsschritt Führen Sie diese Schritte nacheinander aus.
Methode	Dialogtext, Parameter in der Software
Datei ▶ Neu ▶	Menü bzw. Menüpunkt
[Weiter]	Schaltflächen oder Tasten
	Hinweis Dieses Zeichen markiert zusätzliche Informationen und Ratschläge.



2 Konfiguration

Die via USB-Anschluss mit dem PC verbundenen Metrohm-Geräte werden beim Programmstart automatisch erkannt, ebenso die an MSB-Anschlüssen von USB-Geräten angeschlossenen Geräte (Dosinos, Rührer, Pumpen, Remote Box). Metrohm-Geräte und Fremdgeräte, die via RS232-Anschluss mit dem PC verbunden sind, müssen manuell zur Gerätetabelle hinzugefügt werden.

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

- Geräte (850 Professional IC, 858 Professional Sample Processor etc.)
- Säulen
- Eluenten
- Zubehör (Pumpschläuche, Pumpschlauchverbindungen etc.)
- Lösungen
- Common Variablen
- Rackdaten

2.1 Software starten



Hinweis

Geräte und 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 Anwendername und Passwort eingeben und **[OK]** anklicken.
- 3 Das Symbol **[Konfiguration]** anklicken.

Das Dialogfenster des Programms **Konfiguration** wird geöffnet. Es können insgesamt sieben Unterfenster angezeigt werden:



Geräte	Anzeige der automatisch erkannten und manuell hinzugefügten Geräte.
Säulen	Anzeige der Daten der automatisch erkannten und manuell aufgenommenen Säulen.
Eluent	Anzeige der Daten der Eluenten.
Zubehör	Anzeige der Daten des automatisch erkannten und manuell hinzugefügten Zubehörs.
Lösungen	Anzeige der Daten von automatisch erkannten Lösungen in einer Dosiereinheit und Lösungen, die manuell hinzugefügt wurden.
Rackdaten	Anzeige der Daten der automatisch erkannten Metrohm-Probenracks und manuell importierter Metrohm-Probenracks.
Common Variablen	Anzeige der Daten aller Common Variablen.

2.2 Geräte konfigurieren

Um den **850 Professional IC Anion MCS** das erste Mal zu starten, gehen Sie wie folgt vor:



850 Professional IC anschliessen

1 Gerät anschliessen

Das Gerät mit einem USB-Kabel am PC anschliessen.

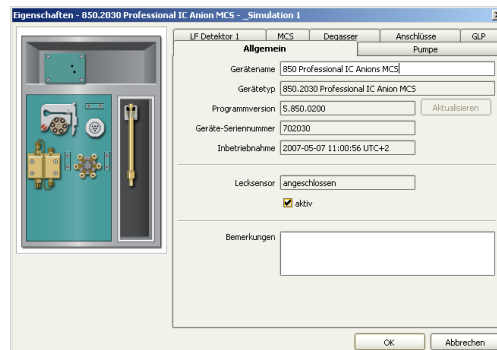
2 Gerät einschalten

Die Geräteparameter des **850 Professional IC Anion MCS** werden automatisch erkannt.



3 Gerät in Tabelle speichern

Die Meldung mit **[Ja]** bestätigen.



4 Eigenschaften prüfen

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

Der **850 Professional IC Anion MCS** 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 **850 Professional IC Anion MCS** doppelklicken.
- Die Registerkarte **Allgemein** wählen.
- Im Feld **Gerätenamen** den neuen Namen eintragen.
- Das Dialogfenster mit **[OK]** schliessen.

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

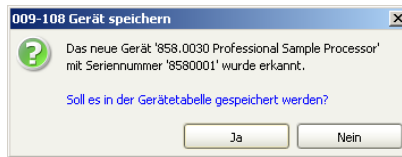
858 Professional Sample Processor anschliessen

1 Gerät anschliessen

Das Gerät mit einem USB-Kabel am PC anschliessen.

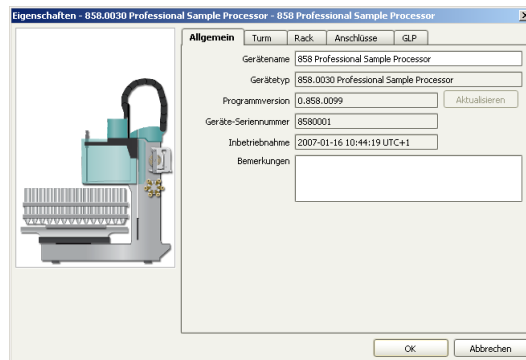
2 Gerät einschalten

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



3 Gerät in Tabelle speichern

Die Meldung mit **[Ja]** bestätigen.



4 Rackparameter definieren

- Die Registerkarte **Rack** wählen.
Im Feld **Rackname** ist die Nummer des Racks eingetragen.
- Die Schaltfläche **[Rackdaten]** anklicken.
- Die Registerkarte **Liftpositionen** wählen.
- Im Feld **Arbeitsposition** den Wert **125** eintragen.
- Die Registerkarte **Spezialbecher** wählen.
- **[Bearbeiten]** anklicken und das Dialogfenster **Spezialbecher 1** öffnen.
- Im Feld **Rackposition** den Wert **11** eintragen.

- Im Feld **Arbeitsposition Turm 1** den Wert **125** eintragen.

Alle Dialogfenster mit **[OK]** schliessen.

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

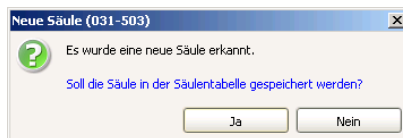
2.3 Säule konfigurieren

Säule mit Chip

Eine installierte Säule wird beim Anschluss des IC Gerätes 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 Meldung mit **[Ja]** bestätigen.

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



3 Registerkarte Säule editieren

Im Dialogfeld **Säule - Metrosep A Supp 5** auf der Registerkarte **Säule** in das Feld **Säulenname** den Namen **A Supp 5** eintragen.

4 Registerkarte Eigenschaften editieren

Die Parameter der verwendeten Säule (max. Druck, max. Fluss etc.) sind bereits eingetragen.

The screenshot shows the 'Säule - Metrosep A Supp 5' dialog box with the 'Eigenschaften' tab selected. The dialog is divided into several sections:

- Maximalwerte für Betrieb:**
 - Druck: Maximalwert 15.00 MPa, Höchster gemessener Wert 0.00 MPa
 - Fluss: 0.8 mL/min, 0.0 mL/min
- Empfohlene Werte für Betrieb:**
 - Standardfluss: 0.7 mL/min
 - Standard-Injektionsvolumen: 20.0 µL
 - Standardtemperatur: 25 °C
 - Standardeluent: 1.0 mM NaHCO₃ / 3.2 mM Na₂CO₃
 - pH-Bereich: 3.0 - 12.0
- Technische Daten:**
 - Innendurchmesser: 4.0 mm
 - Länge: 100.0 mm
 - Partikelgröße: 5 µm

Buttons for 'OK' and 'Abbrechen' are at the bottom right.

5 Registerkarte Vorsäule editieren

Das Kontrollkästchen **Vorsäule verwenden** aktivieren.

Gleichzeitig mit der Aktivierung wird definiert, dass die Vorsäule zusammen mit der Säule überwacht wird.

6 Registerkarte Überwachung



Hinweis

Diese Registerkarte ist nur bei automatisch erkannten Säulen mit Chip vorhanden.

- In das Feld **Bestimmungen** den Wert **500** (Beispiel) eintragen und das Kontrollkästchen **Überwachung** aktivieren.
- In das Feld **Betriebsstunden** den Wert **72** (Beispiel) eintragen und das Kontrollkästchen **Überwachung** aktivieren.
- Für die **Bestimmungen** und die **Betriebsstunden** der **Vorsäule** dieselben Grenzwerte eintragen wie für die Säule, und die Kontrollkästchen für deren Überwachung aktivieren.
Die Vorsäule wird analog der Säule überwacht.
- Im Bereich **Meldung** das Kontrollkästchen **Akustisches Signal** aktivieren.

Säule ohne Chip

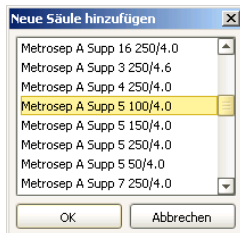
Falls Sie eine Säule ohne Chip verwenden, muss sie zuerst konfiguriert werden. Verwenden Sie dazu das Menü **[Bearbeiten]** im Unterfenster **Säulen**. Bei bekannten Säulen werden einige Parameter automatisch eingetragen, bei unbekanntem Säulen müssen



diese Parameter dem Säulenmerkblatt entnommen und eingetragen werden.

1 Säule hinzufügen

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



2 Säule auswählen

Die Säule **Metrosep A Supp 5** in der Liste markieren und **[OK]** anklicken.

Das Dialogfenster **Säule - Metrosep A Supp 5** wird geöffnet.

3 Säule bearbeiten



Hinweis

Bei Metrohm-Säulen muss nur der Name eingegeben werden.

- Registerkarte **Säule** wählen
- Im Feld **Säulenname** den Namen **Metrosep A Supp 5** eintragen.

- Im Feld **Inbetriebnahme** auf die Schaltfläche klicken und das Datum der Inbetriebnahme auswählen. Die Felder **Säulentyp** und **Bestellnummer** werden bei bekannten Säulen automatisch ausgefüllt. Die Einträge in den Feldern **Seriennummer**, **Batch-Nummer** und **Kommentar** sind optional.

4 Registerkarte **Eigenschaften** editieren

Bei bekannten Säulen sind die Werte für Druck, Fluss etc. automatisch eingetragen. Bei unbekanntem Säulen müssen die Werte dem Säulenmerkblatt entnommen und eingetragen werden.

5 Registerkarte **Vorsäule** editieren

Bei bekannten Säulen sind die Felder automatisch ausgefüllt. Bei unbekanntem Säulen müssen die Werte dem Säulenmerkblatt entnommen und eingetragen werden.

Um das Datum der Inbetriebnahme einzutragen gehen Sie wie folgt vor:

- Die Registerkarte **Vorsäule** wählen.
- Das Kontrollkästchen **Vorsäule** aktivieren.
- Die Schaltfläche des Feldes **Inbetriebnahme** anklicken.
- Das Datum auswählen und **[OK]** anklicken.

6 Registerkarte **GLP** editieren (optional)

Diese Registerkarte muss nur bearbeitet werden, wenn eine Überwachung nach GLP-Regeln erforderlich ist.

- Die Registerkarte **GLP** wählen.
- Im Feld **Datum GLP-Test** auf die Schaltfläche klicken und das Datum des letzten GLP-Tests auswählen.



- Das Kontrollkästchen **GLP-Gültigkeit überwachen** aktivieren.
- Im Feld **Intervall GLP-Test** den Wert **100** eintragen
Das Datum des nächsten GLP-Tests wird automatisch in das Feld **Nächster GLP-Test** eingetragen.
- Im Bereich **Meldung** das Kontrollkästchen **Akustisches Signal** aktivieren.
- Im Bereich **Aktion** die Option **Meldung anzeigen** aktivieren.
- Durch Klicken auf **[OK]** das Dialogfenster schliessen.

2.4 Eluent definieren

Eluents werden im Unterfenster **Eluent** definiert.

- 1 Über das Menü **Bearbeiten ► Neu...** das Dialogfenster **Eluent** öffnen.

- 2 **Eluenteigenschaften**

- Registerkarte **Eluent** wählen.
- Folgende Einträge machen:

Feld	Eintrag
Eluentnamen	Std-ASUPP5
Bestellnummer	optional
Hersteller	optional
Batchnummer	optional
Zusammensetzung	3.2mmol/L Natrium carbonate, 1.0mmol/L Natrium hydrogencarbonate
Kommentar	optional

The screenshot shows a software window titled "Eluent - Std-ASUPPS". It has two tabs: "Überwachung" (active) and "GLP". The "Überwachung" tab contains the following fields:

- Eluentname: Std-ASUPPS
- Bestellnummer: (empty)
- Hersteller: Metrohm
- Batch-Nummer: (empty)
- Zusammensetzung: 3,2mmol/L Natrium Carbonate
1,0mmol/L Natrium Hydrogen-carbonate
- Kommentar: (empty text area)

At the bottom of the window are two buttons: "OK" and "Abbrechen".

3 Registerkarte **Überwachung** editieren

- Die Registerkarte **Überwachung** wählen.
- Das Datum der Inbetriebnahme wird bei der Eingabe des Eluents automatisch eingetragen.
- Das Kontrollkästchen **Eluent überwachen** aktivieren.
- Im Feld **Nutzungsdauer** den Wert **30** eintragen (die Nutzungsdauer ist abhängig vom Eluent).
Beim Klicken auf die Schaltfläche [...] wird das Datum automatisch in das Feld **Verfallsdatum** eingetragen.
- Im Bereich **Meldung** das Kontrollkästchen **Akustisches Signal** aktivieren.
- Im Bereich **Aktion** die Option **Meldung anzeigen** aktivieren.



