MagIC Net

Metrohm
Ion analysis

Bedienlehrgang

8.102.8089DE / 2021-05-03

Metrohm AG
CH-9100 Herisau
Schweiz
Telefon +41 71 353 85 85
Fax +41 71 353 89 01
info@metrohm.com
www.metrohm.com

MagIC Net

Bedienlehrgang

8.102.8089DE / 2021-05-03

05.2021

Technical Communication
Metrohm AG
CH-9100 Herisau
techcom@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 Bedienlehrgangs ... 1

1.2 Programmbeschreibung ... 2

1.3 Darstellungskonventionen ... 3

2 Konfiguration 4

2.1 Software starten ... 5

2.2 Geräte konfigurieren ... 6

2.3 Säule konfigurieren ... 9

2.4 Eluent definieren ... 14

2.5 Lösungen anlegen ... 17

2.6 Zubehör anlegen ... 19

2.7 Rotor anlegen ... 22

3 Methode erstellen 25

3.1 Methode für manuelle Injektion ... 26

3.1.1 Neue Methode erstellen ... 26

3.1.2 Geräte und Startparameter definieren ... 28

3.1.3 Zeitprogramm ... 38

3.1.4 Auswertung ... 41

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 ... 47

3.2.3 Zeitprogramm ... 62

3.2.4 Auswertung ... 71

3.2.5 Methode speichern ... 72

4 Bestimmung durchführen 73

4.1 Equilibrierung ... 74

4.2 Retentionszeiten manuell anpassen ... 75

4.3 Standards und Probe manuell messen ... 77

4.4 Standards und Probe automatisch messen ... 80

5 Aktionen in der Datenbank 86

5.1 Bestimmungen sichten ... 86

5.2 Resultate anschauen ... 92

5.3 Bestimmungen nachbearbeiten ... 99

5.4 Reportvorlage erstellen ... 103

5.5 Report drucken ... 106

1 Einleitung

1.1 Aufbau des Bedienlehrgangs

Der vorliegende Bedienlehrgang beschreibt den ersten Umgang mit der Software ***MagIC Net***. Anhand der Aufnahme eines Chromatogramms werden Sie in die wichtigsten Bedienungselemente eingeführt. Die Einführung erfolgt anhand der Bestimmung der Konzentrationen der Anionen F^-, Cl^-, NO_2^-, Br^-, NO_3^-, PO_4^{3-} und SO_4^{2-} in Leitungswasser. In den Bestimmungen werden ein 940 Professional IC Vario und eine Metrosep A Supp 5 - 100/4.0 Säule mit integriertem Chip verwendet.

Der Lehrgang ist in 4 Teile gegliedert:

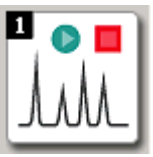
- Hardware konfigurieren, die vom System verwaltet und in der Methode verwendet wird
- Methode zur Durchführung einer Bestimmung erstellen
- Bestimmung durchführen
- Bestimmung begutachten, nachbearbeiten und Report ausgeben

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

1.2 Programmbeschreibung

MagIC Net besteht aus folgenden Programmteilen:

Arbeitsplatz



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

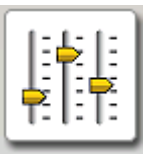
Datenbank

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

Methode

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

Konfiguration



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

Manuelle Bedienung

- Manuelle Bedienung der Geräte aus der im Arbeitsplatz geladenen Methode
- Manuelle Bedienung aller verbundenen 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 und eingeschalteten Metrohm-Geräte werden beim Programmstart automatisch erkannt, ebenso die an MSB-Anschlüssen von USB-Geräten angeschlossenen Geräte (Dosinos, Rührer, Pumpen, Remote Box). Gewisse Geräte müssen manuell zur Gerätetabelle hinzugefügt werden. Dazu gehören Geräte, die via RS-232-Schnittstelle an den PC angeschlossen sind, der Barcodeleser und das 771 IC Compact Interface.

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

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

2.1 Software starten

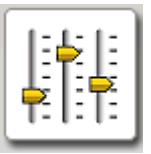
HINWEIS

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

MagIC Net starten

1. Das Symbol von ***MagIC Net*** auf dem Desktop anklicken.

2. Ggf. Anwendername und Passwort eingeben und **[OK]** anklicken.



3. Das Symbol **[Konfiguration]** anklicken.

   Das Dialogfenster des Programmteils **Konfiguration** wird geöffnet.

   Hier können insgesamt 9 Unterfenster angezeigt werden:

Geräte	Anzeige der automatisch erkannten und manuell hinzugefügten Geräte.
Säulen	Anzeige der automatisch erkannten und manuell hinzugefügten Säulen.
Eluent	Anzeige der manuell hinzugefügten Eluenten.
Zubehör	Anzeige des manuell hinzugefügten Zubehörs.
Lösungen	Anzeige der automatisch erkannten Lösungen in einer Dosiereinheit und der Lösungen, die manuell hinzugefügt wurden.
Rackdaten	Anzeige der automatisch erkannten und manuell importierten Metrohm-Probenracks.

Common Variablen	Anzeige aller Common Variablen.
Amperometrische Zellen	Anzeige der automatisch erkannten und manuell hinzugefügten Zellen des amperometrischen Detektors.
Rotoren	Anzeige der manuell hinzugefügten Rotoren inklusive Rotortyp und Seriennummer.

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

2.2 Geräte konfigurieren

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

940 Professional IC Vario anschliessen

1 Gerät anschliessen

Das Gerät mit einem USB-Kabel am PC anschliessen.

2 Gerät einschalten

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

3 Gerät in Tabelle speichern

Die Meldung mit **[Ja]** bestätigen.

4 Eigenschaften prüfen

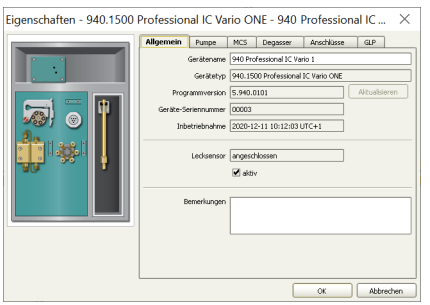
Die Angaben im Dialogfenster **Eigenschaften** überprüfen und mit **[OK]** schliessen.

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

5 Gerätenamen ändern (optional)

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

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



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

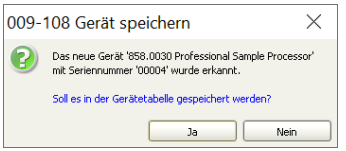
858 Professional Sample Processor anschliessen

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.

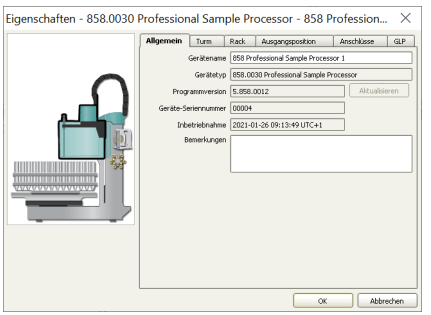
4 Eigenschaften prüfen

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

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

5 Rackparameter definieren

- In der Gerätetabelle auf die Zeile mit dem Eintrag **858 Professional Sample Processor** doppelklicken.



- Die Registerkarte **Rack** wählen.
  Falls ein Standardrack verwendet wird, ist im Feld **Rackname** die Nummer 6.2041.440 eingetragen.
  Falls ein anderes Rack auf den Probenwechsler aufgesetzt wurde, wird dessen Nummer eingetragen. In diesem Fall können die korrekten Positionen von der folgenden Beschreibung abweichen. Bitte achten Sie auf die richtige Auswahl.
- 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 **149** eintragen.
- Im Feld **Arbeitsposition Turm 1** den Wert **125** eintragen.
- Die beiden weiteren Spezialbecher analog bearbeiten.
- Alle Dialogfenster mit **[OK]** schliessen.

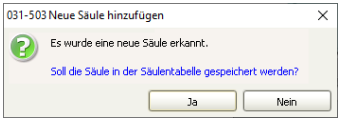
2.3 Säule konfigurieren

Säule mit Chip

Eine installierte Säule mit Säulenchip 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.

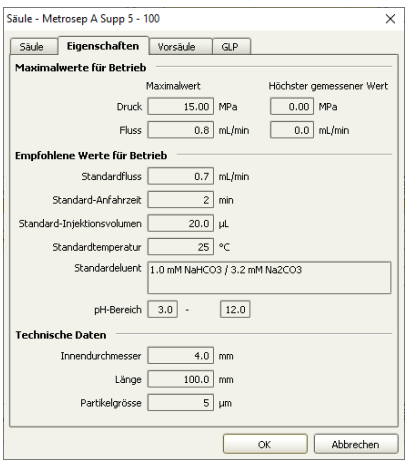
Die Säule wird in die Säulentabelle im Unterfenster **Säulen** eingetragen.

3 **Registerkarte Säule bearbeiten**

Im Dialogfeld **Säule - Metrosep A Supp 5 - 100/4.0** auf der Registerkarte **Säule** in das Feld **Säulenname** den Namen **Metrosep A Supp 5 - 100** eintragen.

4 **Registerkarte Eigenschaften bearbeiten**

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



5 Registerkarte Vorsäule bearbeiten

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.

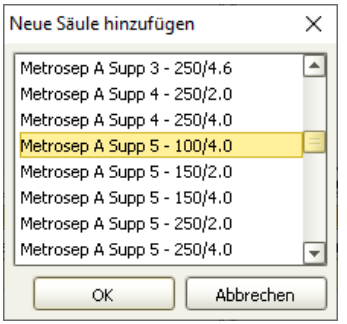
Säule ohne Chip

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 unbekannten 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 - 100/4.0** in der Liste markieren und **[OK]** anklicken.

Das Dialogfenster **Säule - Metrosep A Supp 5 - 100/4.0** wird geöffnet.

3 Säule bearbeiten

- 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. Für eine bessere Nachverfolgbarkeit und das Lösen von möglichen Fehlerfällen wird das Eintragen empfohlen.

4 Registerkarte Eigenschaften bearbeiten

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

5 Registerkarte Vorsäule bearbeiten

Bei bekannten Säulen sind die Felder automatisch ausgefüllt. Bei unbekannten 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 verwenden** aktivieren.
- Die Schaltfläche ... des Feldes **Inbetriebnahme** anklicken.
- Das Datum auswählen und **[OK]** anklicken.

6 Registerkarte GLP bearbeiten (optional)

Diese Registerkarte muss nur bearbeitet werden, wenn eine Überwachung nach den Regeln gemäss GLP (Good laboratory practice) 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** (Beispiel) 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

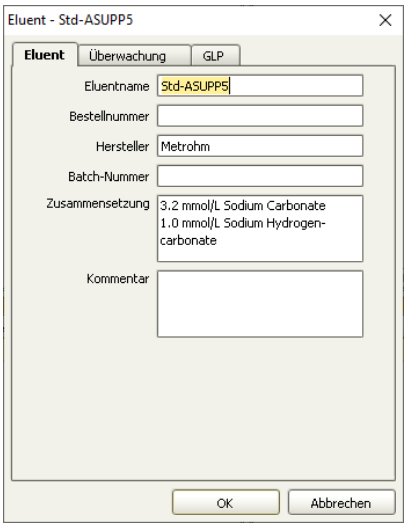
Eluenten werden im Unterfenster **Eluent** definiert.

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

2 **Eluenteigenschaften**

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

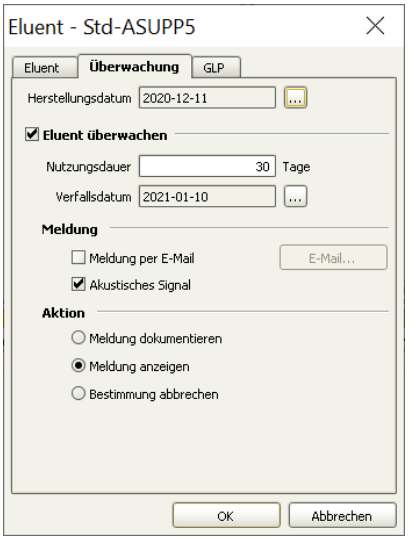
Feld	Eintrag
Eluentnamen	Std-ASUPP5
Bestellnummer	optional
Hersteller	optional
Batchnummer	optional
Zusammensetzung	3.2 mmol/L Sodium Carbonate, 1.0 mmol/L Sodium Hydrogencarbonate
Kommentar	optional



3 **Registerkarte Überwachung bearbeiten**

- Die Registerkarte **Überwachung** wählen.
- Das Datum der Inbetriebnahme wird bei der Eingabe des Eluenten automatisch eingetragen.
- Das Kontrollkästchen **Eluent überwachen** aktivieren.
- Im Feld **Nutzungsdauer** den Wert **30** eintragen (die Nutzungsdauer ist abhängig vom Eluent).
  Das Datum wird automatisch in das Feld **Verfallsdatum** eingetragen.
- Im Bereich **Meldung** das Kontrollkästchen **Akustisches Signal** aktivieren.

- Im Bereich **Aktion** die Option **Meldung anzeigen** aktivieren.

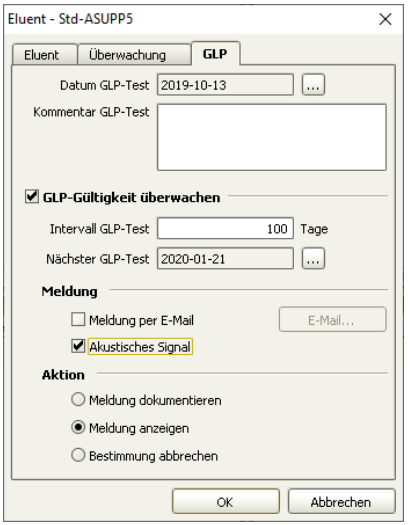


- Durch Klicken auf **[OK]** das Dialogfenster schliessen.

4 Registerkarte GLP bearbeiten (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** (Beispiel) eintragen.
  Das Datum 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.



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

2.5 Lösungen anlegen

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

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

1 Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** das Dialogfenster **Lösung** öffnen.