- Durch Klicken auf **[OK]** das Dialogfenster schliessen.

4 Registerkarte **GLP** editieren (optional)

- Die Registerkarte **GLP** wählen.
- Im Feld **Datum GLP-Test** die Schaltfläche anklicken und das Datum des letzten GLP-Tests auswählen.
- Das Kontrollkästchen **GLP-Gültigkeit überwachen** aktivieren.
- Im Feld **Intervall GLP Test** den Wert **100** eintragen. Beim Klicken auf die Schaltfläche wird das Datum automatisch in das Feld **Nächster GLP-Test** eingetragen.
- Im Bereich **Meldung** das Kontrollkästchen **Akustisches Signal** aktivieren.
- Im Bereich **Aktion** die Option **Meldung anzeigen** aktivieren.

- [OK] anklicken und das Dialogfenster **Eluent Std ASUPP5** schließen.

2.5 Lösungen anlegen

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

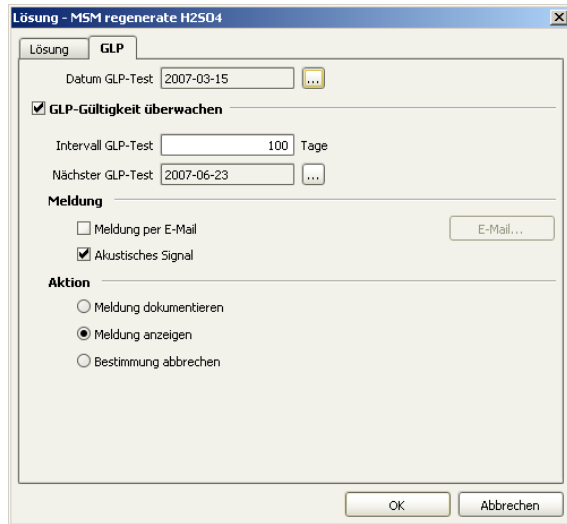
- 1 Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** das Dialogfenster **Lösung** öffnen.
- 2 Registerkarte **Lösung** editieren
 - Im Feld **Lösungsnamen** den Namen **H₂O** eintragen.
 - Im Feld **Konzentration** den Konzentrationswert **1** eintragen und im Listenfeld die Konzentrationseinheit **mol/L** auswählen.



- Im Feld **Herstellungsdatum** die Schaltfläche anklicken.
- Das Datum auswählen und **[OK]** anklicken.
- Das Kontrollkästchen **Lösung überwachen** aktivieren.
- Im Feld **Nutzungsdauer** den Wert **100** eintragen.
Beim Klicken auf die Schaltfläche wird das Datum automatisch in das Feld **Verfallsdatum** eingetragen.
- Im Bereich **Meldung** das Kontrollkästchen **Akustisches Signal** aktivieren.
- Im Bereich **Aktion** die Option **Meldung anzeigen** aktivieren.
- Durch Klicken auf **[OK]** das Dialogfenster schliessen.

3 Registerkarte GLP editieren (optional)

- Die Registerkarte **GLP** wählen.
- Im Feld **Datum GLP-Test** die Schaltfläche anklicken und das Datum des letzten GLP-Tests auswählen.
- Das Kontrollkästchen **GLP-Gültigkeit überwachen** aktivieren.
- Im Feld **Intervall GLP Test** den Wert **100** eintragen.
Beim Klicken auf die Schaltfläche wird das Datum automatisch in das Feld **Verfallsdatum** eingetragen.
- Im Bereich **Meldung** das Kontrollkästchen **Akustisches Signal** aktivieren.
- Im Bereich **Aktion** die Option **Meldung anzeigen** aktivieren.



- [OK] anklicken und das Dialogfenster **Lösung** schliessen.

Die zweite Lösung mit dem Namen **MSM regenerate H₂SO₄** wird auf die gleiche Art eingetragen.

2.6 Zubehör anlegen

Zubehör muss immer manuell angelegt und konfiguriert werden. Die einzelnen Schritte werden im Unterfenster **Zubehör** ausgeführt.

Es werden zwei Pumpschläuche und eine Pumpschlauchverbindung mit Sicherung und Filter hinzugefügt. Die Pumpschlauchverbindung mit Inline Filter wird verwendet, um die Trennsäule und den Suppressor vor eventuellen Verunreinigungen aus dem Eluenten oder der Spüllösung zu schützen.



Neues Zubehör anlegen

- 1 Über das Menü **Bearbeiten ▶ Neu** das Dialogfenster **Zubehör** öffnen.
- 2 Auf der Registerkarte **Zubehör** im Feld **Zubehörnamen** den Namen **Pumpschlauch H₂O** eintragen.
- 3 Die Nummer **6.1826.320** im Feld **Bestellnummer** eintragen.

The screenshot shows a dialog window titled 'Zubehör' with a close button in the top right corner. Inside the dialog, there are three tabs: 'Zubehör', 'Überwachung', and 'GLP'. The 'Zubehör' tab is currently selected. Below the tabs, there are four input fields: 'Zubehörname' with the text 'Pumpschlauch H2O', 'Bestellnummer' with '6.1826.320', 'Hersteller' which is empty, and 'Kommentar' which is empty. At the bottom of the dialog, there are two buttons: 'OK' and 'Abbrechen'.

- 4 Die Registerkarte **Überwachung** wählen.

- 5 Das Kontrollkästchen **Zubehör überwachen** aktivieren.
- 6 Im Feld **Nutzungsdauer** den Wert **30** eingeben.
- 7 Im Feld **Verfallsdatum** auf die Schaltfläche klicken.
Das Verfallsdatum wird automatisch eingetragen.
- 8 Im Bereich **Meldung** das Kontrollkästchen **Akustisches Signal** aktivieren.
- 9 Im Bereich **Aktion** die Option **Meldung anzeigen** auswählen

Zubehör -

Zubehör **Überwachung** GLP

Inbetriebnahme 2007-05-03

Zubehör überwachen

Nutzungsdauer Tage

Verfallsdatum 2007-06-02

Meldung

Meldung per E-Mail

Akustisches Signal

Aktion

Meldung dokumentieren

Meldung anzeigen

Bestimmung abbrechen

OK Abbrechen



Die Schritte **1** bis **9** werden wiederholt, um einen zweiten Pumpschlauch und eine Pumpschlauchverbindung hinzuzufügen. Der Zubehörname des zweiten Schlauchs ist **Pumpschlauch H₂SO₄**. Die **Pumpschlauchverbindung mit Sicherung und Filter** hat die Bestellnummer **6.2821.120**.

3 Methode erstellen

Eine Methode ist eine Ablaufvorschrift zur Bearbeitung einer Probe. Sie umfasst alle Bestandteile, die nötig sind um ein Chromatogramm aufzunehmen. Dazu gehören:

- Geräte und deren Startparameter
- Zeitprogramm
- Parameter für die Auswertung der Chromatogramme
- Resultatdefinitionen

Die Methode in diesem Tutorial wird anhand einer in **Magic Net** vordefinierten Methodenvorlage erstellt. Eine Methodenvorlage enthält die Komponentennamen, deren Retentionszeiten, die Messgröße (Fläche oder Höhe) für die Auswertung der Peaks und die Art, nach der die Kalibrierkurve gefittet wird.

3.1 Methode für manuelle Injektion

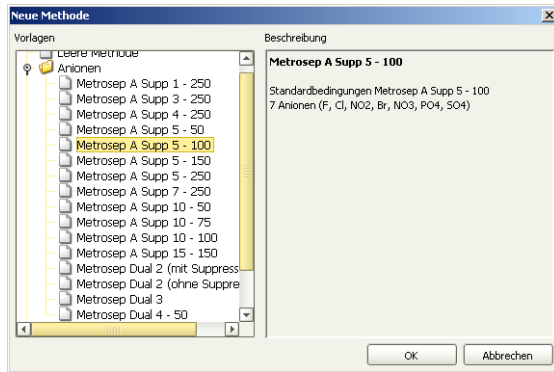
3.1.1 Neue Methode erstellen

Methode erstellen



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

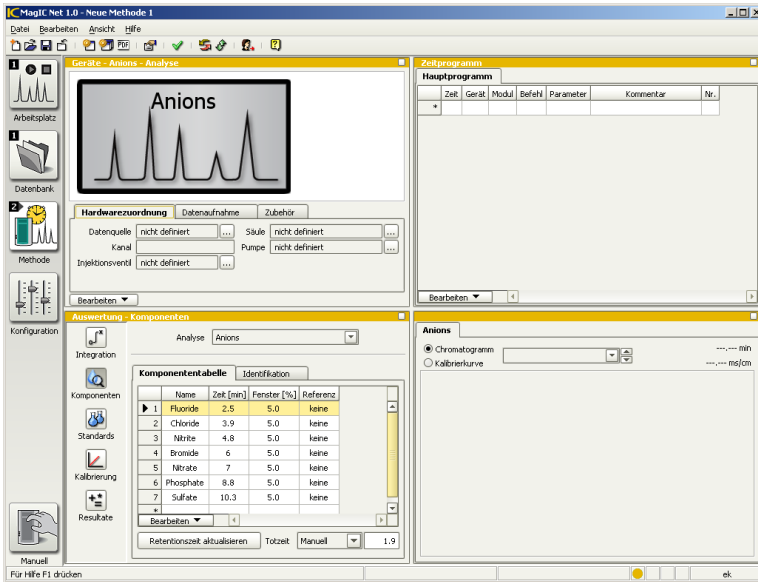
2 Über das Menü **Datei ▶ Neu...** das Dialogfenster **Neue Methode** öffnen.



- 3 Unter **Vorlagen**, im linken Teil des Fensters, **Anionen** ► **Metrosep A Supp 5 - 100** markieren und mit **[OK]** bestätigen.

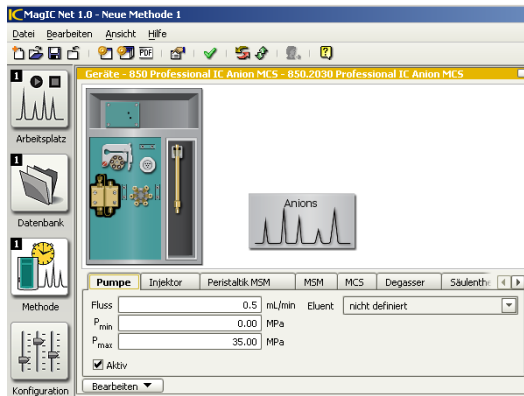
Die Methodenvorlage wird geöffnet.

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



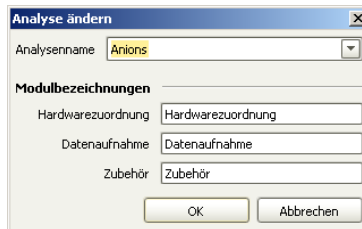
Der Programmteil **Methode** hat insgesamt vier Unterfenster:

- 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**.
- 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.

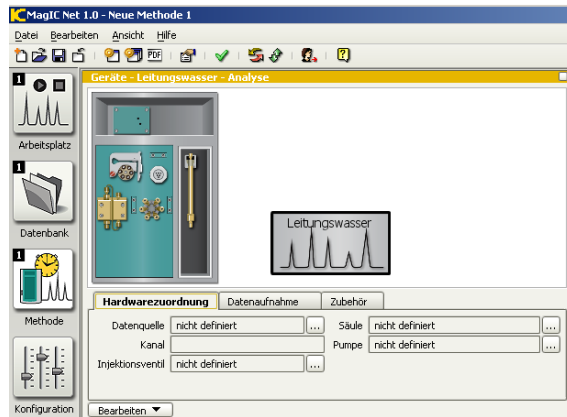


Analysennamen ändern (optional)


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



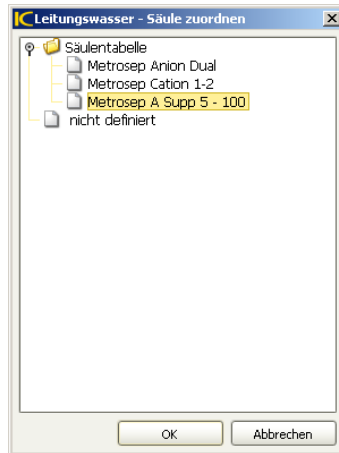
- 3 Im Feld **Analysennamen** den neuen Namen **Leitungswasser 1** eintragen und mit **[OK]** bestätigen.



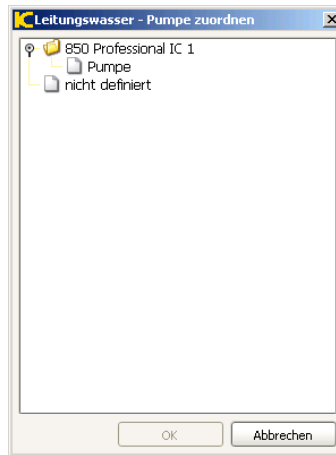
Parameter für Analyse definieren

- 1 Das Symbol **Leitungswasser** anklicken.
- 2 **Registerkarte Hardwarezuordnung editieren**
 - Die Registerkarte **Hardwarezuordnung** wählen.
 - Im Feld **Datenquelle** auf die Schaltfläche  klicken.
 - Im Dialogfenster **Leitungswasser-Datenquelle zuordnen** unter **850 Professional IC Anion MCS > LF Detektor 1** den Eintrag **Leitfähigkeit** markieren und **[OK]** anklicken.
 - Im Feld **Kanal** wird automatisch **Leitfähigkeit** eintragen.
 - Im Feld **Injektionsventil** auf die Schaltfläche  klicken.
 - Im Dialogfenster **Leitungswasser-Injektionsventil zuordnen** unter **850 Professional IC Anion MCS** den Eintrag **Injektor** markieren und **[OK]** anklicken.
 - Im Feld **Säule** auf die Schaltfläche  klicken.

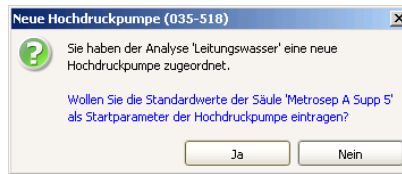
- Im Dialogfenster **Leitungswasser-Säule zuordnen** unter **Säulentabelle** den Eintrag **Metrosep A Supp 5** markieren und **[OK]** anklicken.



- Im Feld **Pumpe** auf die Schaltfläche klicken.
- Im Dialogfenster **Leitungswasser-Pumpe zuordnen** unter **850 Professional IC Anion MCS** den Eintrag **Pumpe** markieren und **[OK]** anklicken.



- Die Meldung **Neue Hochdruckpumpe** mit **[Ja]** bestätigen.



3 Registerkarte Datenaufnahme editieren

- Die Registerkarte **Datenaufnahme** wählen.
- Im Feld **Aufnahmedauer** eine Zeit von **15** min eintragen.

4 Registerkarte Zubehör editieren

- Die Registerkarte **Zubehör** wählen.
- Auf die Schaltfläche **[Hinzufügen]** klicken.
- In der Auswahlliste des Dialogfensters **Zubehör hinzufügen** den Pumpschlauch H₂O auswählen.

- **[OK]** anklicken.

Der Pumpschlauch wird in die Zubehörtabelle eingetragen. Der Pumpschlauch H₂SO₄ und die Pumpschlauchverbindung werden auf die gleiche Art der Tabelle hinzugefügt.

Parameter für IC-Gerät definieren

- 1 Die Abbildung des **850 Professional IC Anion MCS** anklicken.

Die Registerkarten der Module des **850 Professional IC Anion MCS** erscheinen und können editiert werden.

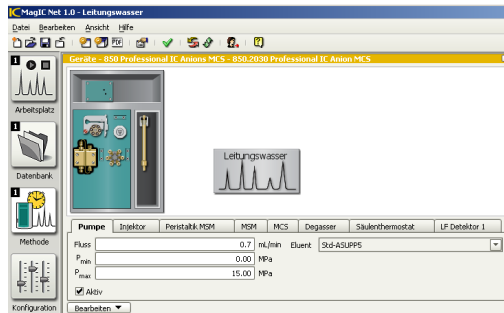


Hinweis

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

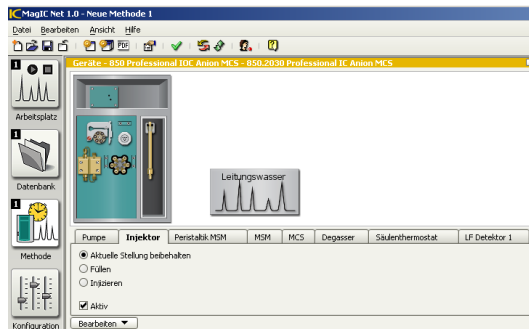
- 2 **Registerkarte Pumpe editieren**

- Registerkarte **Pumpe** wählen (oder auf das Symbol der Pumpe klicken).
- Die Werte der Felder **Fluss**, **P_{min}** und **P_{max}** werden automatisch eingelesen.
- In der Auswahlliste **Eluent** den vorher definierten Eluenten **Std-ASUPP5** wählen.



3 Registerkarte Injektor editieren

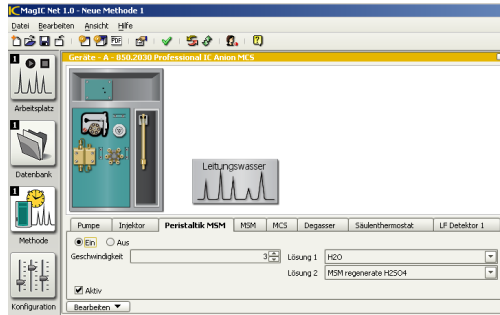
- Die Registerkarte **Injektor** wählen (oder auf das Symbol des Injektors klicken).
- Die Standardeinstellungen übernehmen.



4 Registerkarte Peristaltik MSM editieren

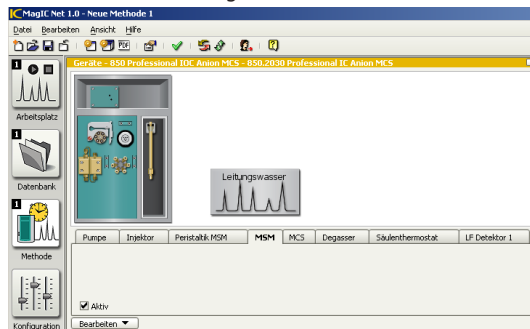
- Die Registerkarte **Peristaltik MSM** wählen (oder auf das Symbol des Peristaltik MSM klicken).
- Die Option **Ein** aktivieren.
- Im Feld **Geschwindigkeit** den Wert **3** übernehmen. (Es gibt 7 Geschwindigkeitsstufen, mit 6 Umdrehungen/min pro Stufe.)

- In der Auswahlliste **Lösung 1** die Lösung **H₂O** wählen.
- In der Auswahlliste **Lösung 2** die Lösung **MSM regenerierte H₂SO₄** wählen.



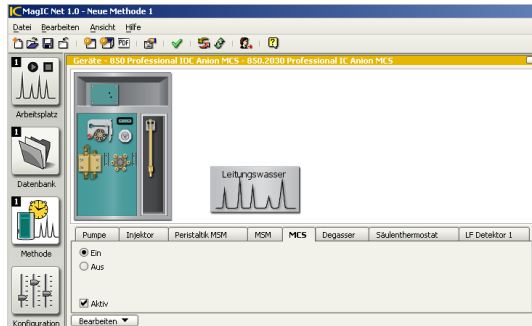
5 Registerkarte MSM editieren.

- Die Registerkarte **MSM** wählen (oder auf das Symbol des MSM klicken).
- Die Standardeinstellung übernehmen.



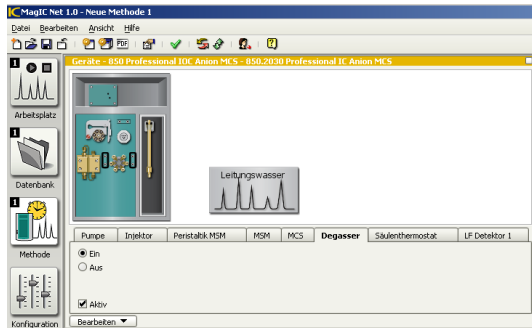
6 Registerkarte MCS editieren.

- Die Registerkarte **MCS** wählen (oder auf das Symbol des MCS klicken).
- Die Standardeinstellungen übernehmen.



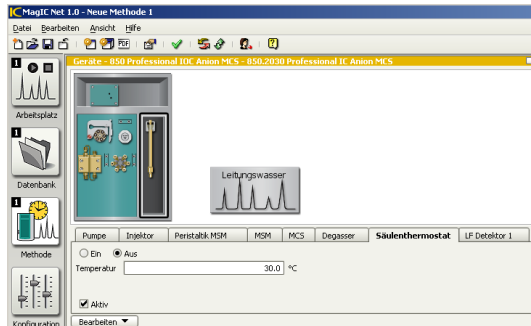
7 Registerkarte Degasser editieren.

- Die Registerkarte **Degasser** wählen (oder auf das Symbol des Degassers klicken).
- Die Standardeinstellungen übernehmen.



8 Registerkarte Säulenthermostat editieren.

- Die Registerkarte **Säulenthermostat** wählen (oder auf das Symbol des Säulenthermostats klicken).
- Die Standardeinstellungen übernehmen.



9 Registerkarte LF Detektor 1 editieren.

- Die Registerkarte **LF Detektor 1** wählen (oder auf das Symbol des LF Detektors klicken).
- Die Standardeinstellungen übernehmen.

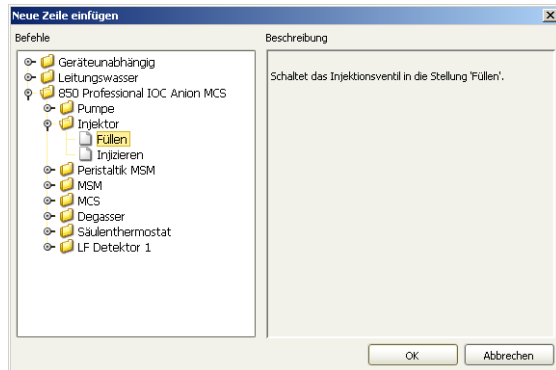
3.1.3 Zeitprogramm

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 Programmteils **Methode**.

Zeitprogramm definieren

1 Injektionsventil auf Füllen schalten

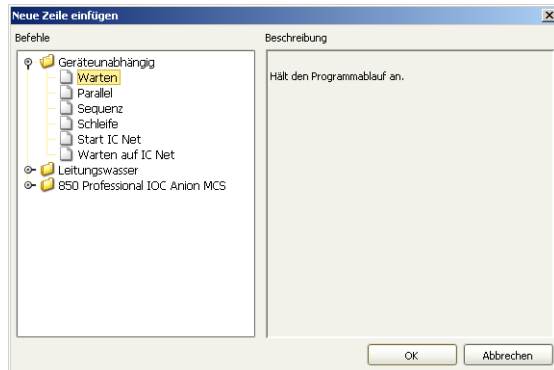
- Über das Menü **Bearbeiten** ► **Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile hinzufügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **850 Professional IC Anion MCS** ► **Injektor** ► **Füllen** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.
Das Dialogfenster **850 Professional IC Anion MCS - Injektor - Füllen** wird geöffnet.
- Die Zeitangabe **0** min übernehmen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

2 MSM weiterschalten

- Über das Menü **Bearbeiten ▶ Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile hinzufügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **850 Professional IC Anion MCS ▶ MSM ▶ Weiterschalten** wählen.

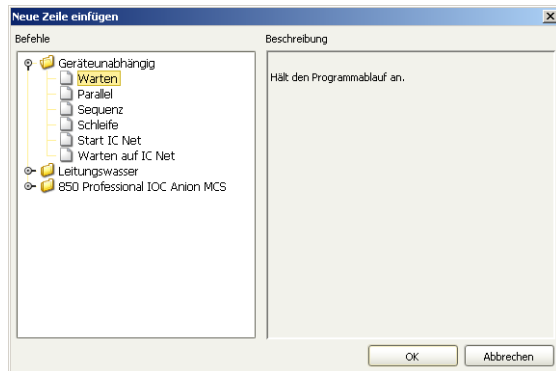



- Mit **[OK]** bestätigen.
Das Dialogfenster **850 Professional IC Anion MCS - MSM - Weiterschalten** wird geöffnet.
- Die Zeitangabe **0** min übernehmen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

3 Programm unterbrechen

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

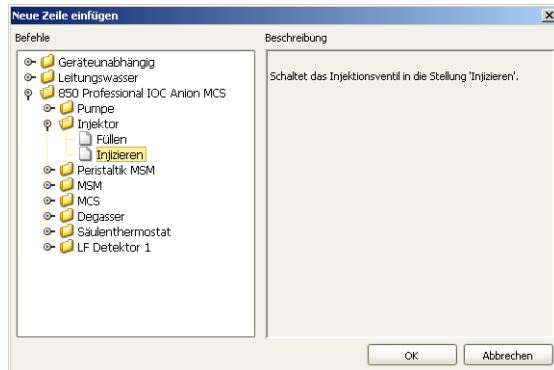
- Über das Menü **Bearbeiten ▶ Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile hinzufügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **Geräteunabhängig ▶ Warten** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.
Das Dialogfenster **Warten** wird geöffnet.
- Die Option **Programm anhalten und warten auf [Weiter]** markieren.
- Die Schaltfläche  anklicken und einen Text für die Meldung eingeben.
- Zweimal mit **[OK]** bestätigen.