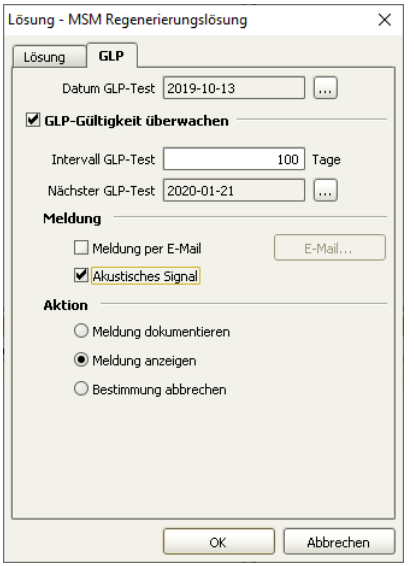
2 Registerkarte **Lösung** bearbeiten.

- Im Feld **Lösungsnamen** den Namen **MSM Regenerierlösung H_2SO_4** eintragen.
- Im Feld **Konzentration** den Konzentrationswert **100** eintragen und in der Auswahlliste die Konzentrationseinheit **mmol/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. Das Datum wird 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 bearbeiten (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. Das Datum wird 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.

2.6 Zubehör anlegen

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

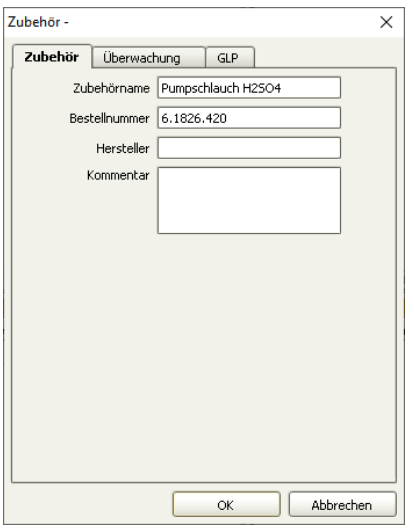
Es wird ein Pumpschlauch und eine Pumpschlauchverbindung mit Sicherung und Filter hinzugefügt. Die Pumpschlauchverbindung mit Inline Filter wird verwendet, um den Suppressor vor eventuellen Verunreinigungen aus der Regenerierlösung zu schützen.

Neues Zubehör anlegen

1 Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** das Dialogfenster **Zubehör** öffnen.

2 Auf der Registerkarte **Zubehör** im Feld **Zubehörname** den Namen **Pumpschlauch H_2SO_4** eintragen.

3 Die Nummer **6.1826.420** im Feld **Bestellnummer** eintragen.



4 Die Registerkarte **Überwachung** wählen.

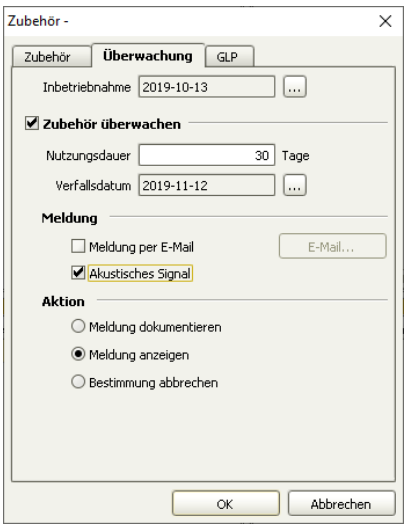
5 Das Kontrollkästchen **Zubehör überwachen** aktivieren.

6 Im Feld **Nutzungsdauer** den Wert **30** eingeben.

Das Datum wird automatisch in das Feld **Verfallsdatum** eingetragen.

7 Im Bereich **Meldung** das Kontrollkästchen **Akustisches Signal** aktivieren.

8 Im Bereich **Aktion** die Option **Meldung anzeigen** auswählen.



Die **Pumpschlauchverbindung mit Sicherung und Filter** hat die Bestellnummer **6.2744.180**. Der **Filter** hat die Bestellnummer **6.2821.130**.

2.7 Rotor anlegen

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

Neuen Rotor anlegen

1 Rotor hinzufügen

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

2 Rotor auswählen

Den Rotor **MSM A** auswählen.

Das Dialogfenster **Rotor** wird geöffnet.

3 Rotor bearbeiten

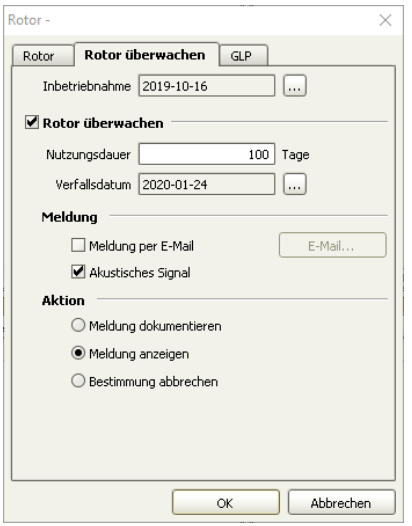
- Registerkarte **Rotor** wählen.
- Im Feld **Rotorname** den Namen **MSM Rotor** eintragen.
- Das Feld **Bestellnummer** wird bei bekannten Rotoren automatisch ausgefüllt.
  Die Einträge in den Feldern **Seriennummer** und **Kommentar** sind optional. Für eine bessere Nachverfolgbarkeit und das Lösen von möglichen Fehlerfällen wird das Eintragen empfohlen.

4 Registerkarte Rotor überwachen bearbeiten (optional)

Diese Registerkarte muss nur bearbeitet werden, wenn eine Überwachung des Rotors erforderlich ist.

- Die Registerkarte **Rotor überwachen** wählen.
- Das Datum der Inbetriebnahme wird bei der Eingabe des Rotors automatisch eingetragen.

- Das Kontrollkästchen **Rotor überwachen** aktivieren.
- Im Feld **Nutzungsdauer** den Wert **365** (Beispiel) eintragen.
  Das Datum wird automatisch in das Feld **Verfallsdatum** eingetragen.
- Im Bereich **Meldung** das Kontrollkästchen **Akustisches Signal** aktivieren.
- Im Bereich **Aktion** die Option **Meldung anzeigen** aktivieren.



5 Registerkarte GLP bearbeiten (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** (Beispiel) 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.

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 gängigsten Komponentennamen, deren Retentionszeiten, die Messgrösse (Fläche oder Höhe) für die Auswertung der Peaks und die Art, nach der die Kalibrierkurve gefittet wird.

Der ***MagIC Net***-Installation liegen Beispielmethoden bei. Die Beispielmethoden befinden sich standardmässig im folgenden Ordner: C:\Programme(x86)\Metrohm\MagIC Net\examples \methods. Die Beispielmethoden können importiert und an die auszuführende Applikation angepasst werden *(siehe Kurzanleitung zur MagIC Net Methodenanpassung - 8.102.8078)*.

Um Methoden zu verwenden, die in einer älteren Version von ***MagIC Net*** erstellt wurden, das folgende Dokument beachten: *Kurzanleitung zur MagIC Net Methodenanpassung - 8.102.8078EN*

3.1 Methode für manuelle Injektion

3.1.1 Neue Methode erstellen

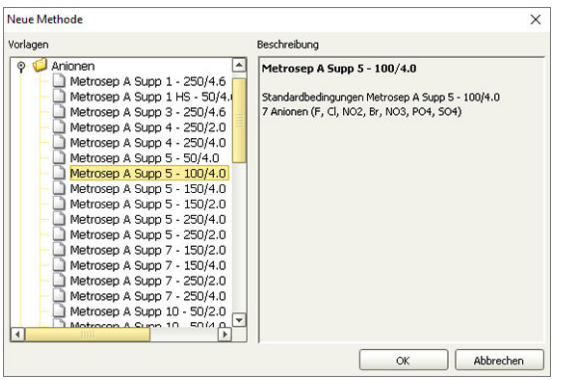
Methode erstellen

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

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

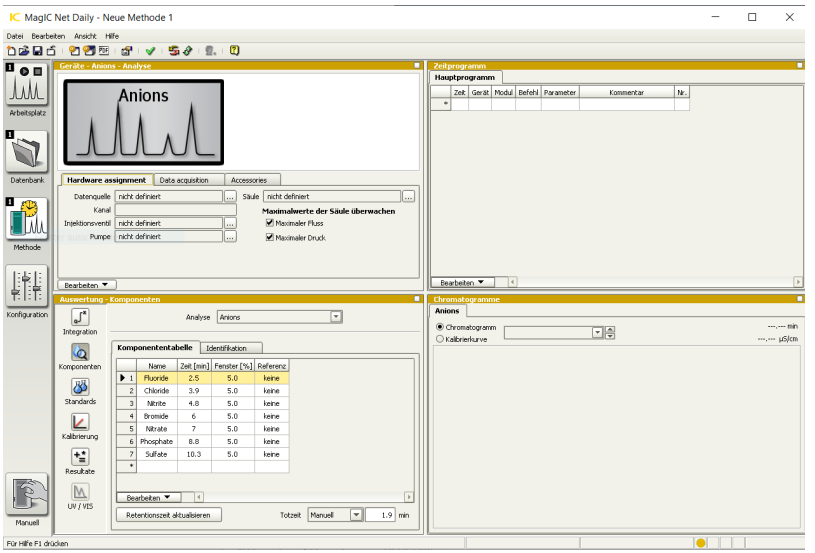
3 Unter **Vorlagen**, im linken Teil des Fensters, **Anionen ► Metrosep A Supp 5 - 100/4.0** markieren und mit **[OK]** bestätigen.

Die Methodenvorlage wird geöffnet.



Im Unterfenster **Geräte** wird das Symbol der Analysemethode **Anions** dargestellt. Das Unterfenster **Auswertung -**

Komponenten zeigt die Komponententabelle mit den Ionen der Methodenvorlage und deren Retentionszeiten.



Der Programmteil **Methode** hat insgesamt 4 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.

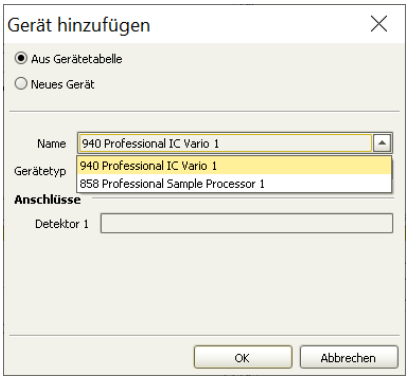
3.1.2 Geräte und Startparameter definieren

Geräte zusammenstellen

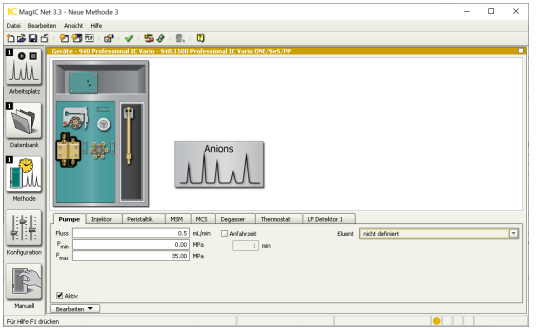
1 Im Unterfenster **Geräte** das Menü **Bearbeiten ▶ Hinzufügen ▶ Geräte** anklicken.

2 Im Dialogfenster **Geräte hinzufügen** die Option **Aus Gerätetabelle** wählen.

3 Im Feld **Name** das Gerät **940 Professional IC Vario 1** auswählen und **[OK]** anklicken.



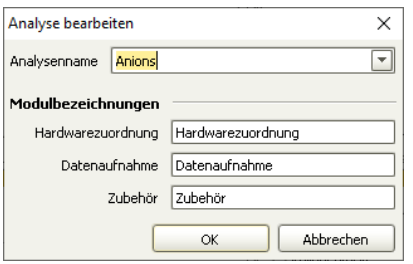
Im oberen Teil des Unterfensters **Geräte** erscheint die Abbildung des **940 Professional IC Vario**.



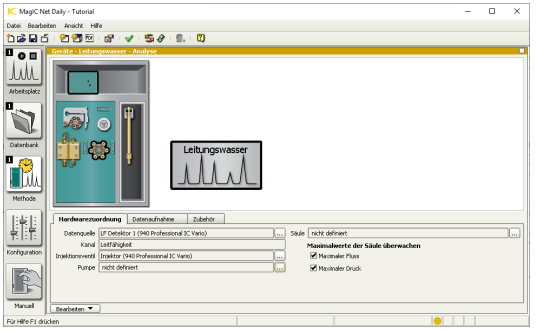
Analysennamen ändern (optional)

1 Im oberen Teil des Unterfensters **Geräte** das Symbol der Analyse **Anions** anklicken.

2 Über das Menü **Bearbeiten ► Bearbeiten** das Dialogfenster **Analyse ändern** öffnen.



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



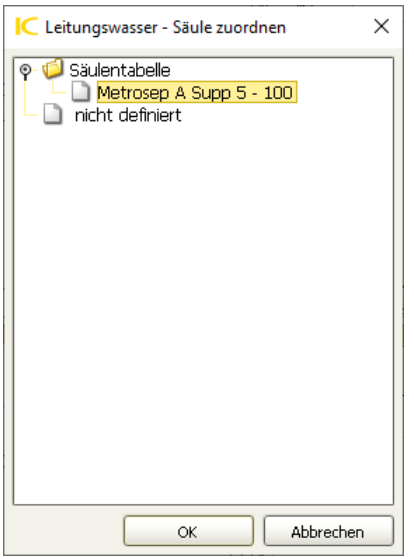
Parameter für Analyse definieren

1 Das Symbol **Leitungswasser** anklicken.

2 **Registerkarte Hardwarezuordnung bearbeiten**

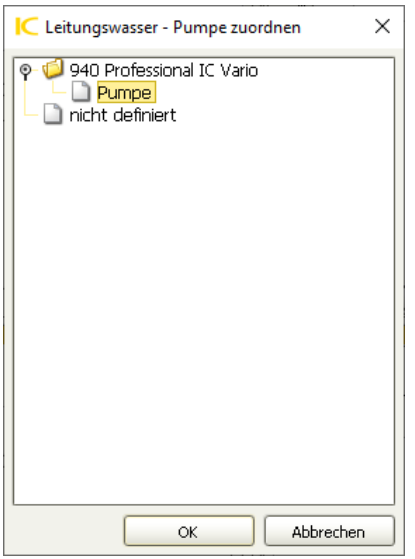
- Die Registerkarte **Hardwarezuordnung** wählen.
- Im Feld **Datenquelle** auf die Schaltfläche ... klicken.
- Im Dialogfenster **Leitungswasser - Datenquelle zuordnen** unter **940 Professional IC Vario 1 > LF Detektor 1** den Eintrag **Leitfähigkeit** markieren und **[OK]** anklicken.
- Im Feld **Kanal** wird automatisch **Leitfähigkeit** eintragen.
- Im Feld **Injektionsventil** auf die Schaltfläche ... klicken.
- Im Dialogfenster **Leitungswasser - Injektionsventil zuordnen** unter **940 Professional IC Vario 1** den Eintrag **Injektor** markieren und **[OK]** anklicken.
- Im Feld **Säule** auf die Schaltfläche ... klicken.