4 Injektionsventil auf Injizieren schalten

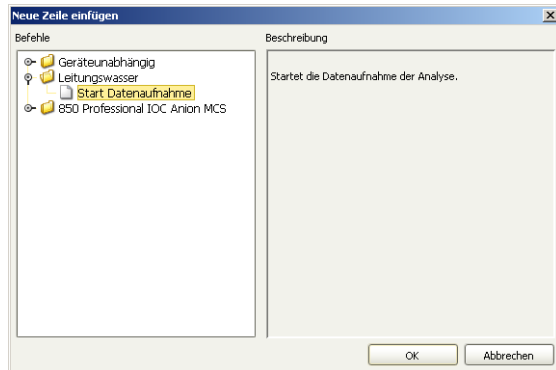
- Über das Menü **Bearbeiten ▶ Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile hinzufügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **850 Professional IC Anion MCS ▶ Injektor ▶ Injizieren** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.
Das Dialogfenster **850 Professional IC Anion MCS - Injektor - Injizieren** wird geöffnet.
- Die Zeitangabe **0** min übernehmen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

5 Datenaufnahme starten

- Über das Menü **Bearbeiten ▶ Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile hinzufügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **850 Professional IC Anion MCS ▶ Leitungswasser ▶ Start Datenaufnahme** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.
Das Dialogfenster **850 Professional IC Anion MCS - Leitungswasser - 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:

Zeitprogramm						
Hauptprogramm						
Zeit	Gerät	Modul	Befehl	Parameter	Kommentar	
0.0	850 Professional IOC Anion MCS	Injektor	Füllen			
0.0	850 Professional IOC Anion MCS	MSM	Weiterschalten			
			Warten	Manuell weiter		
0.0	850 Professional IOC Anion MCS	Injektor	Injizieren			
▶ 0.0	Leitungswasser		Start Datenaufnahme			
*						

3.1.4 Auswertung

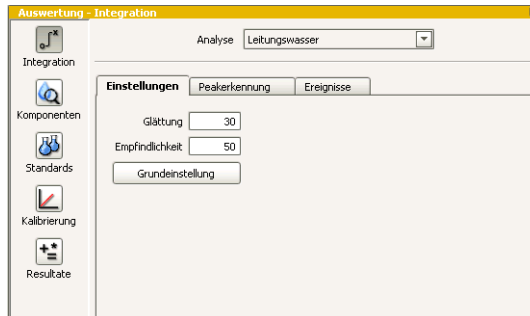
Im Unterfenster **Auswertung** werden die Parameter zur Auswertung der Chromatogramme definiert. Jede Analyse besitzt einen eigenen Satz von Auswerteparametern.

Integration

Die Integrationsparameter sind in der Methodenvorlage definiert.



- 1 Die Schaltfläche **Integration** anklicken.



In der Auswahlliste **Analyse** ist automatisch der Analysenname **Leitungswasser** eingetragen.

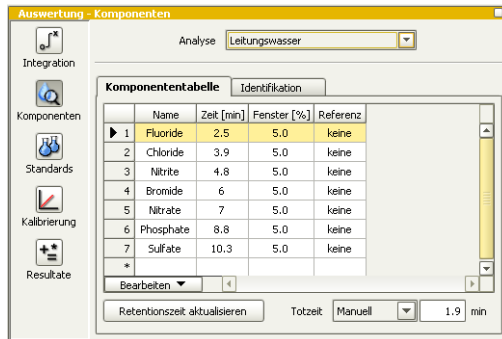
Die Einträge auf den Registerkarten **Einstellungen**, **Peakerkennung** und **Ereignisse** werden übernommen.

Komponenten

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



- 1 Die Schaltfläche **Komponenten** anklicken.



- Die Einträge auf den Registerkarten **Komponententabelle** und **Identifikation** werden übernommen.

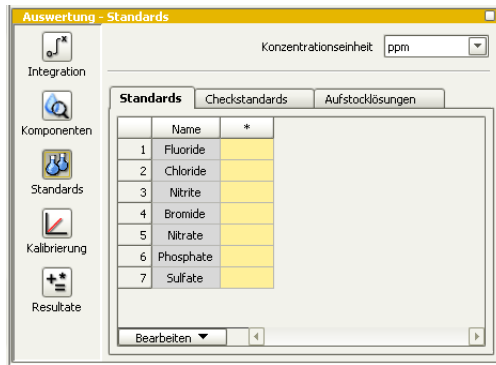
Standards

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

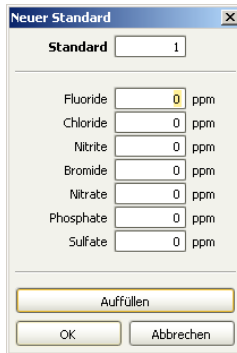


- Auf die Schaltfläche **Standards** klicken.

In der Standardtabelle sind alle Komponenten aufgelistet, die in der Methodenvorlage definiert sind.



- 2 Im Feld **Konzentrationseinheit** die Option **ppm** wählen.
- 3 Auf der Registerkarte **Standards** über das Menü **Bearbeiten** ► **Neu** das Dialogfenster **Neuer Standard** öffnen.



- 4 Im Feld **Fluorid** den Konzentrationswert **0.5** eintragen. In den Feldern **Chlorid** und **Nitrit** als Wert jeweils **1**, und in den Feldern **Bromd**, **Nitrat**, **Phosphat** und **Sulfat** jeweils den Wert **5** eingeben.



5 [OK] anklicken.

6 Die Schritte **3** bis **5** für die Eingabe der Konzentrationen in Standard 2 und in 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:

Auswertung - Standards					
					Konzentrations Einheit: ppm
Standards					
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		

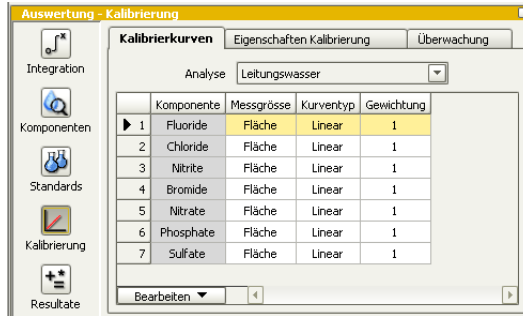
Kalibrierung

Die Kalibrierung wird nach der Methode der externen Standards durchgeführt. Die Peakflächen in einer unbekannt Probe werden mit den Peakflächen der Komponenten einer Standardlösung mit bekannten Konzentrationen verglichen. Die Kalibriermethode ist in der Methodenvorlage festgelegt.



1 Die Schaltfläche **Kalibrierung** anklicken.

2 Die Registerkarte **Kalibrierkurve** auswählen.



In der Methodenvorlage sind die Komponentennamen, die Messgröße, der Kurventyp und die Gewichtung vorgegeben. Die Tabelle kann zeilenweise editiert werden, entweder über das Menü **Bearbeiten ► Bearbeiten** oder mit einem Doppelklick auf eine Zeile, der das Dialogfenster **Kalibrierkurve** der entsprechenden Komponente öffnet.

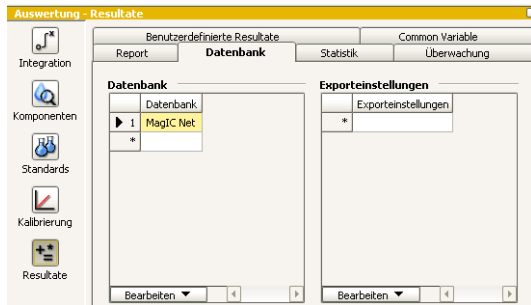
Resultate

Die Resultate der Bestimmungen werden in der Standarddatenbank **MagIC** abgelegt (weitere Datenbanken können definiert werden). Ausserdem können Sie angeben, dass ein Report ausgegeben werden soll, wenn die Auswertung beendet ist.



1 Resultate in Datenbank ablegen

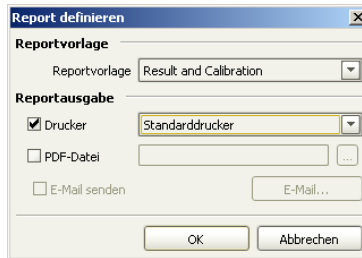
- Die Schaltfläche **Resultate** anklicken.



- Die Registerkarte **Datenbank** auswählen.
- Im Bereich **Datenbank** die Datenbank wählen, in der die Bestimmungsdaten abgelegt werden sollen. Standardmässig ist die Datenbank **MagIC Net** angegeben.

2 Resultate ausdrucken

- Die Registerkarte **Report** auswählen.
- Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** das Dialogfenster **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.



- Mit **[OK]** bestätigen.

Sie haben auch die Möglichkeit, eine eigene Reportvorlage zu erstellen (*siehe Kapitel 5.4*).

3.1.5 Methode speichern

Methode speichern

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

- 1 Über das Menü **Datei ▶ Speichern unter...** das Dialogfenster **Methode speichern** öffnen.
- 2 Im Feld **Methodenname** als Name für die Methode **Leitungswasser** eingeben.
- 3 **[Speichern]** anklicken.

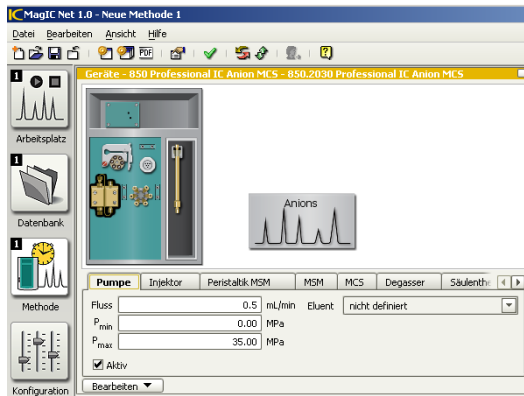
3.2 Methode mit Sample Processor

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 Neue Methode erstellen

(*siehe Kapitel 3.1.1*)

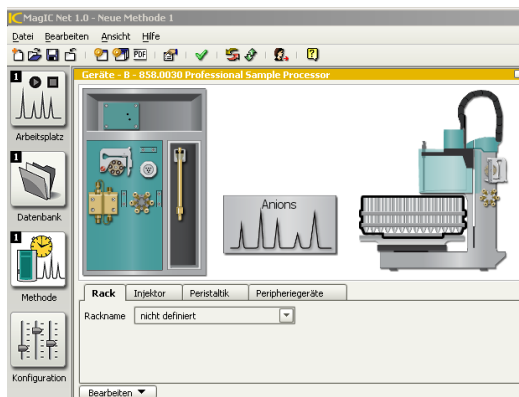


- 4 Im Unterfenster **Geräte** das Menü **Bearbeiten** ► **Hinzufügen** ► **Geräte** anklicken.
- 5 Im Dialogfenster **Geräte hinzufügen** die Option **Aus Gerätetabelle** wählen.
- 6 Im Feld **Name** das Gerät **858 Professional Sample Processor** auswählen und **[OK]** anklicken.



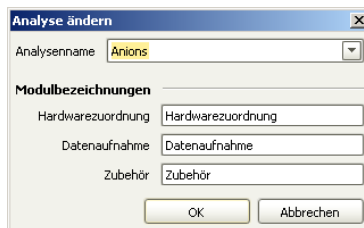


Im oberen Teil des Unterfensters **Geräte** erscheint die Abbildung des **858 Professional Sample Processors**.