- Im Dialogfenster **Leitungswasser - Säule zuordnen** unter **Säulentabelle** den Eintrag der erfassten Säule **Metrosep A Supp 5 - 100** markieren und **[OK]** anklicken.

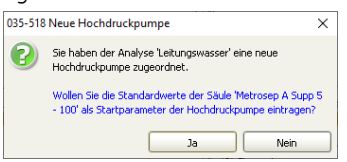


- Im Feld **Pumpe** auf die Schaltfläche ... klicken.

- Im Dialogfenster **Leitungswasser - Pumpe zuordnen** unter **940 Professional IC Vario 1** den Eintrag **Pumpe** markieren und **[OK]** anklicken.



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



Die Standardparameter der Säule werden in die Startparameter der Pumpe übernommen.

3 Registerkarte Datenaufnahme bearbeiten

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

4 **Registerkarte Zubehör bearbeiten**

- Die Registerkarte **Zubehör** wählen.
- Auf die Schaltfläche **[Hinzufügen]** klicken.
- In der Auswahlliste des Dialogfensters **Zubehör hinzufügen** den **Pumpschlauch H_2SO_4** auswählen.
- **[OK]** anklicken.

Der Pumpschlauch wird in die Zubehörtabelle eingetragen. Die Pumpschlauchverbindung wird auf die gleiche Art der Tabelle hinzugefügt.

Parameter für IC-Gerät definieren

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

Die Registerkarten der Module des **940 Professional IC Vario 1** erscheinen und können editiert werden.

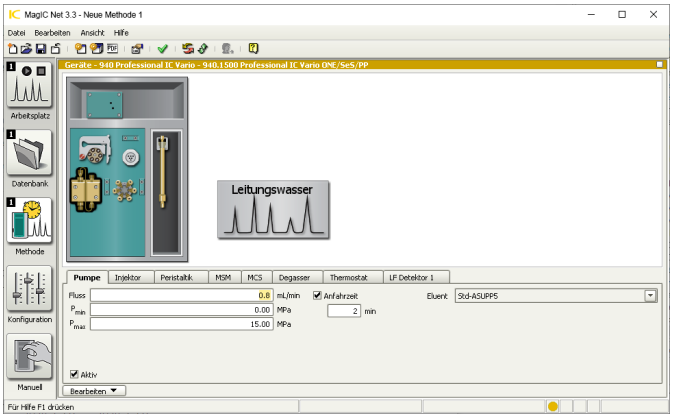
HINWEIS

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

2 **Registerkarte Pumpe bearbeiten**

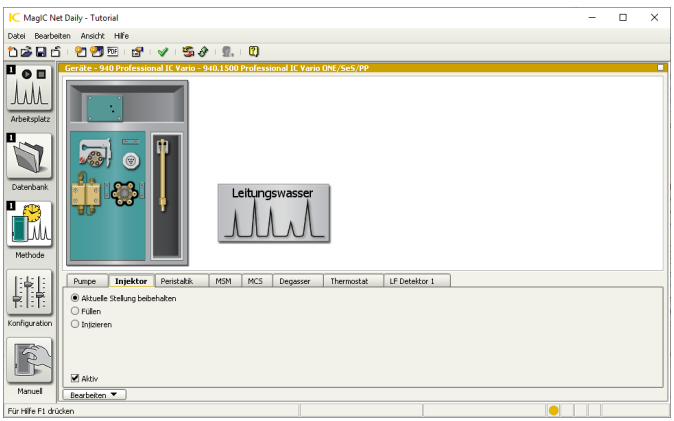
- Registerkarte **Pumpe** wählen (oder auf das Symbol der Pumpe klicken).
- Die Werte der Felder **Fluss**, **P_{min}**, **P_{max}** und **Anfahrzeit** werden automatisch eingelesen.

- In der Auswahlliste **Eluent** den vorher definierten Eluenten **Std-ASUPP5** wählen.



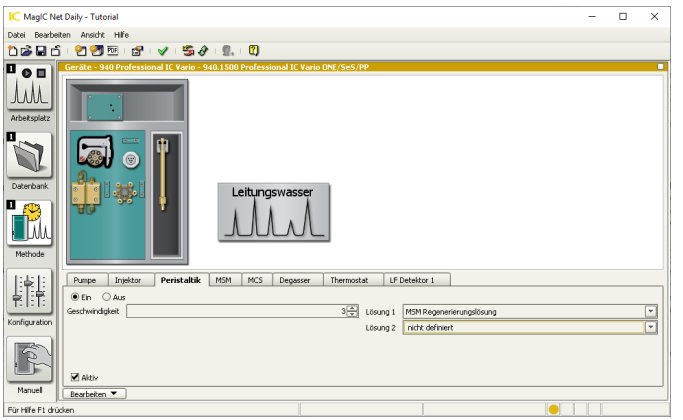
3 Registerkarte Injektor bearbeiten

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



4 Registerkarte Peristaltik bearbeiten

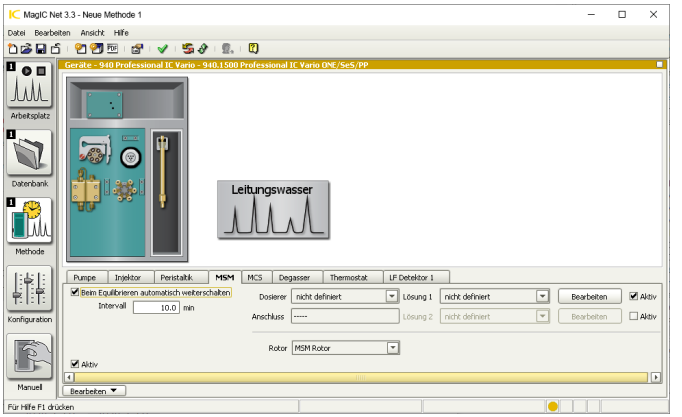
- Die Registerkarte **Peristaltik** wählen (oder auf das Symbol der Peristaltikpumpe klicken).
- Die Option **Ein** aktivieren.
- Im Feld **Geschwindigkeit** den Wert **1** eintragen. (Es gibt 7 Geschwindigkeitsstufen, mit 6 Umdrehungen/min pro Stufe.)
- In der Auswahlliste **Lösung 1** die Lösung **MSM Regenerierlösung H_2SO_4** wählen.



5 Registerkarte MSM bearbeiten

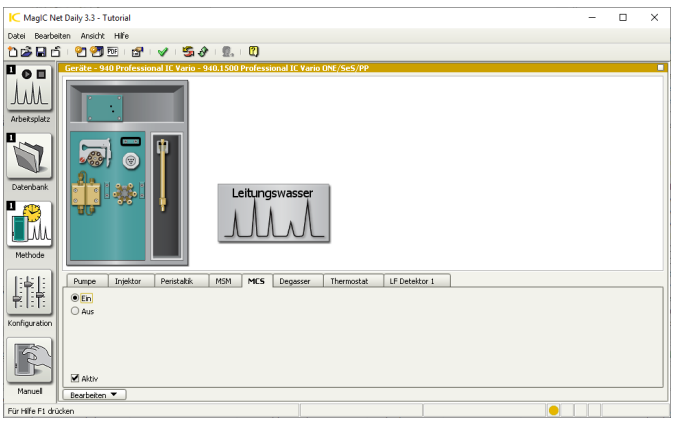
- Die Registerkarte **MSM** wählen (oder auf das Symbol des MSM klicken).

- Die Standardeinstellungen übernehmen.
  Das automatische Weiterschalten alle 10 Minuten sollte aktiviert sein. Das Kontrollkästchen für die Dosino-Regeneration kann deaktiviert werden, falls der Suppressor mit einer Peristaltikpumpe regeneriert wird.



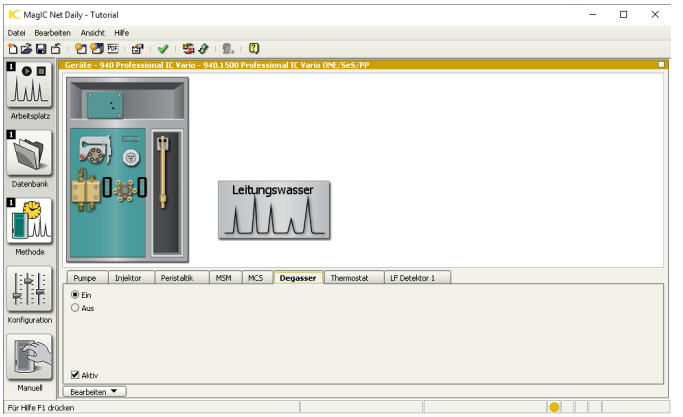
6 Registerkarte MCS bearbeiten

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



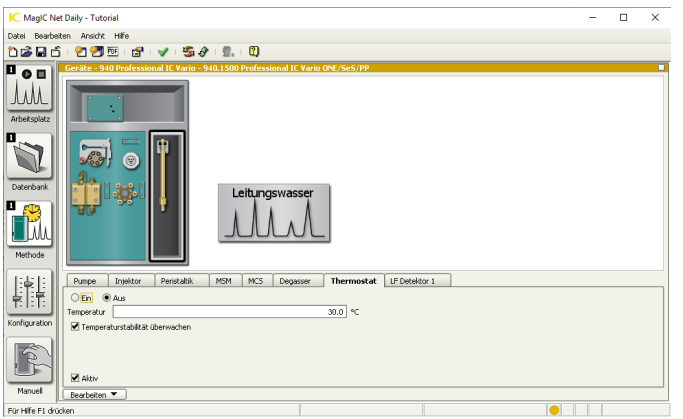
7 Registerkarte Degasser bearbeiten

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



8 Registerkarte Thermostat bearbeiten

- Die Registerkarte **Thermostat** wählen (oder auf das Symbol des Thermostats klicken).
- Den Säulenthermostat einschalten und **Temperaturstabilität überwachen** deaktivieren.



9 Registerkarte LF Detektor 1 bearbeiten

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

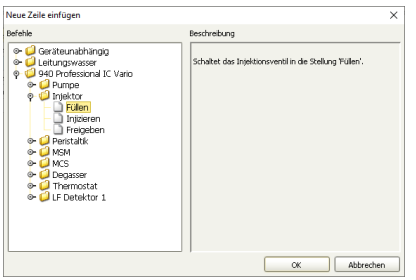
3.1.3 Zeitprogramm

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 einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **940 Professional IC Vario ► Injektor ► Füllen** wählen.

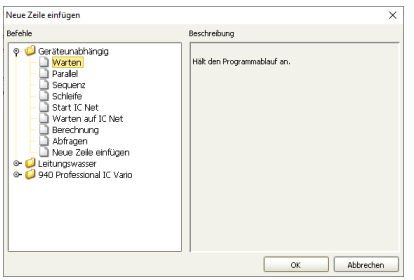


- Mit **[OK]** bestätigen.
  Das Dialogfenster **940 Professional IC Vario - Injektor - Füllen** wird geöffnet.
- Die Zeitangabe **0** min übernehmen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

2 Programm unterbrechen

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

- Die unterste Zeile des Zeitprogramms markieren. Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **Geräteunabhängig ► Warten** wählen.

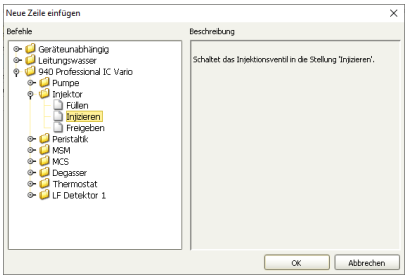


- Mit **[OK]** bestätigen.
  Das Dialogfenster **Warten** wird geöffnet.
- Die Option **Programm anhalten und warten auf [Weiter]** markieren.
- Die Schaltfläche anklicken und einen Text für die Meldung eingeben, zum Beispiel: Füllen Sie die Probenschleife mit der zu injizierenden Lösung und klicken Sie anschliessend auf **[Weiter]**.
- Zweimal mit **[OK]** bestätigen.

3 Injektionsventil auf Injizieren schalten

- Die unterste Zeile des Zeitprogramms markieren. Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile einfügen** öffnen.

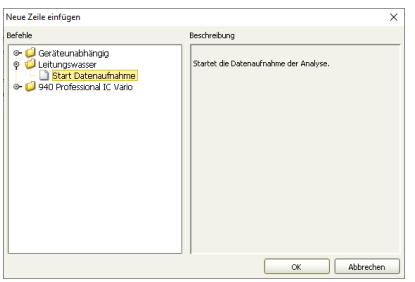
- Im linken Fensterteil unter Befehle **940 Professional IC Vario ▶ Injektor ▶ Injizieren** wählen.



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

4 Datenaufnahme starten

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



- Mit **[OK]** bestätigen.
  Das Dialogfenster **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	Nr.
0.0	940 Professional IC Vario 1	Injektor	Füllen			1
			Warten	Manuell weiter		3
0.0	940 Professional IC Vario 1	Injektor	Injizieren			4
0.0	Leitungswasser		Start Datenaufnahme			5

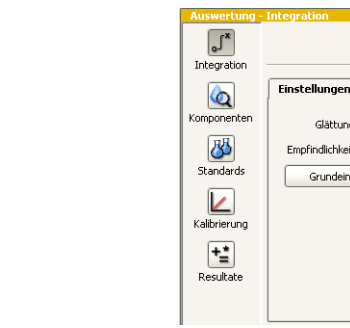
3.1.4 Auswertung

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.