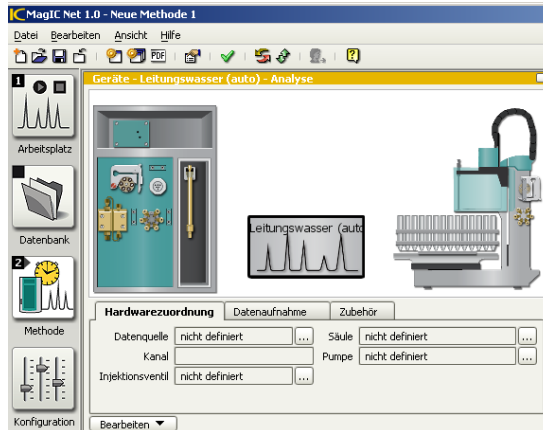


Analysenamen ändern (optional)

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



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

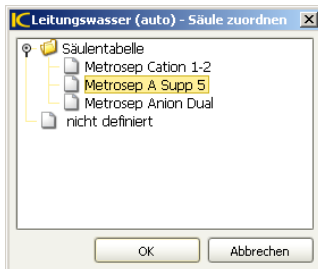


Parameter für Analyse definieren

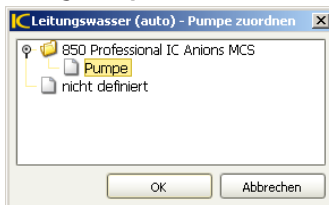
- 1 Das Symbol **Leitungswasser (auto)** anklicken.
- 2 **Registerkarte Hardwarezuordnung editieren**
 - Die Registerkarte **Hardwarezuordnung** wählen.
 - Im Feld **Datenquelle** auf die Schaltfläche klicken.
 - Im Dialogfenster **Leitungswasser (auto)-Datenquelle zuordnen** unter **850 Professional IC Anion MCS ▶ LF Detektor 1** den Eintrag **Leitfähigkeit** markieren und **[OK]** anklicken.
 - Im Feld **Kanal** wird automatisch **Leitfähigkeit** eingetragen.
 - Im Feld **Injektionsventil** auf die Schaltfläche klicken.



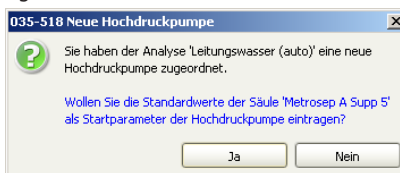
- Im Dialogfenster **Leitungswasser (auto)-Injektionsventil zuordnen** unter **850 Professional IC Anion MCS** den Eintrag **Injektor** markieren und **[OK]** anklicken.
- Im Feld **Säule** auf die Schaltfläche klicken.
- Im Dialogfenster **Leitungswasser (auto)-Säule zuordnen** unter **Säulentabelle** den Eintrag **Metrosep A Supp 5** markieren und **[OK]** anklicken.



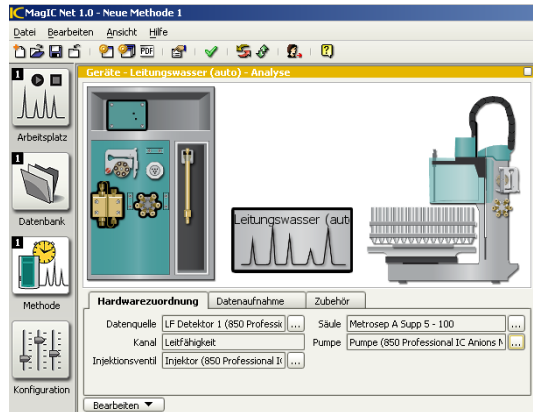
- Im Feld **Pumpe** auf die Schaltfläche klicken.
- Im Dialogfenster **Leitungswasser (auto)-Pumpe zuordnen** unter **850 Professional IC Anions MCS** den Eintrag **Pumpe** markieren und **[OK]** anklicken.



- Die Meldung **Neue Hochdruckpumpe** mit **[Ja]** bestätigen.



Die Registerkarte **Hardwarezuordnung** sieht wie folgt aus:



3 Registerkarte Datenaufnahme editieren

- Die Registerkarte **Datenaufnahme** wählen.
- Im Feld **Aufnahmedauer** eine Zeit von **15** min eintragen.

4 Registerkarte Zubehör editieren

- Die Registerkarte **Zubehör** wählen.
- Auf die Schaltfläche **[Hinzufügen]** klicken.
- In der Auswahlliste des Dialogfensters **Zubehör hinzufügen** den Pumpschlauch H₂O auswählen.
- **[OK]** anklicken.

Der Pumpschlauch wird in die Zubehörtabelle eingetragen. Der Pumpschlauch H₂SO₄ und die Pumpschlauchverbindung werden der Tabelle auf die gleiche Art hinzugefügt.

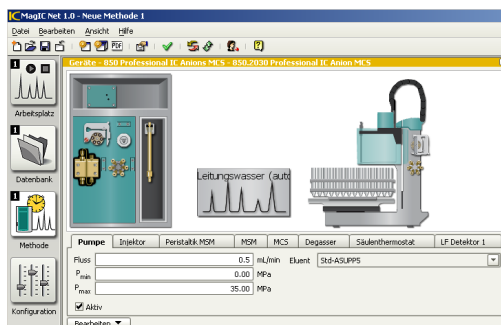
Parameter für IC-Gerät definieren

- 1 Die Abbildung des **850 Professional IC Anion MCS** anklicken.

Die Registerkarten der Module des **850 Professional IC Anion MCS** erscheinen und können editiert werden.

- 2 **Registerkarte Pumpe editieren**

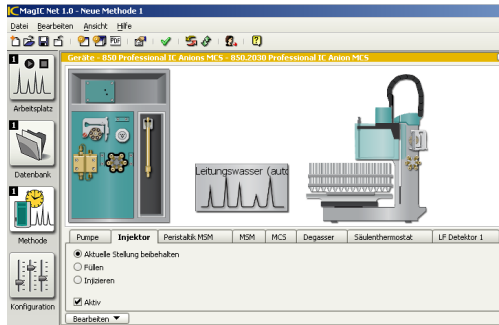
- Registerkarte **Pumpe** wählen (oder auf das Symbol der Pumpe klicken).
- Die Werte der Felder **Fluss**, **P_{min}** und **P_{max}** werden automatisch eingelesen.
- In der Auswahlliste **Eluent** den vorher definierten Eluenten **Std-ASUPPS** wählen.



- Das Kontrollkästchen **Aktiv** aktivieren.

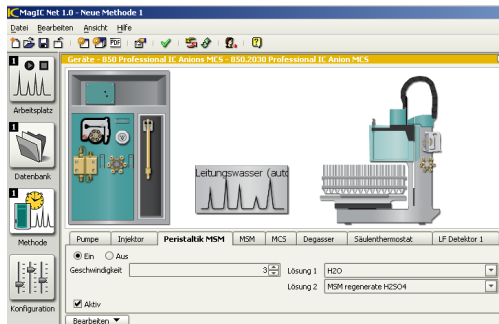
- 3 **Registerkarte Injektor editieren**

- Die Registerkarte **Injektor** wählen (oder auf das Symbol des Injektors klicken).
- Die Standardeinstellungen übernehmen.



4 Registerkarte Peristaltik MSM editieren

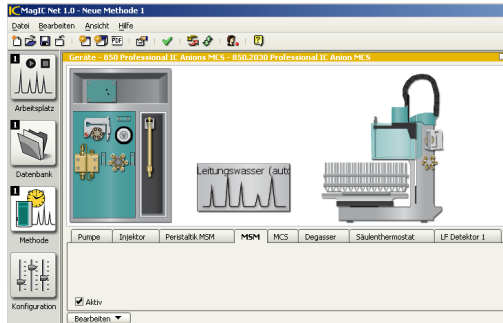
- Die Registerkarte **Peristaltik MSM** wählen (oder auf das Symbol des Peristaltik MSM klicken).
- Die Option **Ein** aktivieren.
- Im Feld **Geschwindigkeit** den Wert 3 übernehmen. (Es gibt 7 Geschwindigkeitsstufen, mit 6 Umdrehungen/min pro Stufe.)
- In der Auswahlliste **Lösung 1** die Lösung **H₂O** auswählen.
- In der Auswahlliste **Lösung 2** die Lösung **MSM Regenerale H₂SO₄** auswählen.





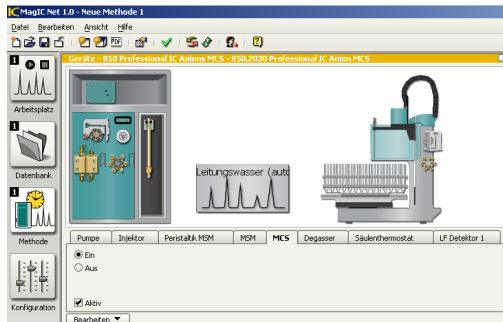
5 Registerkarte MSM editieren.

- Die Registerkarte **MSM** wählen (oder auf das Symbol des MSM klicken).
- Die Standardeinstellungen übernehmen.



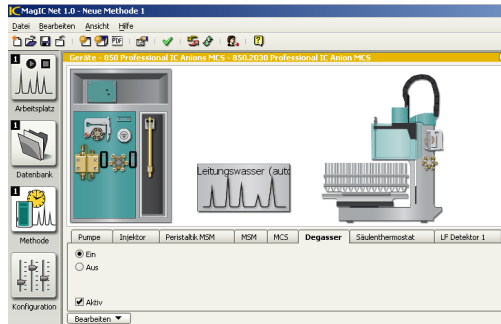
6 Registerkarte MCS editieren.

- Die Registerkarte **MCS** wählen (oder auf das Symbol des MCS klicken).
- Die Standardeinstellungen übernehmen.



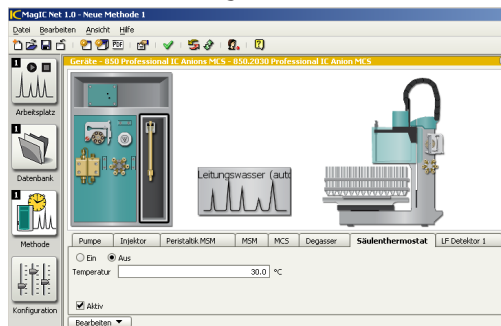
7 Registerkarte Degasser editieren.

- Die Registerkarte **Degasser** wählen (oder auf das Symbol des Degassers klicken).
- Die Standardeinstellungen übernehmen.



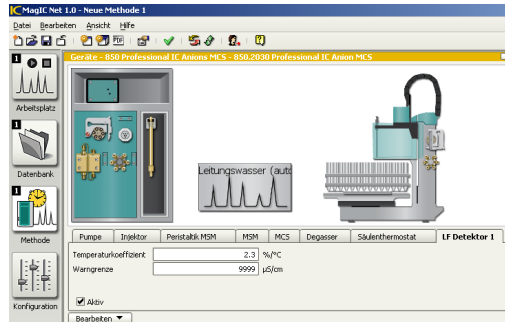
8 Registerkarte Säulenthermostat editieren.

- Die Registerkarte **Säulenthermostat** wählen (oder auf das Symbol des Säulenthermostats klicken).
- Die Standardeinstellungen übernehmen.



9 Registerkarte LF Detektor 1 editieren

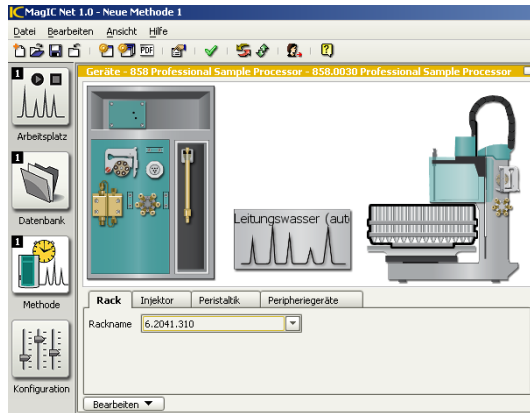
- Die Registerkarte **LF Detektor 1** wählen (oder auf das Symbol des LF Detektors klicken).
- Die Standardeinstellungen übernehmen.



Parameter für Sample Processor definieren

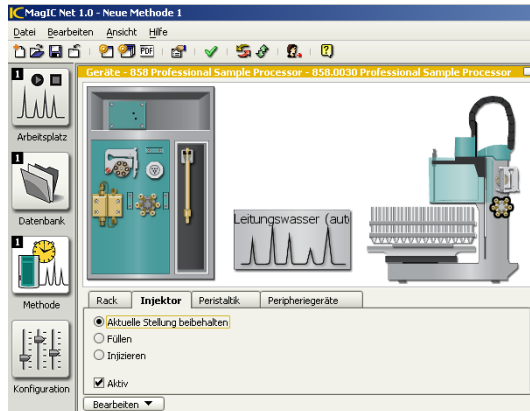
1 Registerkarte Rack editieren

- Die Registerkarte **Rack** wählen.
- In der Auswahlliste **Rackname** die Nummer des Racks wählen.



2 Registerkarte Injektor editieren

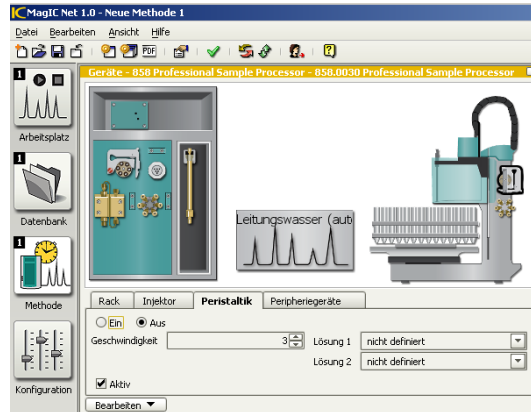
- Die Registerkarte **Injektor** wählen.
- Die Standardeinstellungen übernehmen.





3 Registerkarte Peristaltik editieren

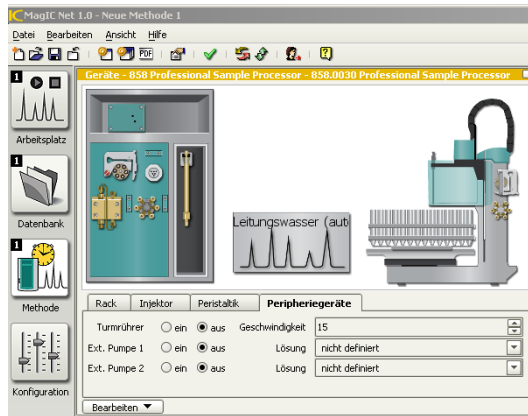
- Die Registerkarte **Peristaltik** wählen.
- Die Optionsschaltfläche **Aus** markieren.



4 Registerkarte Peripheriegeräte editieren

- Die Registerkarte **Peripheriegeräte** wählen.

Die Einstellungen werden übernommen, da keine weiteren Geräte verwendet werden.



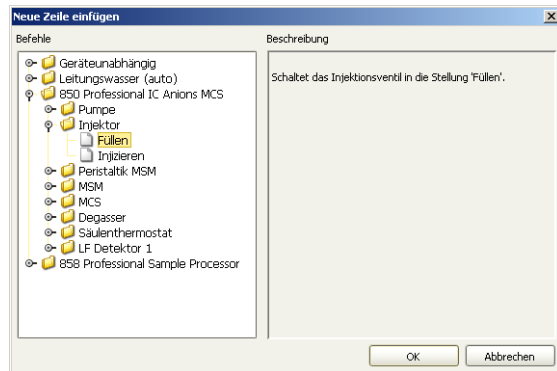
3.2.3 Zeitprogramm

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 Injektionsventil auf Füllen schalten

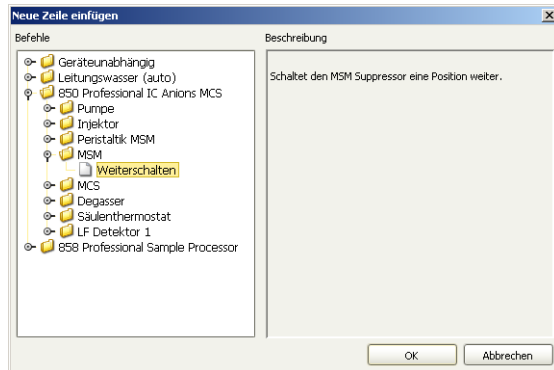
- Über das Menü **Bearbeiten** ► **Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile hinzufügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **850 Professional IC Anion MCS** ► **Injektor** ► **Füllen** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.
Das Dialogfenster **850 Professional IC Anion MCS - Injektor - Füllen** wird geöffnet.
- Die Zeitangabe **0** min übernehmen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

2 MSM weiterschalten

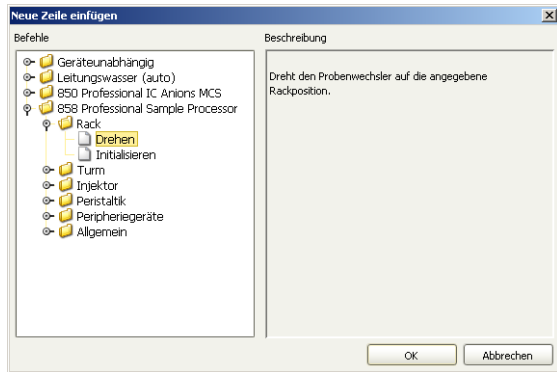
- Über das Menü **Bearbeiten ▶ Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile hinzufügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **850 Professional IC Anion MCS ▶ MSM ▶ Weiterschalten** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.
Dialogfenster **850 Professional IC Anion MCS - MSM - Weiterschalten** wird geöffnet.
- Im Feld **Zeit** die Zeitangabe **0** min übernehmen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

3 Proben-Position anfahren

- Über das Menü **Bearbeiten ▶ Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile hinzufügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor ▶ Rack ▶ Drehen** wählen.



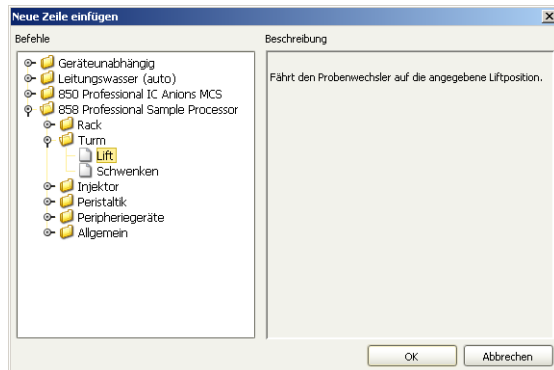
- Mit **[OK]** bestätigen.
Das Dialogfenster **858 Professional Professional Sample Processor - Rack - Drehen** wird geöffnet.



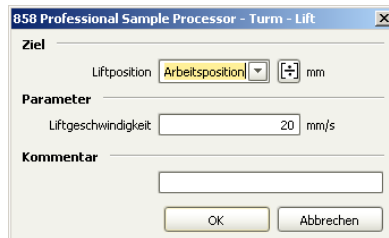
- Die Feldwerte übernehmen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

4 Ansaugnadel in Probe eintauchen

- Über das Menü **Bearbeiten ▶ Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile hinzufügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor ▶ Turm ▶ Lift** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.
Das Dialogfenster **858 Professional Professional Sample Processor - Turm - Lift** wird geöffnet.
- In der Auswahlliste **Liftposition** den Eintrag **Arbeitsposition** wählen.

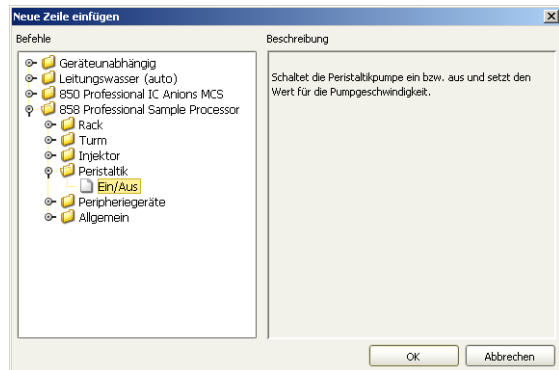


- Mit **[OK]** bestätigen.

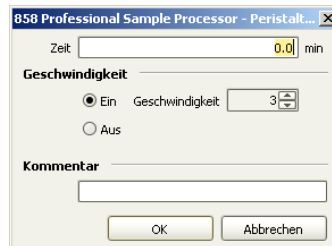


5 Injektionsventil mit Probe füllen

- Über das Menü **Bearbeiten** ▶ **Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile hinzufügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor** ▶ **Peristaltik** ▶ **Ein/Aus** wählen.



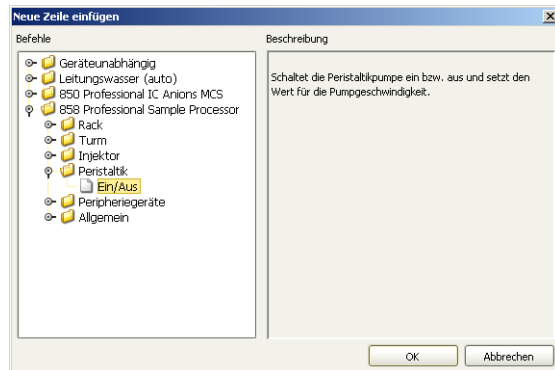
- Mit **[OK]** bestätigen.
Das Dialogfenster **858 Professional Professional Sample Processor - Peristaltik - Ein/Aus** wird geöffnet.
- Im Feld **Zeit** die Zeitangabe **0** min übernehmen.
- Die anderen Feldwerte ebenfalls übernehmen.



- Mit **[OK]** bestätigen.

6 Peristaltik Pumpe des Sample Processors ausschalten

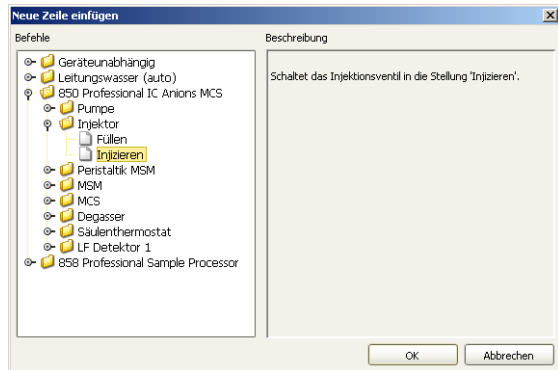
- Über das Menü **Bearbeiten ▶ Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile hinzufügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor ▶ Peristaltik ▶ Ein/Aus** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.
Das Dialogfenster **858 Professional 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

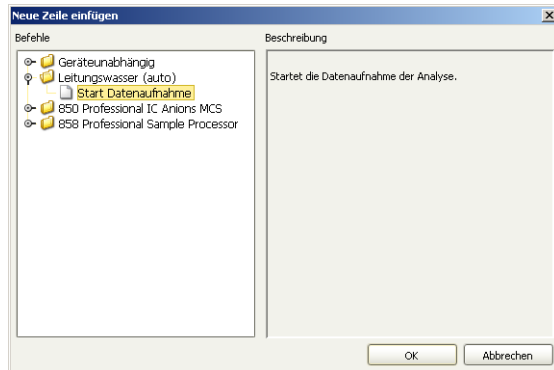
- Über das Menü **Bearbeiten ▶ Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile hinzufügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **850 Professional IC Anion MCS ▶ Injektor ▶ Injizieren** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.
Das Dialogfenster **850 Professional IC Anion MCS - Injektor - Injizieren** wird geöffnet.
- Im Feld **Zeit** den Wert **2.5** eintragen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

8 Datenaufnahme starten

- Über das Menü **Bearbeiten ▶ Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile hinzufügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **Leitungswasser (auto) ▶ Start Datenaufnahme** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.
Das Dialogfenster **850 Professional IC Anion MCS - Leitungswasser (auto) - Start Datenaufnahme** wird geöffnet.
- Im Feld **Zeit** den Wert **2.5** eintragen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

9 Spezialbecher-Position 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** das Dialogfenster **Neue Zeile hinzufügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor ▶ Rack ▶ Drehen** wählen.
- Mit **[OK]** bestätigen.
Das Dialogfenster **858 Professional Professional Sample Processor - Rack - Drehen** wird geöffnet.



- In der Auswahlliste **Drehen** den Eintrag **Spezialbecher** wählen und im Feld **Nummer** den Wert **1** eingeben.

858 Professional Sample Processor - Rack - Drehen

Ziel

Drehen: Spezialbecher

Nummer: 1

Drehwinkel: 5.0

Bechertest

Meldung anzeigen

Bestimmung abbrechen

Bestimmung und Serie abbrechen

Parameter

Drehgeschwindigkeit: 20 %/s

Drehrichtung: auto

Schwenkgeschwindigkeit: 55 %/s

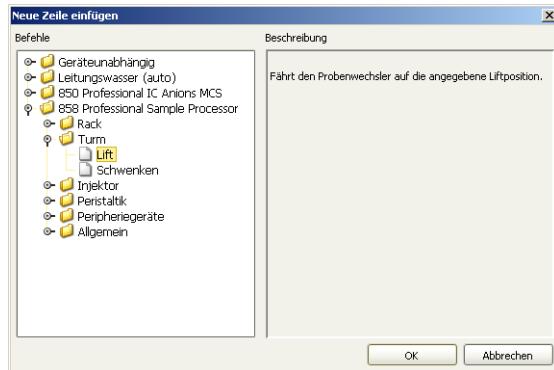
Kommentar

OK Abbrechen

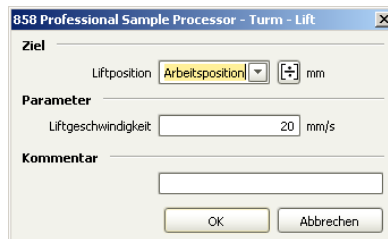
- Mit **[OK]** bestätigen.

10 Ansaugnadel in Spezialbecher eintauchen

- Über das Menü **Bearbeiten** ▶ **Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile hinzufügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor** ▶ **Turm** ▶ **Lift** wählen.