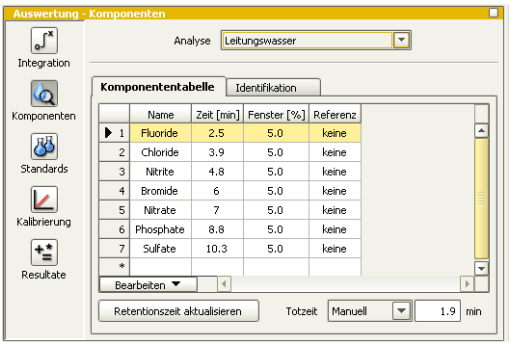
In der Auswahlliste **Analyse** ist automatisch der Analysenname **Leitungswasser** eingetragen.

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.



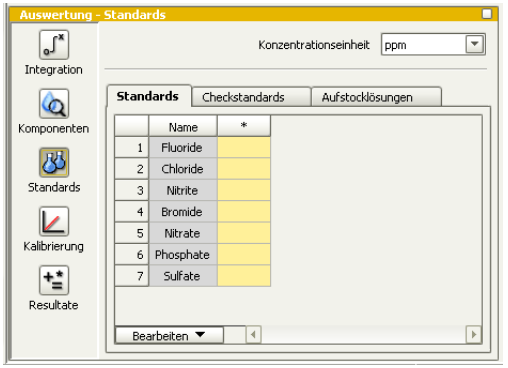
2 Die Einträge auf den Registerkarten **Komponententabelle** und **Identifikation** werden übernommen.

Standards

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

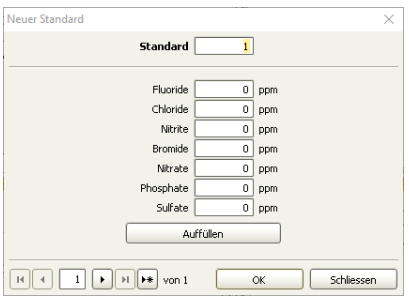
1 Auf die Schaltfläche **Standards** klicken.

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.

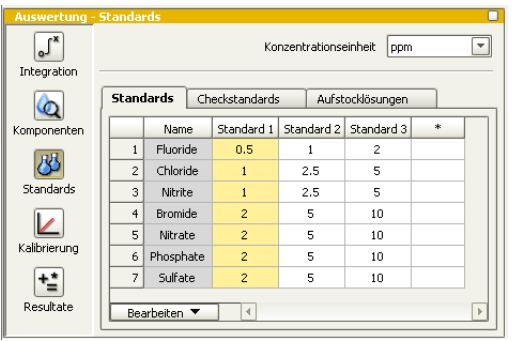


4 Im Feld **Fluorid** den Konzentrationswert **0.5** eintragen. In den Feldern **Chlorid** und **Nitrit** als Wert jeweils **1**, und in den Feldern **Bromid**, **Nitrat**, **Phosphat** und **Sulfat** jeweils den Wert **2** eingeben.

5 ▸ anklicken, um den nächsten Standard zu öffnen.

6 Die Schritte **3** bis **5** für die Eingabe der Konzentrationen von Standard 2 und Standard 3 wiederholen. Die Nummer des nächsten Standards ist im Feld **Standard** automatisch eingetragen. Die Konzentrationen der Komponenten in Standard 2 und Standard 3 sind in der folgenden Tabelle angegeben:

Tabelle mit den Standardkonzentrationen:



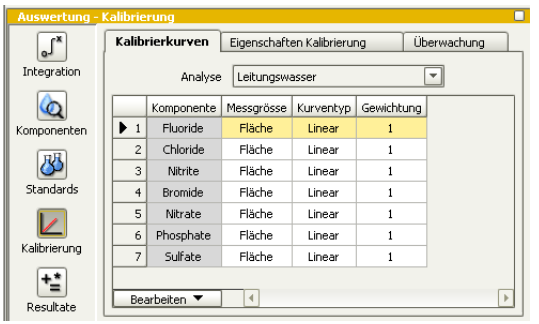
	Name	Standard 1	Standard 2	Standard 3	*
1	Fluoride	0.5	1	2	
2	Chloride	1	2.5	5	
3	Nitrite	1	2.5	5	
4	Bromide	2	5	10	
5	Nitrate	2	5	10	
6	Phosphate	2	5	10	
7	Sulfate	2	5	10	

Kalibrierung

Die Kalibrierung wird nach der Methode der externen Standards durchgeführt. Die Peakflächen im Chromatogramm einer unbekannten 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.



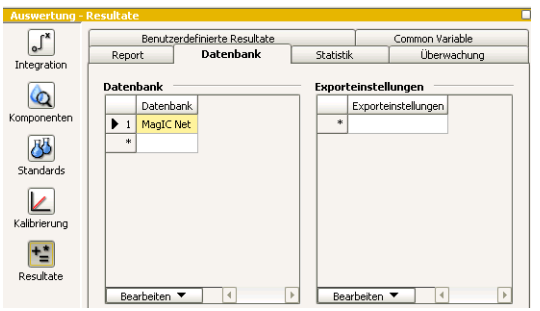
In der Methodenvorlage sind die Komponentennamen, die Messgrösse, der Kurventyp und die Gewichtung vorgegeben. Die Tabelle kann zeilenweise editiert werden. Entweder über das Menü **Bearbeiten ► Bearbeiten** oder mit einem Doppelklick auf eine Zeile, der das Dialogfenster **Kalibrierkurve** der entsprechenden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

Resultate

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

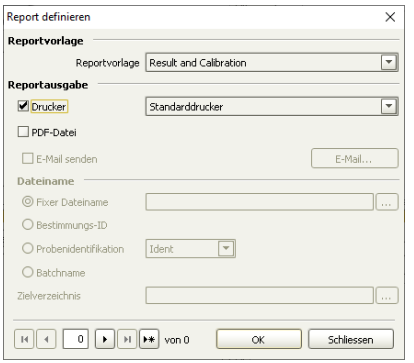
- Die Schaltfläche **Resultate** anklicken.



- Die Registerkarte **Datenbank** auswählen.
- Im Bereich **Datenbank** die Datenbank wählen, in der die Bestimmungsdaten abgelegt werden sollen. Standardmässig ist die Datenbank **MagIC Net** angegeben. Weitere Datenbanken können im Bereich **Datenbank**, über die Datenbankverwaltung erstellt werden.

2 Resultate ausdrucken (optional)

- 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, Seite 103)*.

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, Seite 26)

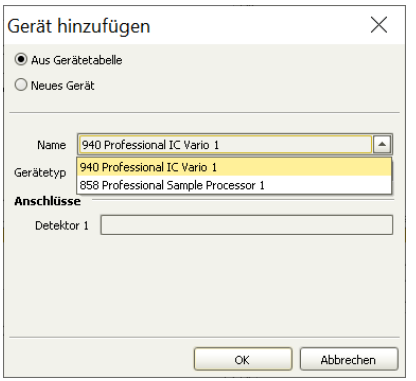
3.2.2 Geräte und Startparameter definieren

Geräte zusammenstellen

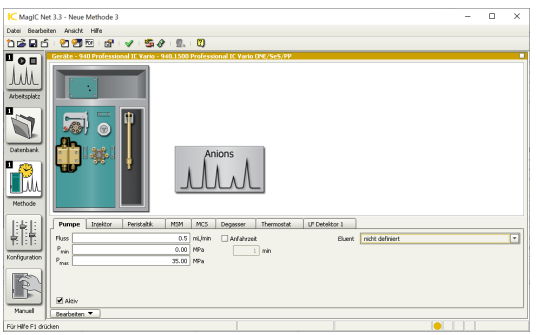
1. Im Unterfenster **Geräte** das Menü **Bearbeiten ► Hinzufügen ► Geräte** anklicken.

2 Im Dialogfenster **Geräte hinzufügen** die Option **Aus Gerätetabelle** wählen.

3 Im Feld **Name** das Gerät **940 Professional IC Vario** auswählen und **[OK]** anklicken.



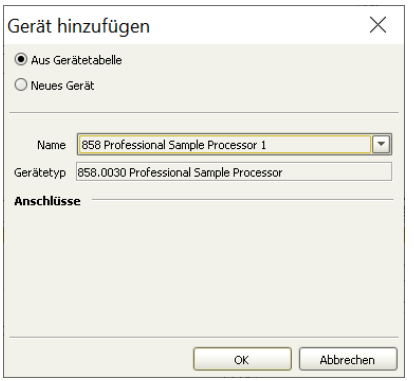
Im oberen Teil des Unterfensters **Geräte** erscheint die Abbildung des **940 Professional IC Vario**.



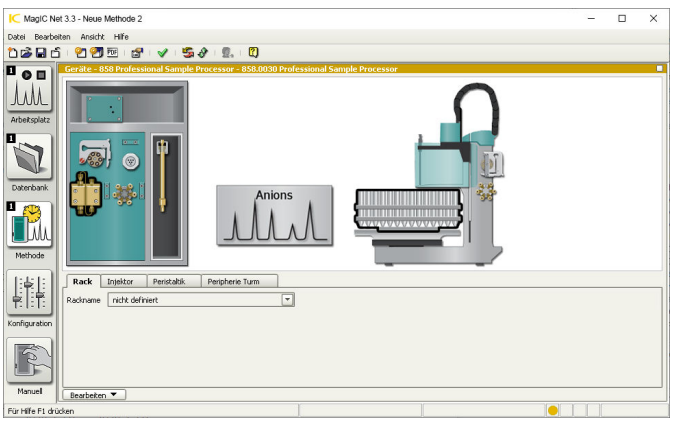
4 Im Unterfenster **Geräte** das Menü **Bearbeiten ▶ Hinzufügen ▶ Geräte** anklicken.

5 Im Dialogfenster **Geräte hinzufügen** die Option **Aus Gerätetabelle** wählen.

6 Im Feld **Name** das Gerät **858 Professional Sample Processor** auswählen und **[OK]** anklicken.



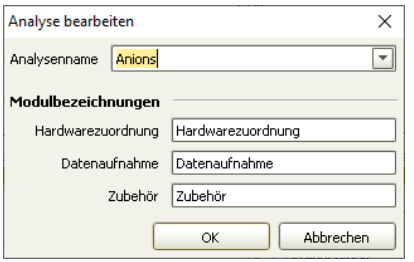
Im oberen Teil des Unterfensters **Geräte** erscheint die Abbildung des **858 Professional Sample Processor**.



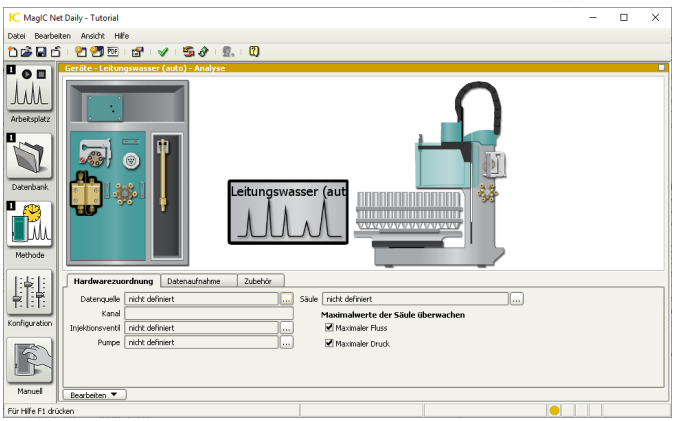
Analysennamen ändern (optional)

1 Im oberen Teil des Unterfensters **Geräte** das Symbol der Analyse **Anions** anklicken.

2 Über das Menü **Bearbeiten ▶ Bearbeiten** das Dialogfenster **Analyse bearbeiten** öffnen.



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



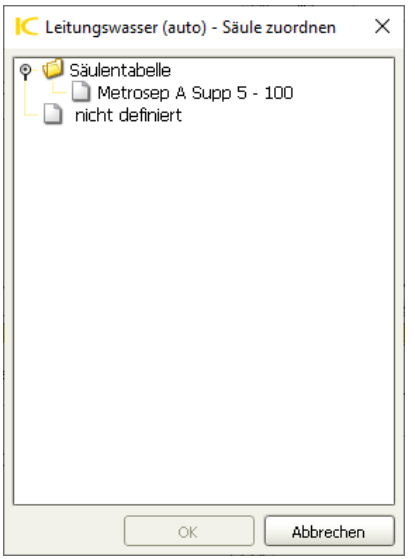
Parameter für Analyse definieren

1 Das Symbol **Leitungswasser (auto)** anklicken.

2 **Registerkarte Hardwarezuordnung bearbeiten**

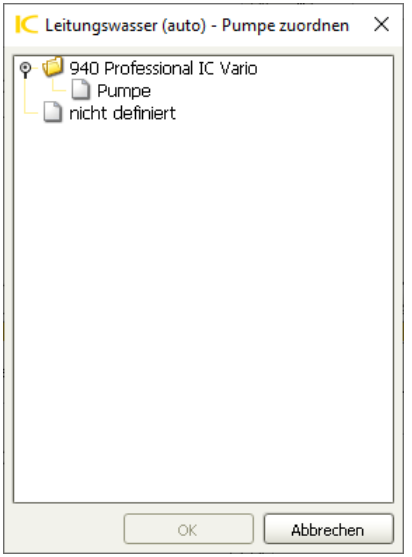
- Die Registerkarte **Hardwarezuordnung** wählen.
- Im Feld **Datenquelle** auf die Schaltfläche ... klicken.
- Im Dialogfenster **Leitungswasser (auto) - Datenquelle zuordnen** unter **940 Professional IC Vario ► LF Detektor 1** den Eintrag **Leitfähigkeit** markieren und **[OK]** anklicken.
- Im Feld **Kanal** wird automatisch **Leitfähigkeit** eingetragen.
- Im Feld **Injektionsventil** auf die Schaltfläche ... klicken.
- Im Dialogfenster **Leitungswasser (auto) - Injektionsventil zuordnen** unter **940 Professional IC Vario** 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 - 100** markieren und **[OK]** anklicken.