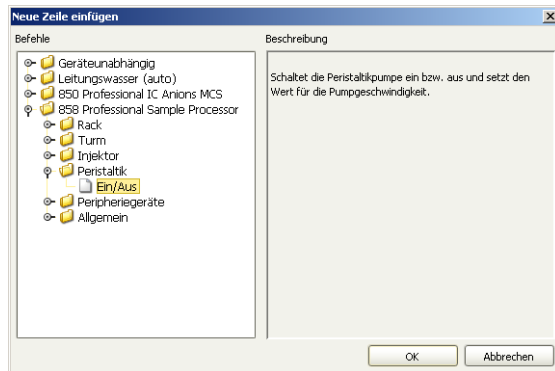
- Mit **[OK]** bestätigen.
Das Dialogfenster **858 Professional Professional Sample Processor - Turm - Lift** wird geöffnet.
- In der Auswahlliste **Liftposition** den Eintrag **Arbeitsposition** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.

11 Spülen einschalten

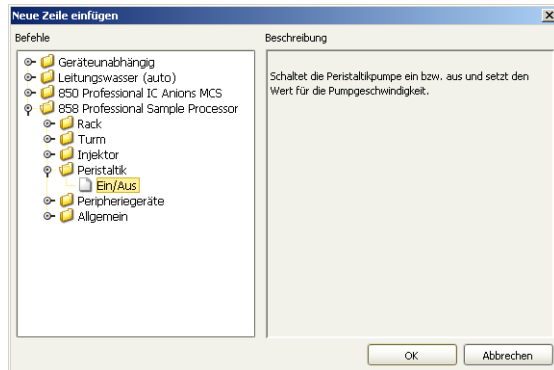
- Über das Menü **Bearbeiten** ▶ **Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile hinzufügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor** ▶ **Peristaltik** ▶ **Ein/Aus** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.
Das Dialogfenster **858 Professional Professional Sample Processor - Peristaltik - Ein/Aus** wird geöffnet.
- Im Feld **Zeit** die Zeitangabe **0** min übernehmen.
- Die anderen Feldwerte ebenfalls übernehmen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

12 Spülen ausschalten

- Über das Menü **Bearbeiten** ► **Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile hinzufügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor** ► **Peristaltik** ► **Ein/Aus** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.
Das Dialogfenster **858 Professional Professional Sample Processor - Peristaltik - Ein/Aus** wird geöffnet.
- Im Feld **Zeit** den Wert **1.5** eintragen.
- Im Bereich **Geschwindigkeit** die Option **Aus** wählen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

Das vollständige Zeitprogramm sieht wie folgt aus:

Zeitprogramm							
Hauptprogramm							
Zeit	Gerät	Modul	Befehl	Parameter	Kommentar	Nr.	
0.0	850 Professional IC Anions MCS	Injektor	Füllen			1	
0.0	850 Professional IC Anions MCS	MSM	Weiterschalten			2	
	858 Professional Sample Processor	Rack	Drehen	Probenposition		3	
	858 Professional Sample Processor	Turm	Lift	Arbeitsposition		4	
0.0	858 Professional Sample Processor	Peristaltik	Ein/Aus	Ein, Geschwindigkeit=3		5	
2.5	858 Professional Sample Processor	Peristaltik	Ein/Aus	Aus		6	
2.5	850 Professional IC Anions MCS	Injektor	Injizieren			7	
2.5	Leitungswasser (auto)		Start Datenaufnahme			8	
	858 Professional Sample Processor	Rack	Drehen	Spezialbecher 1		9	
	858 Professional Sample Processor	Turm	Lift	Arbeitsposition		10	
0.0	858 Professional Sample Processor	Peristaltik	Ein/Aus	Ein, Geschwindigkeit=3		11	
▶ 1.5	858 Professional Sample Processor	Peristaltik	Ein/Aus	Aus		12	
*							

3.2.4 Auswertung

(siehe Kapitel 3.1.4)



3.2.5 Methode speichern

Methode speichern

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

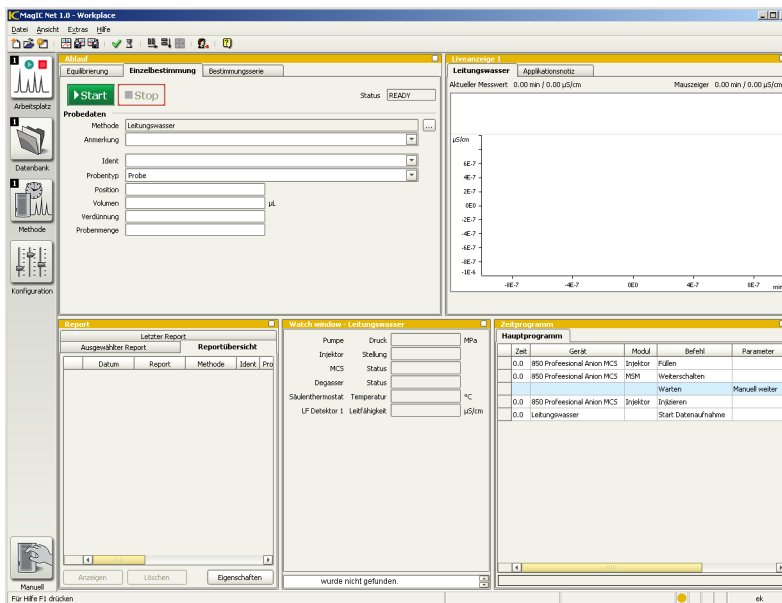
- 1 Über das Menü **Datei ▶ Speichern unter...** das Dialogfenster **Methode speichern** öffnen.
- 2 Im Feld **Methodenname** als Name für die Methode **Leitungswasser (auto)** eingeben.
- 3 **[Speichern]** anklicken.

4 Bestimmung durchführen

In diesem Kapitel lernen Sie:

- Retentionszeiten der Analyten zu überprüfen
- Probedaten 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 Probedaten

Liveanzeige 1

Darstellung des Chromatogramms während der Analyse

Report

Anzeige der Reports von Analysen

Die Aufzeichnung der Basislinie beginnt. Sobald die Basislinie stabil ist, kann mit der Messung begonnen werden (nach ca. 30 min).

Suppressor manuell vorbereiten



- 1 In den Programmteil **Manuell** wechseln.
 - 2 Im linken Fensterteil in der Auswahlliste **Arbeitsplatz** wählen und den **850 Professional IC Anions MCS** markieren.
 - 3 Die Registerkarte **MSM** wählen.
 - 4 Die Schaltfläche **[Weiterschalten]** anklicken.
 - 5 Nach 10 min die Schaltfläche **[Weiterschalten]** erneut anklicken.
 - 6 Den Schritt **5** noch zweimal wiederholen.
- Damit ist sichergestellt, dass alle drei Kammern des Suppressors regeneriert wurden.

4.2 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 Probedaten eingeben**

Geben Sie in die Felder folgende Werte ein:

 - Im Feld **Ident** den Namen **Standard 1**.
 - Im Feld **Position** den Wert **1**.
 - Im Feld **Volumen** den Wert **20**.
 - Im Feld **Verdünnung** den Wert **1**.
 - Im Feld **Probenmenge** den Wert **1**.
- 6** Die Schaltfläche **[Start]** anklicken.

Die Bestimmung wird gestartet und das Zeitprogramm für die manuelle Bestimmung abgearbeitet

Rot markierte Zeilen zeigen den aktuellen Programmschritt an, blau markierte Zeilen die abgearbeiteten Programmschritte.
- 7** Sobald die Meldung zum Füllen erscheint, den Injektor manuell füllen.
- 8** Meldung mit **[Weiter]** bestätigen.

Die Datenaufnahme wird gestartet und die Bestimmung zu Ende geführt.

Die Schritte **4** bis **8** werden für die Messungen von Standard 2 und Standard 3 wiederholt. In der Auswahlliste **Probentyp** wird **Standard 2** bzw. **Standard 3** ausgewählt und im Feld **Ident** der Name **Standard 2** bzw. **Standard 3** eingetragen.

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.

Probe

1 In der Auswahlliste **Probentyp** den Eintrag **Probe** wählen.

2 Probedaten eingeben

Geben Sie in die Felder folgende Werte ein:

- Im Feld **Ident** den Namen **Leitungswasser** eintragen.
- Im Feld **Position** den Wert **1**.
- Im Feld **Volumen** den Wert **20**.
- Im Feld **Verdünnung** den Wert **1**.
- Im Feld **Probenmenge** den Wert **1**.

3 Die Schaltfläche **[Start]** anklicken.

Die Bestimmung wird gestartet und das Zeitprogramm für die manuelle Bestimmung abgearbeitet.

4 Sobald die Meldung zum Füllen erscheint den Injektor manuell füllen.

5 Meldung mit **[Weiter]** bestätigen.

In der Tabelle den Methodennamen **Leitungswasser (auto)** markieren und **[Öffnen]** anklicken.

Falls bereits mehrere Methodengruppen bestehen, muss zuerst im Auswahlfeld **Methodengruppe** die Gruppe ausgewählt werden, zu der die Methode gehört.

Im Feld **Methode** wird automatisch **Leitungswasser (auto)** eingetragen.

5 Werte für Standard 1 eingeben

Geben Sie in die Felder folgende Werte ein:

- Im Feld **Ident** den Namen **Standard 1**.
- In der Auswahlliste **Probentyp** den **Standard 1** wählen.
- Im Feld **Position** den Wert **1**.
- Im Feld **Injektionen** den Wert **1**.
- Im Feld **Volumen** den Wert **20**.
- Im Feld **Verdünnung** den Wert **1**.
- Im Feld **Probenmenge** den Wert **1**.
- **[Übernehmen]** anklicken.

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** und **Probenmenge** 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.
- **[Übernehmen]** anklicken.

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.

8 Werte für Probe eingeben

Um die Probedaten einzugeben, gehen Sie analog Schritt 5 vor:

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

9 Hardware stoppen

- Das Kontrollkästchen **Hardware stoppen wenn Probenabelle 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 Proben-tabelle speichern

- Über das Menü **Proben-tabelle ▶ Speichern unter...** das Dialogfenster **Proben-tabelle speichern** öffnen.
- Im Feld **Name** den Namen **Probe Leitungswasser** eintragen.
- **[Speichern]** anklicken.

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

The screenshot shows the 'MagIC Net 1.0 - Workplace' software interface. The main window displays a table of sample data. The table has the following columns: Methode, Ident, Proben-typ, Position, Injektionen, Status, Volumen/Verdünn..., and Proben-nr. The data rows are as follows:

Methode	Ident	Proben-typ	Position	Injektionen	Status	Volumen/Verdünn...	Proben-nr
1 Leitungswasser (auto)	Standard 1	Probe	1	1	REA...	20 1 1	1
2 Leitungswasser (auto)	Standard 2	Probe	2	1	REA...	20 1 1	1
3 Leitungswasser (auto)	Standard 3	Probe	3	1	REA...	20 1 1	1
4 Leitungswasser (auto)	Probe	Probe	4	1	REA...	20 1 1	1

At the bottom of the window, there is a checkbox labeled 'Hardware stoppen wenn Proben-tabelle beendet ist' which is checked.



Standards und Proben messen

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

Zunächst werden die Chromatogramme der drei Standards gemessen, anschliessend die 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.

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

4.4 Retentionszeiten manuell anpassen

Um die in der Methode vorgegebenen Retentionszeiten der sieben 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** auswählen.

4 In der Auswahlliste **Probentyp** den **Standard 2** wählen.

5 Probedaten eingeben

Geben Sie in die Felder folgende Werte ein:

- Im Feld **Ident** den Namen **Standard 2**.
- Im Feld **Position** den Wert **1**.
- Im Feld **Volumen** den Wert **20**.
- Im Feld **Verdünnung** den Wert **1**.
- Im Feld **Probenmenge** den Wert **1**.

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

Die Bestimmung wird gestartet und das Zeitprogramm für die manuelle Bestimmung abgearbeitet.

7 Sobald die Meldung zum Füllen erscheint, den Injektor manuell füllen.

8 Meldung mit **[Weiter]** bestätigen.

Datenaufnahme wird gestartet und die Bestimmung zu Ende geführt.

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 wie folgt in die Komponententabelle ein:

1 In den Programmteil **Methode** wechseln.



- 2** Das Menü **Bearbeiten ▶ Aktualisieren** anklicken.
- 3** Im Unterfenster **Auswertung** die Schaltfläche **[Komponente]** anklicken und die Registerkarte **Komponententabelle** wählen.
- 4** Die Zeile mit der Komponente, deren Retentionszeit korrigiert werden soll, anklicken.
- 5** Im Unterfenster **Chromatogramme** in den dazu gehörenden Peak klicken.
- 6** Im Unterfenster **Auswertung** auf die Schaltfläche **[Retentionszeit aktualisieren]** klicken.