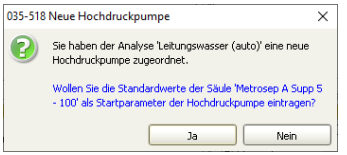


- Im Feld **Pumpe** auf die Schaltfläche ... klicken.

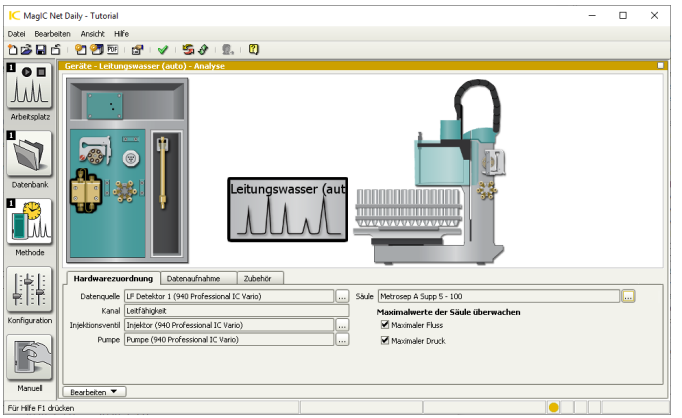
- Im Dialogfenster **Leitungswasser (auto) - Pumpe zuordnen** unter **940 Professional IC Vario** den Eintrag **Pumpe** markieren und **[OK]** anklicken.



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



Die Standardparameter der Säule werden in die Startparameter der Pumpe übernommen.
Die Registerkarte **Hardwarezuordnung** sieht wie folgt aus:



3 Registerkarte Datenaufnahme bearbeiten

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

4 Registerkarte Zubehör bearbeiten

- Die Registerkarte **Zubehör** wählen.
- Auf die Schaltfläche **[Hinzufügen]** klicken.
- In der Auswahlliste des Dialogfensters **Zubehör hinzufügen** den Pumpschlauch H_2SO_4 auswählen.
- **[OK]** anklicken.

Der Pumpschlauch wird in die Zubehörtabelle eingetragen.

Die Pumpschlauchverbindung kann auf die gleiche Art hinzugefügt werden *(siehe Kapitel 2.6, Seite 19)*.

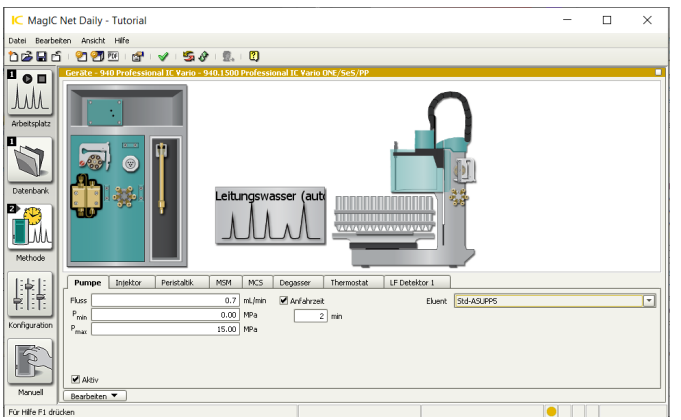
Parameter für IC-Gerät definieren

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

Die Registerkarten der Module des **940 Professional IC Vario** erscheinen und können editiert werden.

2 **Registerkarte Pumpe bearbeiten**

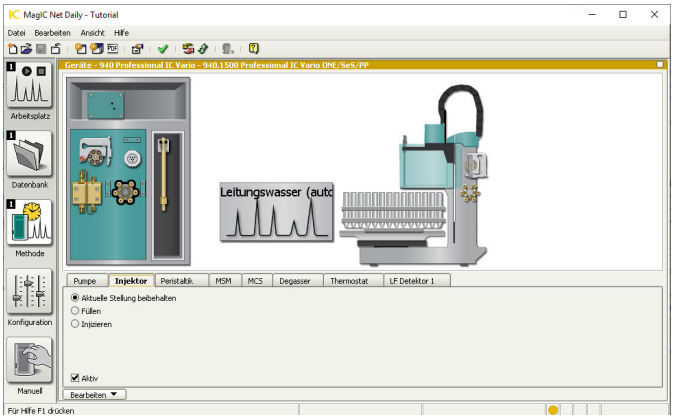
- Registerkarte **Pumpe** wählen (oder auf das Symbol der Pumpe klicken).
- Die Werte der Felder **Fluss**, **P_{min}**, **P_{max}** und **Anfahrzeit** werden automatisch eingelesen.
- In der Auswahlliste **Eluent** den vorher definierten Eluenten **Std-ASUPP5** wählen.



3 **Registerkarte Injektor bearbeiten**

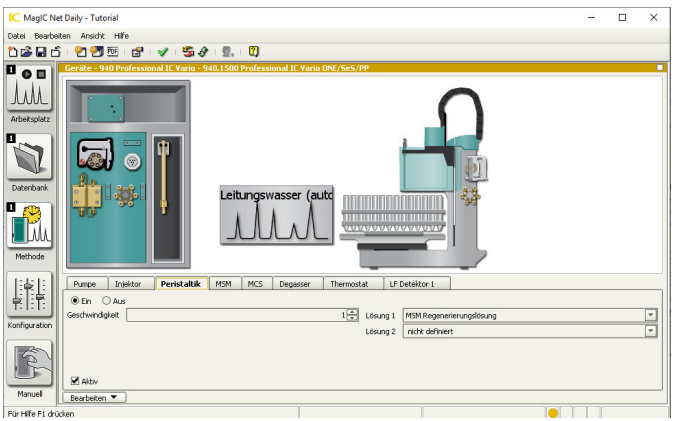
- Die Registerkarte **Injektor** wählen (oder auf das Symbol des Injektors klicken).

- Die Standardeinstellungen übernehmen.



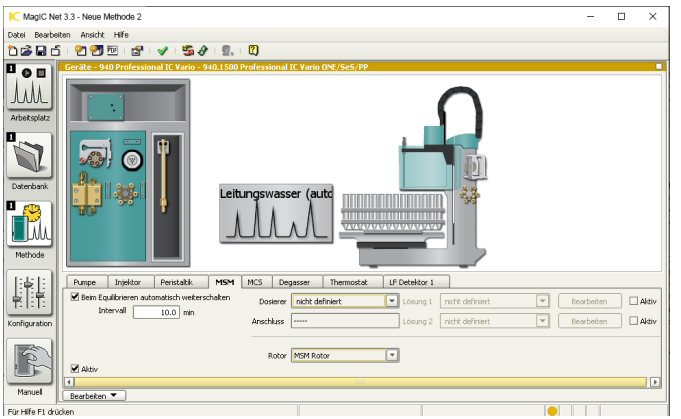
4 Registerkarte Peristaltik bearbeiten

- Die Registerkarte **Peristaltik** wählen (oder auf das Symbol der Peristaltikpumpe klicken).
- Die Option **Ein** aktivieren.
- Im Feld **Geschwindigkeit** den Wert **1** eintragen. (Es gibt 7 Geschwindigkeitsstufen, mit 6 Umdrehungen/min pro Stufe.)
- In der Auswahlliste **Lösung 1** die Lösung **MSM Regenerierlösung H_2SO_4** auswählen.



5 Registerkarte MSM bearbeiten

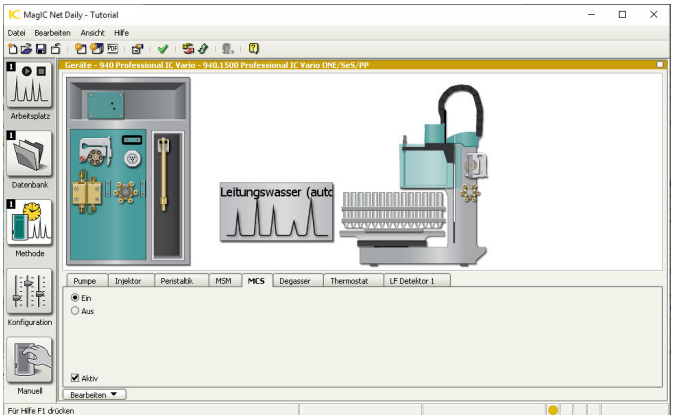
- Die Registerkarte **MSM** wählen (oder auf das Symbol des MSM klicken).
- Die Standardeinstellungen übernehmen. Das Kontrollkästchen für die Dosino-Regeneration kann deaktiviert werden, falls der Suppressor mit einer Peristaltikpumpe regeneriert wird.



6 Registerkarte MCS bearbeiten

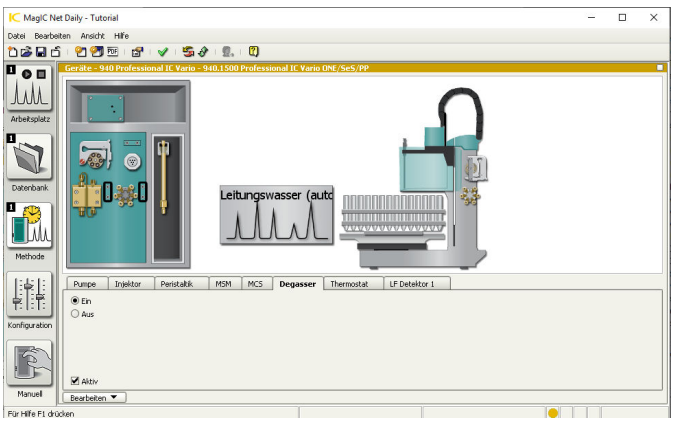
- Die Registerkarte **MCS** wählen (oder auf das Symbol des MCS klicken).

- Die Standardeinstellungen übernehmen.



7 Registerkarte Degasser bearbeiten

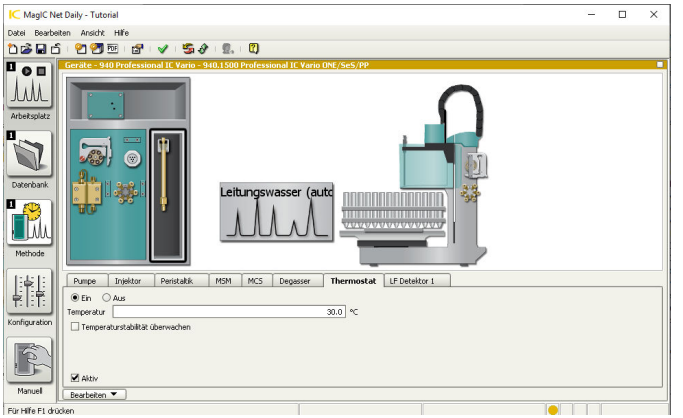
- Die Registerkarte **Degasser** wählen (oder auf das Symbol des Degassers klicken).
- Die Standardeinstellungen übernehmen.



8 Registerkarte Thermostat bearbeiten

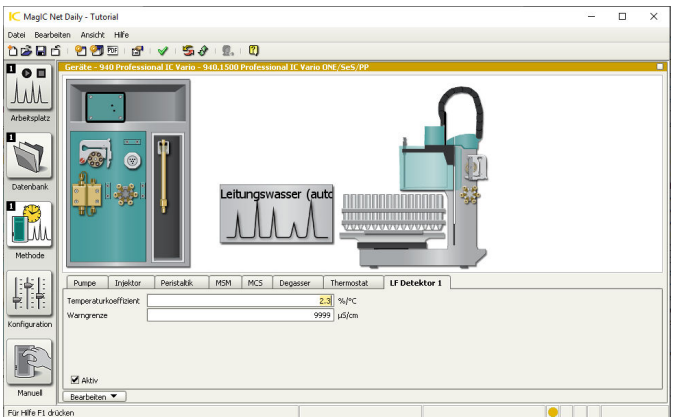
- Die Registerkarte **Thermostat** wählen (oder auf das Symbol des Säulenthermostats klicken).

- Thermostat einschalten und das Kontrollkästchen **Temperaturstabilität überwachen** deaktivieren.



9 Registerkarte LF Detektor 1 bearbeiten

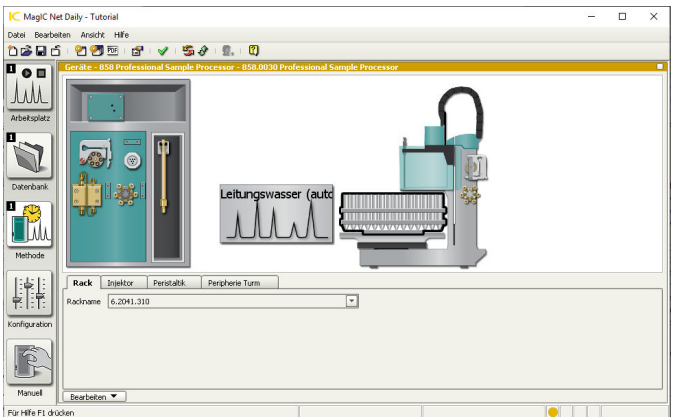
- Die Registerkarte **LF Detektor 1** wählen (oder auf das Symbol des LF Detektors klicken).
- Die Standardeinstellungen übernehmen.



Parameter für Sample Processor definieren

1 Registerkarte Rack bearbeiten

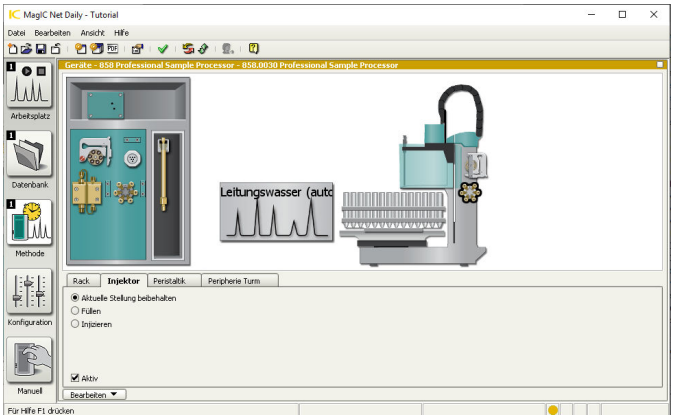
- Die Registerkarte **Rack** wählen.
- In der Auswahlliste **Rackname** die Nummer des Racks wählen.



2 Registerkarte Injektor bearbeiten

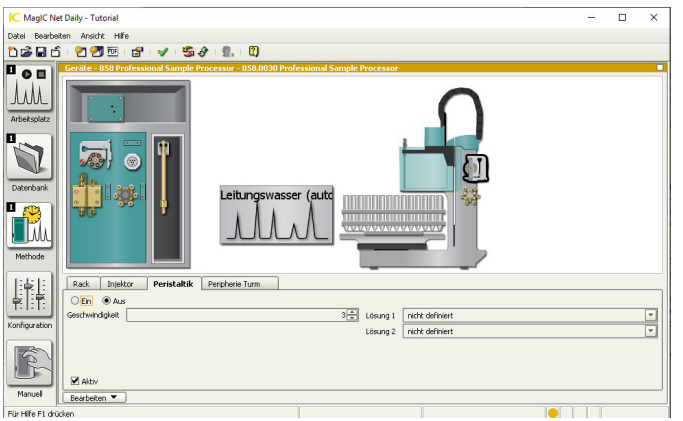
- Die Registerkarte **Injektor** wählen.

- Den Injektor deaktivieren.



3 Registerkarte Peristaltik bearbeiten

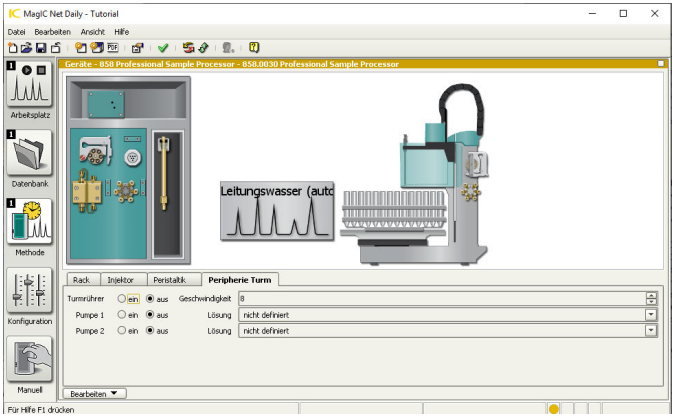
- Die Registerkarte **Peristaltik** wählen.
- Die Optionsschaltfläche **Aus** markieren.



4 Registerkarte Peripherie Turm bearbeiten

- Die Registerkarte **Peripherie Turm** wählen.

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



3.2.3 Zeitprogramm

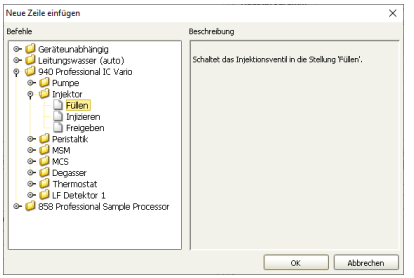
Das Zeitprogramm ist Bestandteil jeder Methode. Es beschreibt Schritt für Schritt den Ablauf der Bearbeitung einer Probe. Die Erstellung des Zeitprogramms erfolgt im Unterfenster **Zeitprogramm** des Programmteils **Methode**. Das Zeitprogramm für einen automatisierten Ablauf von Bestimmungen enthält 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 einfügen** öffnen.

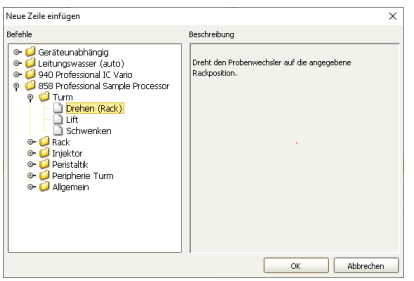
- Im linken Fensterteil unter Befehle **940 Professional IC Vario ► Injektor ► Füllen** wählen.



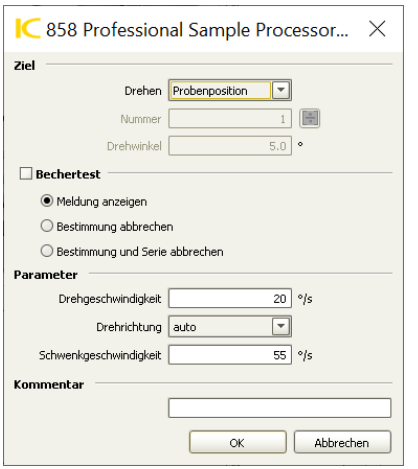
- Mit **[OK]** bestätigen.
  Das Dialogfenster **940 Professional IC Vario - Injektor - Füllen** wird geöffnet.
- Die Zeitangabe **0** min übernehmen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

2 Proben-Position anfahren

- Die unterste Zeile des Zeitprogramms markieren. Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor ► Turm ► Drehen (Rack)** wählen.



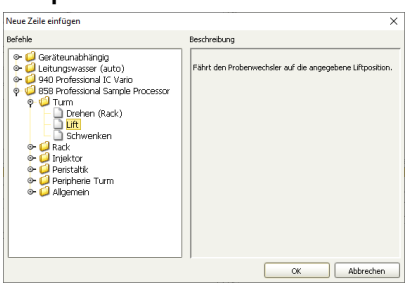
- Mit **[OK]** bestätigen.
  Das Dialogfenster **858 Professional Sample Processor - Turm - Drehen (Rack)** wird geöffnet.



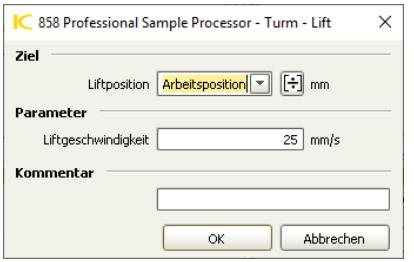
- Die Feldwerte übernehmen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

3 Ansaugnadel in Probe eintauchen

- Die unterste Zeile des Zeitprogramms markieren. Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor ► Turm ► Lift** wählen.



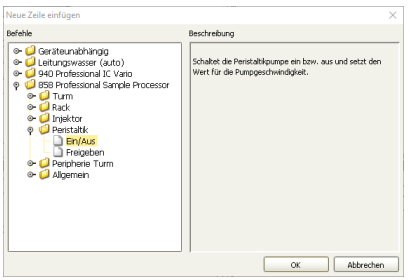
- Mit **[OK]** bestätigen.
  Das Dialogfenster **858 Professional Sample Processor - Turm - Lift** wird geöffnet.
- In der Auswahlliste **Liftposition** den Eintrag **Arbeitsposition** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.

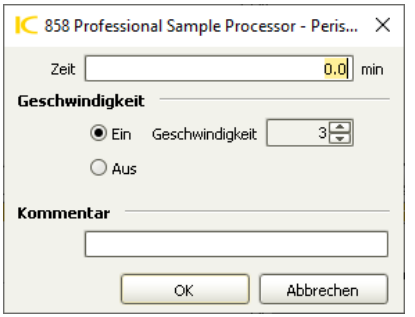
4 Injektionsventil mit Probe füllen

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



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

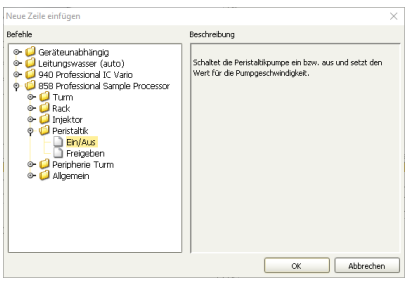
- Die anderen Feldwerte ebenfalls übernehmen.



- Mit **[OK]** bestätigen.

5 Peristaltik-Pumpe des Sample Processor ausschalten

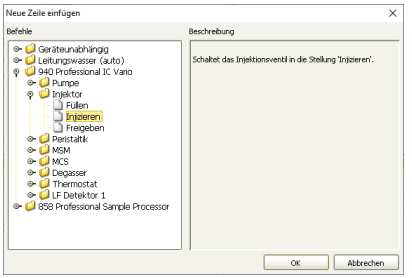
- Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor ► Peristaltik ► Ein/Aus** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.
  Das Dialogfenster **858 Professional Sample Processor - Peristaltik - Ein/Aus** wird geöffnet.
- Im Feld **Zeit** die Zeitangabe **2.5** eintragen.
- Im Bereich **Geschwindigkeit** die Option **Aus** wählen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

6 Injektionsventil auf Injizieren schalten

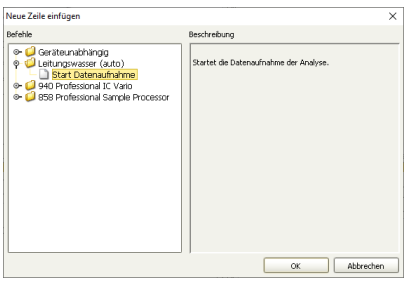
- Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **940 Professional IC Vario ► Injektor ► Injizieren** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.
  Das Dialogfenster **940 Professional IC Vario - Injektor - Injizieren** wird geöffnet.
- Im Feld **Zeit** den Wert **2.5** eintragen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

7 Datenaufnahme starten

- Die unterste Zeile des Zeitprogramms markieren. Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **Leitungswasser (auto) ► Start Datenaufnahme** wählen.

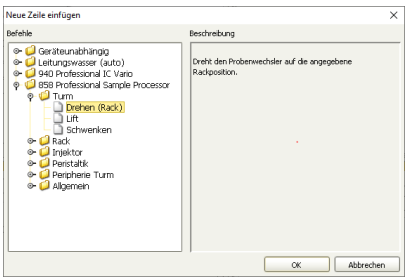


- Mit **[OK]** bestätigen.
  Das Dialogfenster **Leitungswasser (auto) - Start Datenaufnahme** wird geöffnet.
- Im Feld **Zeit** den Wert **2.5** eintragen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

8 Spezialbecher-Position anfahren

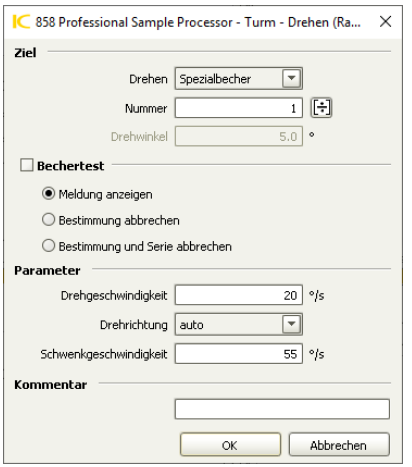
Die sogenannten Spezialbecher besitzen ein grosses Volumen (z. B. 250 mL) und sie enthalten meistens die Spüllösung. Bevorzugt werden diese Becher auf hohe Rackpositionen gesetzt, um mit Probenserien bei Position 1 beginnen zu können. Für Spezialbecher müssen die Liftpositionen separat zugewiesen werden.

- Über das Menü **Bearbeiten ► Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile einfügen** öffnen.
- Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor ► Turm ► Drehen (Rack)** wählen.



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

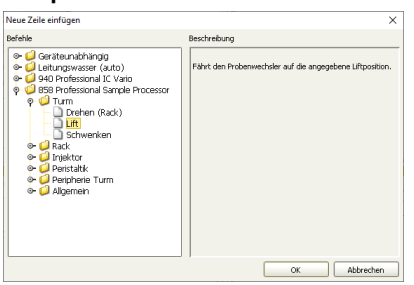
- In der Auswahlliste **Drehen** den Eintrag **Spezialbecher** wählen und im Feld **Nummer** den Wert **1** eintragen.



- Mit **[OK]** bestätigen.

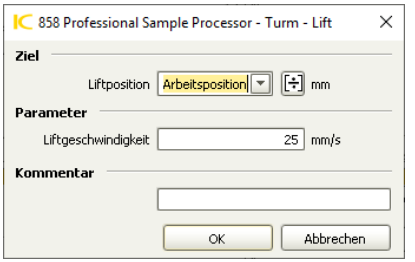
9 Ansaugnadel in Spezialbecher eintauchen

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



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

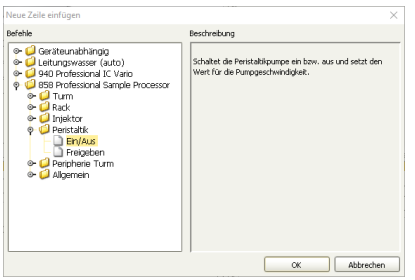
- In der Auswahlliste **Liftposition** den Eintrag **Arbeitsposition** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.

10 Spülen einschalten

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

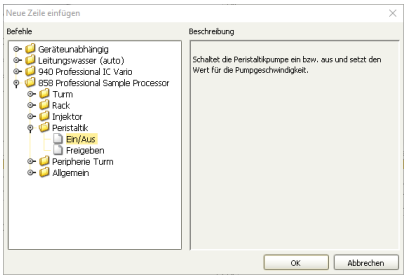


- Mit **[OK]** bestätigen.
  Das Dialogfenster **858 Professional Sample Processor - Peristaltik - Ein/Aus** wird geöffnet.
- Im Feld **Zeit** die Zeitangabe **0** min übernehmen.
- Die anderen Feldwerte ebenfalls übernehmen.
- Mit **[OK]** bestätigen.

11 Spülen ausschalten

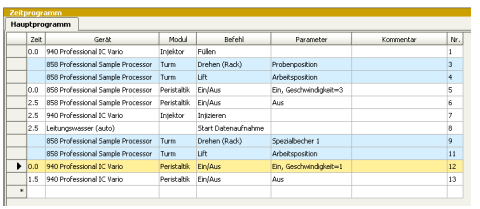
- Über das Menü **Bearbeiten ▶ Neu** das Dialogfenster **Neue Zeile einfügen** öffnen.

- Im linken Fensterteil unter Befehle **858 Professional Sample Processor ► Peristaltik ► Ein/Aus** wählen.