Die Retentionszeit aus dem Chromatogramm wird in die Komponententabelle übertragen.
- 7** Wiederholen Sie die Schritte **4** bis **6** für alle zu korrigierenden Komponenten.

5 Bestimmungen bearbeiten

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 Programmteils **Datenbank**.

2 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.

3 Zweiter Klick auf denselben Spaltentitel.

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



Schnellfilter

- 1 Das Menü **Bestimmungen** ▶ **Filter** ▶ **Schnellfilter** anklicken.

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

- 2 Den Cursor in eine Zelle setzen, die als Filterkriterium dient, und mit der linken Maustaste klicken.

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

Spezialfilter

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

- 1 Über das Menü **Bestimmungen** ▶ **Filter** ▶ **Spezialfilter** das entsprechende Dialogfenster öffnen.

- 2 Über das Menü **Bearbeiten** ▶ **Zeile bearbeiten** das Dialogfenster **Filterbedingung Neuer Filter bearbeiten** öffnen.

- 3 In der Auswahlliste **Feld** den Eintrag **Methodenname** markieren.
- 4 Im Feld **Vergleichswert** den Methodennamen **Leitungswasser** eintragen und **[OK]** anklicken.
- 5 Im Dialogfenster **Spezialfilter** die Schaltfläche **[Filter anwenden]** anklicken und das Fenster schliessen.

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

Die Daten eines markierten Datensatzes erscheinen in den anderen Unterfenstern:

Im Unterfenster **Resultate** erscheint eine Tabelle mit den Komponenten, ihren Konzentrationen, Retentionszeiten etc.



Die Parameter der Tabelle können im Dialogfenster **Eigenschaften Resultatfenster** zusammengestellt werden. Es wird durch Doppelklicken in das Feld der Resultatanzeige oder das Menü **Ansicht ▶ Eigenschaften ▶ Eigenschaften Resultate** geöffnet.

Im Unterfenster **Kurven 1** werden das Chromatogramm und die Kalibrierkurve dargestellt.

Im Unterfenster **Informationen** können über die einzelnen Registerkarten Angaben zur Probe, zu den Geräten etc. angezeigt werden.

Suchen

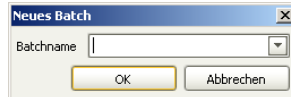
- 1 Über das Menü **Bestimmungen ▶ Suchen** das Dialogfenster **Suchen - Datenbank 'MagIC Net'** öffnen.
- 2 In der Auswahlliste **Suchen in** den Eintrag **Anwender (Kurzname)** markieren.
- 3 Im Feld **Suchbegriff** ihren Kurznamen eingeben.
- 4 **[Weitersuchen]** anklicken.

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

Batch (benutzerdefinierter Filter)

1 Batch erstellen

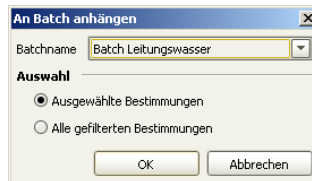
- Über das Menü **Bestimmungen** ► **Batch** ► **Neuer Batch** das Dialogfenster **Neuer Batch** öffnen.



- Im Feld **Batchname** den Namen **Batch Leitungswasser** 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** das Dialogfenster **An Batch anhängen** öffnen.



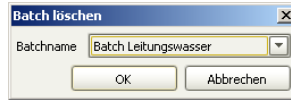
- Im Auswahlfeld **Batchname** den Namen **Batch Leitungswasser** wählen.
- Die Option **Ausgewählte Bestimmungen** markieren.
- [OK]** anklicken.

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



3 Batch löschen

- Über das Menü **Bestimmungen** ► **Batch** ► **Batch löschen** das Dialogfenster **Batch löschen** öffnen.



- Im Auswahlfeld **Batchname** den Namen **Batch Leitungswasser** wählen.
- [OK]** anklicken.

Der Batch wird aus der Datenbank gelöscht.

4 Angewendete Filter löschen

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

Zoom mit Maus

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

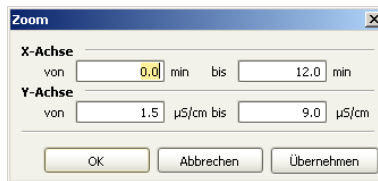
- 1 In der Übersichtstabelle einen Datensatz markieren.

Das dazugehörige Chromatogramm wird im Unterfenster **Kurven 1** dargestellt.

- 2 Bei gedrückter linker Maustaste den Bereich aufspannen, der vergrößert werden soll.

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** das Dialogfenster **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.
- 5 **[OK]** anklicken.
Der Peak von Nitrit wird vergrößert dargestellt.



Unzoom

1 Mit rechter Maustaste in das Chromatogramm klicken.

2 Im Kontextmenü **Unzoom** anklicken.

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.
- Den Menüpunkt **Eigenschaften** wählen.
- Die Registerkarte **Chromatogramm** wählen.
- Das Kontrollkästchen **Retentionszeit** aktivieren und das Kontrollkästchen **Konzentration** deaktivieren.
- **[OK]** anklicken.

2 Achsenbeschriftung ändern

- Mit der rechten Maustaste in das Chromatogramm klicken.
- Den Menüpunkt **Eigenschaften** wählen.

- Im Dialogfenster **Eigenschaften - Grafik** die Registerkarte **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.
- 3** In der Auswahlliste **Komponenten** den Eintrag **Nitrit** wählen.

Die Kalibrierkurve von **Nitrit** und die Kalibrierfunktion werden dargestellt.

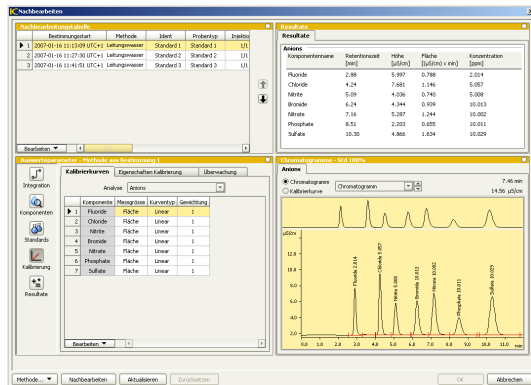
5.3 Bestimmungen nachbearbeiten

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

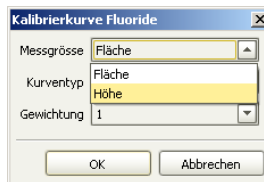
Als Beispiel wird die Auswertung über die Peakhöhe anstelle der Auswertung über die Peakfläche beschrieben, welche in der Methodenvorlage definiert ist.

1 Kalibrierkurve nachbearbeiten

- Im Unterfenster **Bestimmungsübersicht** die drei Standards markieren.
- Über das Menü **Bestimmungen** ► **Nachbearbeiten...** das entsprechende Dialogfenster öffnen.



- Im Unterfenster **Auswerteparameter** auf die Schaltfläche **Kalibrierung** klicken.
- Die Registerkarte **Kalibrierung** wählen.
- In der Tabelle die erste Komponente (Fluorid) markieren.
- Über das Menü **Bearbeiten** ► **Bearbeiten** das Dialogfenster **Kalibrierkurve Fluorid** öffnen:



- 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.

Die Schritte 5 bis 8 für Standard 2 und Standard 3 wiederholen.

- **[Aktualisieren]** anklicken.

Die Kalibrierkurven der drei Standards werden neu berechnet.

- 2 Über die Schaltfläche **[Nachbearbeiten]** das Dialogfenster Nachbearbeiten öffnen.



- 3 **[Ok]** anklicken.

5.4 Reportvorlage erstellen

Um einen Report mit den Analyseergebnissen zu erstellen, müssen Sie zunächst eine Reportvorlage definieren. Nachfolgend erstellen Sie:

- eine Reportvorlage für die Kalibrierkurve der Standards
- eine Reportvorlage mit der Resultattabelle und dem Chromatogramm der Probe **Leitungswasser**




Reportvorlage für Kalibrierkurve

- 1
 - Über das Menü **Extras ▶ Reportvorlage ▶ Neu ▶ Formularreport** das Dialogfenster **Reportvorlage - Neuer Formularreport** öffnen.
 - In der Tooleiste das Icon **Kalibrierkurve**  anklicken.
 - Den Mauszeiger, der nun die Form eines Kreuzes hat, in der Reportvorlage plazieren, und bei gedrückter linker Maustaste die gewünschte Fläche erzeugen. Das Dialogfenster **Eigenschaften - Kalibrierkurvenfeld** wird geöffnet.
 - Im Auswahlfeld **Analyse** als Beispiel **Standard 2** eingeben.
 - Im Auswahlfeld **Komponente** als Beispiel die Komponente **Nitrat** eingeben.
 - Im Bereich **Kurvendarstellung** des Dialogfensters **Eigenschaften - Kalibrierkurvenfeld** die Option **aus Datenbank** wählen.
 - **[OK]** anklicken.
 - Dialogfenster **Reportvorlage - Neuer Formularreport** schliessen und die Meldung **Vorlage speichern** mit **[Ja]** bestätigen.
 - Im Dialogfenster **Reportvorlage speichern** im Feld **Name** den Namen **Kalibrierkurve** eintragen.
 - **[Speichern]** anklicken.

Reportvorlage für Resultattabelle/Chromatogramm

1 Resultattabelle erstellen

- In der Toolleiste das Icon **Kurve & Resultattabelle**  anklicken.
- Den Mauszeiger, der nun die Form eines Kreuzes hat, in der Reportvorlage plazieren, und bei gedrückter linker Maustaste die gewünschte Fläche erzeugen.
- Im Dialogfenster **Eigenschaften-Kurven + Resultattabelle** im Feld **Analyse** den Probennamen **Leitungswasser** eintragen.
- Die Schaltfläche **Resultat** anklicken.
- In der Liste **Verfügbare Resultate** den Eintrag **Komponentenname** markieren und mit der Taste  in die Liste **Angezeigte Resultate** verschieben.
Auf die gleiche Art und Weise werden **Retentionszeit**, **Fläche** und **Konzentration** der Liste hinzugefügt
- **Retentionszeit** markieren und **[Nachkommastelle]** anklicken.
- Im Dialogfenster **Nachkommastelle-Retentionszeit** den Wert **2** auswählen.
Für die Nachkommastellen der **Fläche** und der **Konzentration** ebenfalls den Wert **2** eintragen.
- **[OK]** anklicken.
- Das Dialogfenster **Reportvorlage-Neuer Formularreport** schliessen und die Meldung **Vorlage speichern** mit **[Ja]** bestätigen.
- Im Dialogfenster **Reportvorlage speichern** im Feld **Name** den Namen **Resultate** eintragen.
- **[Speichern]** anklicken.



5.5 Report drucken

Kalibrierkurven drucken

- 1 Im Unterfenster **Bestimmungsübersicht** die Zeile von Standard 3 markieren.
- 2 Über das Menü **Datei ▶ Drucken ▶ Report...** das Dialogfenster **Reportausgabe** öffnen.
- 3 Im Bereich **Auswahl** die Option **Ausgewählte Bestimmung** markieren.
- 4 Im Bereich **Reporttyp** die Option **Reportvorlage** markieren und die Reportvorlage **Result and Calibration** auswählen.
- 5 Im Bereich **Ausgabeziel** das Kontrollkästchen **Drucker** deaktivieren und das Kontrollkästchen **PDF-Datei** aktivieren.
- 6 Das Symbol  anklicken und im Dialogfenster **Speichern unter** im Feld **Dateiname** den Namen **Kalibrierkurven** eintragen.
- 7 **[Speichern]** anklicken.




- 8 Das Dialogfenster **Reportausgabe** mit **[OK]** schliessen.

Resultattabelle/Chromatogramm drucken

- 1 Im Unterfenster **Bestimmungsübersicht** die Zeile mit dem Eintrag **Leitungswasser** markieren.
- 2 Über das Menü **Datei ▶ Drucken ▶ Report...** das Dialogfenster **Reportausgabe** öffnen.
- 3 Im Bereich **Auswahl** die Option **Ausgewählte Bestimmungen** markieren.
- 4 Im Bereich **Reporttyp** die Option **Reportvorlage** markieren und die Reportvorlage **Result and Calibration** auswählen.
- 5 Im Bereich **Ausgabeziel** das Kontrollkästchen **Drucker** deaktivieren und das Kontrollkästchen **PDF-Datei** aktivieren.



- Die Schaltfläche  anklicken und im Dialogfenster **Speichern unter** im Feld **Dateiname** den Namen **Probe** eintragen.