- Mit **[OK]** bestätigen.
  Das Dialogfenster **858 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	940 Professional IC Vario	Injektor	Füllen			1
	858 Professional Sample Processor	Turm	Drehen (Rack)	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	940 Professional IC Vario	Injektor	Injizieren			7
2.5	Leitungswasser (auto)		Start Datenaufnahme			8
	858 Professional Sample Processor	Turm	Drehen (Rack)	Spezialbecher 1		9
	858 Professional Sample Processor	Turm	Lift	Arbeitsposition		11
0.0	940 Professional IC Vario	Peristaltik	Ein/Aus	Ein, Geschwindigkeit=1		12
1.5	940 Professional IC Vario	Peristaltik	Ein/Aus	Aus		13
*						

3.2.4 Auswertung

(siehe Kapitel 3.1.4, Seite 41)

3.2.5 Methode speichern

Methode speichern

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

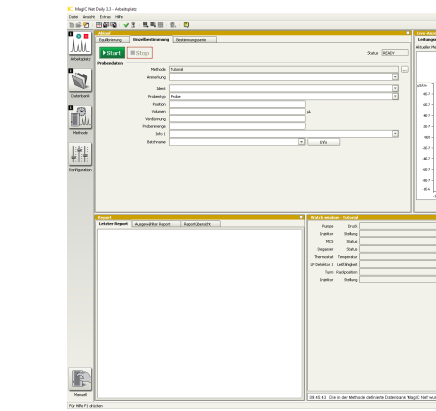
1. Über das Menü **Datei ▶ Speichern unter...** das Dialogfenster **Methode speichern** öffnen.
2. Im Feld **Methodenname** als Name für die Methode **Leitungswasser (auto)** eingeben.
3. **[Speichern]** anklicken.

4 Bestimmung durchführen

In diesem Kapitel lernen Sie:

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

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



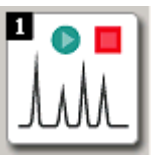
Ablauf	Steuerung von Abläufen und Verwaltung der Probendaten
Liveanzeige 1	Darstellung des Chromatogramms während der Analyse
Report	Anzeige der Reporte von Analysen
Watch window	Informationen über die Methode und die zugehörigen Geräte
Zeitprogramm	Visualisierung des Ablaufs der Methode
Liveanzeige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

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

4.1 Equilibrierung

Equilibrierung starten

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



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

2. Im Unterfenster **Ablauf** die Registerkarte **Equilibrierung** wählen.

3. Im Feld **Methode** auf die Schaltfläche ... klicken.

4. Im Dialogfenster **Methode öffnen** die Methode **Leitungswasser** oder **Leitungswasser (auto)** markieren.

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

5. **[Start HW]** anklicken.

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

4.2 Retentionszeiten manuell anpassen

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

Einzelmessung eines Standards

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

2. Im Unterfenster **Ablauf** die Registerkarte **Einzelbestimmung** wählen.

3. Im Feld **Methode** die Methode **Leitungswasser** oder **Leitungswasser (auto)** auswählen.

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

5. **Probendaten 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**.
   - Im Feld **Batchname** den Batch **Batch 1** auswählen.

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

   Die Bestimmung wird gestartet und das Zeitprogramm abgearbeitet.

7 Falls eine Methode mit manueller Injektion benutzt wird:

- Sobald die Meldung zum Füllen erscheint, den Injektor manuell füllen.
- Meldung mit **[Weiter]** bestätigen.

Korrektur der Retentionszeiten

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

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

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** die blaue Linie in den entsprechenden Peak ziehen.

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.

8 Die Methode mit dem Menüpunkt **Datei ► Speichern...** oder dem Symbol speichern.

4.3 Standards und Probe manuell messen

Standards

1 In den Programmteil **Arbeitsplatz** wechseln.

2 Im Unterfenster **Ablauf** die Registerkarte **Einzelbestimmung** wählen.

3 Im Feld **Methode** kontollieren, ob die Methode **Leitungswasser** ausgewählt ist.

4 In der Auswahlliste **Probentyp** den **Standard 1** wählen.

5 **Probendaten 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**.
- Im Feld **Batchname** den Batch **Batch 1**.

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

Die Bestimmung wird gestartet und das Zeitprogramm abgearbeitet.

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

7 Falls eine Methode mit manueller Injektion benutzt wird:

- Sobald die Meldung zum Füllen erscheint, den Injektor manuell füllen mit Hilfe einer Spritze.
- Meldung mit **[Weiter]** bestätigen.

Die Datenaufnahme wird gestartet und die Bestimmung zu Ende geführt.

Die Schritte **4** bis **7** 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. Diese Anzeige kann individualisiert werden. Dazu mit der rechten Maustaste in das **Watch window** klicken. Den Menüpunkt **Eigenschaften Watch Window** wählen. Die Anzeige wie gewünscht anpassen und die Einstellungen mit **[OK]** bestätigen.

Probe

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

2 **Probendaten eingeben**

Geben Sie in die Felder folgende Werte ein:

- Im Feld **Ident** den Namen **Leitungswasser**.
- Im Feld **Position** den Wert **1**.
- Im Feld **Volumen** den Wert **20**.
- Im Feld **Verdünnung** den Wert **1**.
- Im Feld **Batchname** den Batch **Batch 1** auswählen.

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

Die Bestimmung wird gestartet und das Zeitprogramm abgearbeitet.

4 Falls eine Methode mit manueller Injektion benutzt wird:

- Sobald die Meldung zum Füllen erscheint, den Injektor manuell mit Leitungswasser füllen.
- Meldung mit **[Weiter]** bestätigen.

5 Nach der Messung aller Proben und Standards das Gerät ausschalten. Dazu die Registerkarte **Equilibrierung** wählen und **[Stop HW]** anklicken.

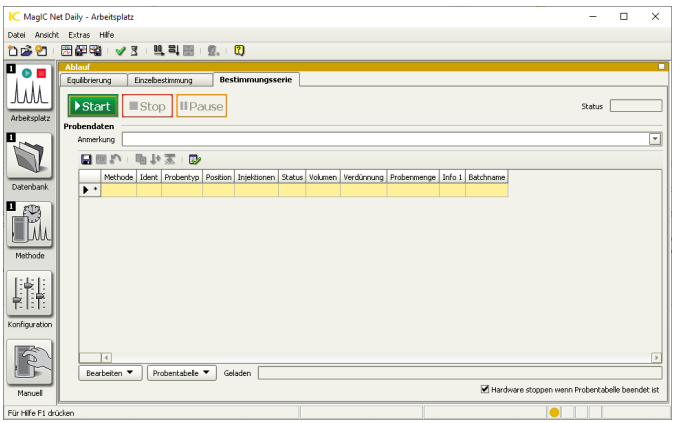
4.4 Standards und Probe automatisch messen

Genau wie bei einer manuellen Messung wird das IC-Gerät zuerst equilibriert *(siehe Kapitel 4.1, Seite 74)* und die Retentionszeiten werden angepasst *(siehe Kapitel 4.2, Seite 75)*. Anschliessend wird die Probentabelle erstellt und die Standards und die Probe gemessen.

Probentabelle erstellen

1 In den Programmteil **Arbeitsplatz** wechseln.

2 Im Unterfenster **Ablauf** die Registerkarte **Bestimmungsserie** wählen.



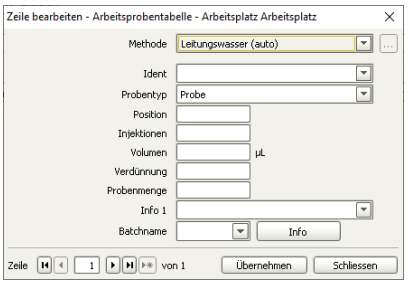
3 Über das Menü **Bearbeiten ▶ Zeile bearbeiten** das Dialogfenster **Zeile bearbeiten - Arbeitsplatzprobentabelle** öffnen.

4 Im Feld **Methode** auf die Schaltfläche ... klicken.

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 **Batchname** den Batch **Batch 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**, **Probenmenge** und **Batchname** werden die Werte von Standard 1 ebenfalls automatisch übernommen.

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

8 Werte für Probe eingeben

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

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

9 Hardware stoppen

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

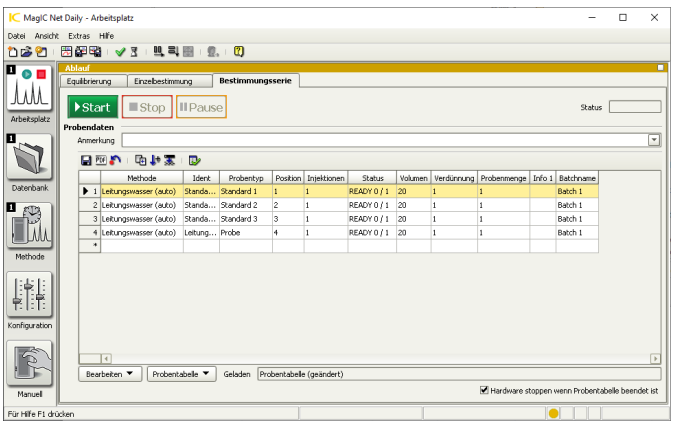
HINWEIS

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

10 Probentabelle speichern

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

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



11 Bestimmungsserie überprüfen

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

Standards und Proben messen

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

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

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

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

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

5 Aktionen in der Datenbank

Der Programmteil **Datenbank** beinhaltet folgende Unterfenster:

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

5.1 Bestimmungen sichten

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

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

Sortieren

1 Klicken Sie auf das Symbol des Programmteils **Datenbank**.

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

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

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

4 Zweiter Klick auf denselben Spaltentitel.

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

Schnellfilter

1 Das Menü **Bestimmungen ▶ Filter ▶ Schnellfilter** oder das Symbol 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 dienen soll, und mit der linken Maustaste doppelt darauf klicken.

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

3 Um den Filter wieder zu entfernen, das Menü **Bestimmungen ▶ Filter ▶ Filter entfernen** oder das Symbol anklicken.

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 Im Abschnitt **Feld** auf die Schaltfläche **[Weitere...]** klicken und im Dialogfenster unter **Methode ► Identifikation** den Eintrag **Methodenname** auswählen.

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.

Suchen

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

1 Über das Menü **Bestimmungen ► Suchen** das Dialogfenster **Suchen - Datenbank 'MagIC Net'** öffnen.

2 Im Abschnitt **Suchen in** auf die Schaltfläche **[Weitere...]** klicken und im Dialogfenster unter **Bestimmung ► Aufnahme** den Eintrag **Anwender (Kurzname)** auswählen.

3 Im Feld **Suchbegriff** Ihren Kurznamen eingeben.

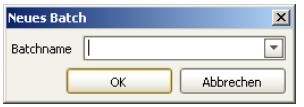
4 **[Weitersuchen]** anklicken.

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

Batch (benutzerdefinierter Filter)

1 Neuen Batch erstellen

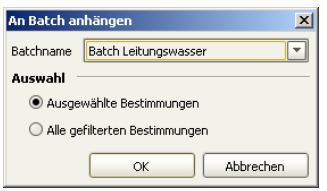
- Über das Menü **Bestimmungen ► Batch ► Neuer Batch** das Dialogfenster **Neuer Batch** öffnen.



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

2 Bestimmungen zu Batch hinzufügen

- In der Tabelle die Datensätze markieren, die dem Batch hinzugefügt werden sollen.
- Über das Menü **Bestimmungen ► Batch ► An Batch anhängen** das Dialogfenster **An Batch anhängen** öffnen.



- Im Auswahlfeld **Batchname** den Namen **Batch Leitungswasser** wählen.
  Datensätze können auch einem Batch hinzugefügt werden, der im **Arbeitsplatz** erstellt wurde. Dazu im Auswahlfeld **Batchname** den Namen eines entsprechenden Batches wählen.
- Die Option **Ausgewählte Bestimmungen** markieren.
- **[OK]** anklicken.

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

Es können maximal 500 Datensätze an einen Batch angehängt werden.

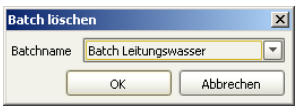
3 Batch öffnen

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

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

4 Batch löschen

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



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

Der Batch wird aus der Datenbank gelöscht.

5 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

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

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

Resultate anzeigen

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

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

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

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

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

3 In der Auswahlliste **Verfügbare Spalten** einen gewünschten Parameter anklicken. Den gewählten Parameter mit der

Schaltfläche [>>] in die Liste **Angezeigte Spalten** verschieben.

4 Schritt 3 für jeden gewünschten Parameter wiederholen.

5 **[OK]** anklicken, um das **Eigenschaften Resultatfenster** zu schliessen.

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

Ausgewählte Bereiche des Chromatogramms vergrössern über Zoom mit Maus

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

1 In der Übersichtstabelle einen Datensatz markieren.

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

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

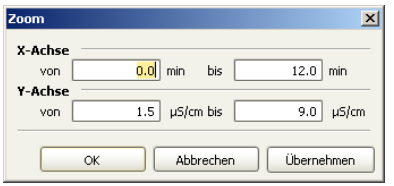
Ausgewählte Bereiche des Chromatogramms vergrössern über Zoom mit Dialog

1 In der Übersichtstabelle einen Datensatz markieren.

Das dazugehörende 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.

Es wird z. B. der Peak von Nitrit vergrössert dargestellt.

Ausgewählte Bereiche des Chromatogramms verkleinern

1 Mit rechter Maustaste in das Chromatogramm klicken. Im Kontextmenü **Unzoom** anklicken.

2 Alternativ kann die Anzeige mit einem Doppelklick ins Chromatogramm zurückgesetzt werden.

Das Chromatogramm wird in seiner ursprünglichen Grösse dargestellt.

Darstellung der Chromatogramme ändern

Sie haben die Möglichkeit, die Eigenschaften eines Chromatogramms zu bearbeiten. Sie können die Darstellung des Chromatogramms, die Beschriftung der Achsen oder die Beschriftung in den Chromatogrammen ändern. Nachfolgend ändern Sie die

Beschriftung der Peaks und der Achsen im Chromatogramm. Gehen Sie wie folgt vor:

1 Peakbeschriftung ändern

- Mit der rechten Maustaste in das Chromatogramm klicken.
- Den Menüpunkt **Eigenschaften** wählen.
- Die Registerkarte **Chromatogramm** wählen.
- Das Kontrollkästchen **Retentionszeit** deaktivieren und das Kontrollkästchen **Konzentration** aktivieren.
- **[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.

Details darstellen

1. Im Unterfenster **Bestimmungsübersicht** die gewünschten Bestimmungen markieren.

2. Über das Menü **Bestimmungen ► Detailübersicht...** das Dialogfenster **Detailübersicht öffnen** öffnen.

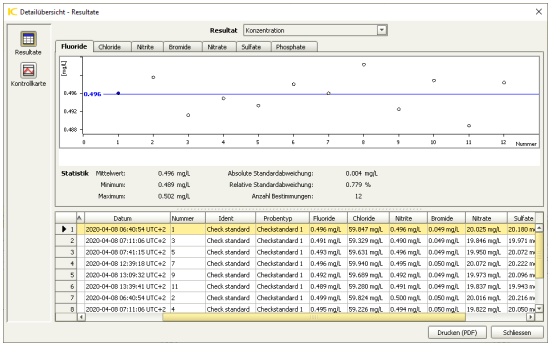
3. Die Option **Ausgewählte Bestimmungen** wählen.

4. Über **[OK]** die Auswahl im Dialogfenster **Detailübersicht öffnen** bestätigen.

   Das Dialogfenster **Detailübersicht - Resultate** zeigt Details zu den gewählten Bestimmungen.

5. In der Auswahlliste **Resultat** die Option **Konzentration** wählen. Für jede Komponente gibt es eine Registerkarte. Die Registerkarte der gewünschten Komponente wählen.

   Für die gewählten Bestimmungen wird die Konzentration der gewählten Komponente grafisch dargestellt. In der Auflistung der Bestimmungen sind die Konzentrationen aller Komponenten ersichtlich.



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

Das Dialogfenster **Resultatübersicht drucken (PDF)** wird geöffnet.

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

Über **[OK]** das Dialogfenster **Resultatübersicht drucken (PDF)** schliessen.

Eine PDF-Datei wird erzeugt.

8 Über **[Schliessen]** das Dialogfenster **Detailübersicht - Resultate** schliessen.

Kurven überlagern

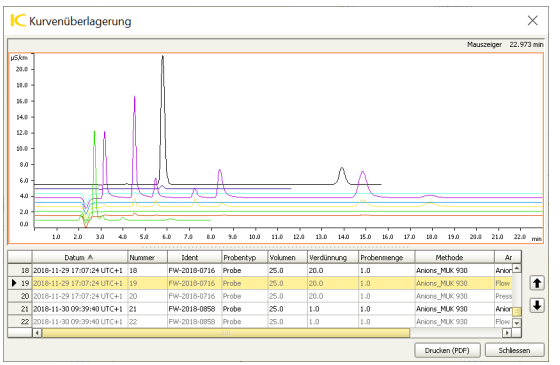
1 Im Unterfenster **Bestimmungsübersicht** die gewünschten Bestimmungen markieren.

2 Über das Menü **Bestimmungen ► Kurven überlagern...** das Dialogfenster **Kurven überlagern** öffnen.

3 Die Option **Ausgewählte Bestimmungen** wählen.

4 Über **[OK]** das Dialogfenster **Kurven überlagern** schliessen.

Das Dialogfenster **Kurvenüberlagerung** zeigt die Kurvenüberlagerung der gewählten Bestimmungen.



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

Das Dialogfenster **Kurvenübersicht drucken (PDF)** wird geöffnet.

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

Über **[OK]** das Dialogfenster **Kurvenübersicht drucken (PDF)** schliessen.

Eine PDF-Datei wird erzeugt.

7 Über **[Schliessen]** das Dialogfenster **Kurvenüberlagerung** schliessen.

5.3 Bestimmungen nachbearbeiten

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

Als Beispiel 1 wird die Auswertung über die Peakhöhe anstelle der Auswertung über die Peakfläche beschrieben, welche in der Methodenvorlage definiert ist.

Als Beispiel 2 werden die Integrationsparameter angepasst.

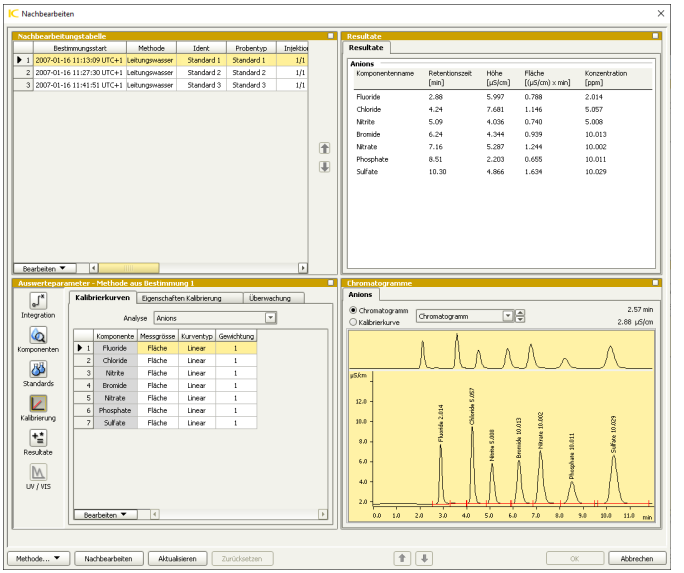
Detailübersicht - Kalibrierung

Beispiel zum Anpassen der Kalibrierung.

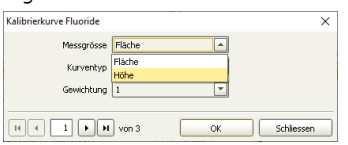
1 **Kalibrierkurve nachbearbeiten**

- Im Unterfenster **Bestimmungsübersicht** die 3 Standards markieren.
- Über das Menü **Bestimmungen ► Nachbearbeiten...** das entsprechende Dialogfenster öffnen.
- Im Unterfenster **Auswerteparameter** auf die Schaltfläche **[Kalibrierung]** klicken.
- Die Registerkarte **Kalibrierkurven** wählen.

- In der Tabelle die erste Komponente (Fluorid) markieren.



- Über das Menü **Bearbeiten ▶ Bearbeiten** das Dialogfenster **Kalibrierkurve Fluorid** öffnen:

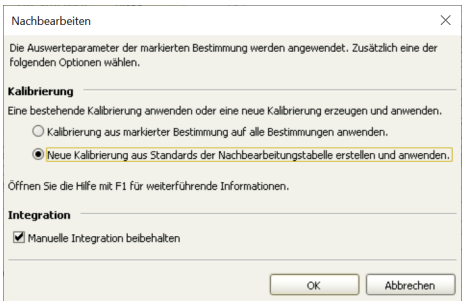


- Im Feld **Messgrösse** als neuen Parameter **Höhe** wählen und **[OK]** anklicken.
- Über das Menü **Bearbeiten ▶ Einstellungen für alle Komponenten übernehmen** die neue Messgrösse für alle Komponenten in der Tabelle übernehmen.
- **[Aktualisieren]** anklicken.

Die Kalibrierkurven der 3 Standards werden neu berechnet.

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

Die Option **Neue Kalibrierung aus Standards der Nachbearbeitungstabelle erstellen und anwenden.** wählen.



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

3 Über **[OK]** das Dialogfenster **Nachbearbeiten** schliessen.

Die geänderten Daten werden gespeichert.

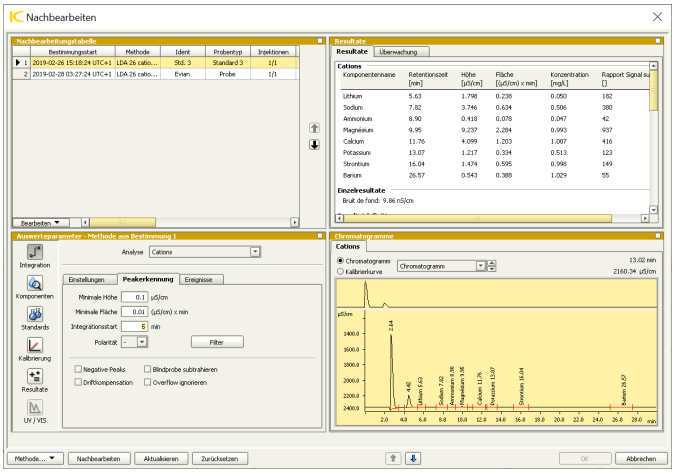
Detailübersicht - Integration

Beispiel zum Anpassen der Integrationsparameter.

1 **Integrationsparameter nachbearbeiten**

- Im Unterfenster **Bestimmungsübersicht** Standard 3 und eine Probe markieren.
- Über das Menü **Bestimmungen ► Nachbearbeiten...** das entsprechende Dialogfenster öffnen.
- Im Unterfenster **Auswerteparameter** auf die Schaltfläche **[Integration]** klicken.
- Die Registerkarte **Peakerkennung** wählen.

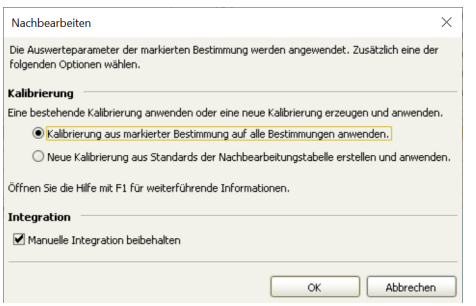
- Der Injektionspeak ist nicht von Interesse. Daher den **Integrationsstart** auf den Wert von **5** min stellen.



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

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

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



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

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

4 Über **[OK]** das Dialogfenster **Nachbearbeiten** schliessen.

Die geänderten Daten werden gespeichert.

5.4 Reportvorlage erstellen

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

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

Reportvorlage anpassen für Kalibrierkurve

1
- Über das Menü **Extras ► Reportvorlage ► Öffnen...** das Dialogfenster **Reportvorlage öffnen** öffnen.
- Die Reportvorlage **Result and Calibration** markieren.
- **[Öffnen]** anklicken.
- Auf die Schaltfläche ▸ klicken, um auf Seite 2 zu wechseln.
- Durch Doppelklick auf das Feld **Kalibrierkurve** das Dialogfenster **Eigenschaften - Kalibrierkurvenfeld** öffnen.

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

2

- Im Auswahlfeld **Komponente** als Beispiel die Komponente **Nitrat** eingeben.
- Im Bereich **Kurvendarstellung** des Dialogfensters **Eigenschaften - Kalibrierkurvenfeld** die Option **aus Datenbank** wählen.
- **[OK]** anklicken.
- Über das Menü **Datei ► Seitenansicht** das Fenster **Reportvorschau** öffnen. Das Fenster **Reportvorschau** zeigt eine Vorschau des Reports mit den gewählten Daten.

3

- Wenn gemäss dem Fenster **Reportvorschau** alle Einstellungen korrekt sind, über das Menü **Datei ► Speichern unter...** das Dialogfenster **Reportvorlage speichern** öffnen.
- Im Dialogfenster **Reportvorlage speichern** im Feld **Name** den Namen **Kalibrierkurve** eintragen.
- **[Speichern]** anklicken.

Neue Reportvorlage erstellen für Resultattabelle/ Chromatogramm

1 **Resultattabelle erstellen**

- Über das Menü **Extras ► Reportvorlage ► Neu ► Formularreport** das Dialogfenster **Reportvorlage - Neuer Formularreport** öffnen.
- Die Reportvorlage **Result and Calibration** markieren.
- **[Öffnen]** anklicken.

- In der Symbolleiste das Icon **Kurve + Resultattabelle** anklicken.
- Den Cursor, der nun die Form eines Kreuzes hat, in der Reportvorlage platzieren, und bei gedrückter linker Maustaste die gewünschte Fläche erzeugen.

Das Dialogfenster **Eigenschaften - Kurven + Resultattabellenfeld** wird geöffnet.

2

- Im Feld **Analyse** den Probennamen **Leitungswasser** eintragen.
- Die Schaltfläche **Resultat** anklicken.
- In der Liste **Verfügbare Resultate** den Eintrag **Auflösung** markieren und mit der Schaltfläche >> in die Liste **Angezeigte Resultate** verschieben.
- **Auflösung** markieren und **[Nachkommastelle]** anklicken.
- Im Dialogfenster **Nachkommastellen - Auflösung** den Wert **1** auswählen.
  Für die Nachkommastellen der **Konzentration** den Wert **2** eintragen.
- **[OK]** anklicken.

3

- 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.

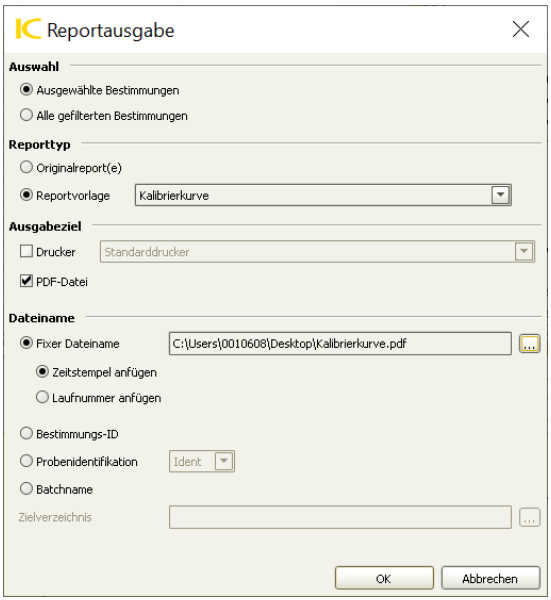
3. Im Bereich **Auswahl** die Option **Ausgewählte Bestimmung** markieren.

4. Im Bereich **Reporttyp** die Option **Reportvorlage** markieren und die Reportvorlage **Kalibrierkurve** auswählen.

5. Im Bereich **Ausgabeziel** das Kontrollkästchen **Drucker** deaktivieren und das Kontrollkästchen **PDF-Datei** aktivieren.

6. Im Bereich **Dateiname** das Symbol ... anklicken. Im Dialogfenster **Datei für Report wählen** im Feld **Dateiname** den Namen **Kalibrierkurven** eintragen und einen geeigneten Pfad für die Ablage wählen.

7. **[OK]** 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 **Resultate** auswählen.

5 Im Bereich **Ausgabeziel** das Kontrollkästchen **Drucker** deaktivieren und das Kontrollkästchen **PDF-Datei** aktivieren.

6 Die Schaltfläche ... anklicken, im Dialogfenster **Speichern unter** im Feld **Dateiname** den Namen **Probe** eintragen und einen geeigneten Pfad für die Ablage wählen.