

Bedienungsanleitung

ASpect LS

Software für AAS



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

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



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

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

Dokumentationsnummer 143:203.23

Ausgabe E (04/2024)

Technische Dokumentation Analytik Jena GmbH+Co. KG

© Copyright 2024, Analytik Jena GmbH+Co. KG

Inhaltsverzeichnis

1	Software ASpect LS	7
1.1	ASpect LS starten	7
1.1.1	Fenster Quickstart	7
1.1.2	Mit Worksheet starten	9
1.1.3	Ohne Worksheet starten	10
1.1.4	Lampenwechsler bestücken	11
1.2	ASpect LS beenden und Analysengerät ausschalten	14
1.3	Allgemeine Bedienungshinweise	14
1.3.1	Die Arbeitsoberfläche	14
1.3.2	Hilfe verwenden	16
1.3.3	Übersicht über Menüleiste, Werkzeugleiste und Symbolleiste	16
1.3.4	Häufig verwendete Bedienelemente	18
2	Worksheets verwalten	21
2.1	Worksheet neu erstellen	22
2.2	Worksheet editieren	24
2.3	Worksheet löschen	24
2.4	Worksheet laden	24
3	Methoden	26
3.1	Methoden erstellen, speichern und laden	26
3.1.1	Neue Methode erstellen	26
3.1.2	Methoden speichern	27
3.1.3	Methoden laden	28
3.2	Methodenparameter spezifizieren	28
3.2.1	Analysenlinien spezifizieren (Fenster Methode Linien)	29
3.2.2	Auswerteparameter der Signale spezifizieren (Fenster Methode Auswertung)	31
3.2.3	Flammenparameter spezifizieren (Fenster Methode Flamme)	33
3.2.4	Ofenprogramm eingeben (Fenster Methode Ofen)	35
3.2.5	Hybrid- und HydrEA-Systeme spezifizieren (Fenster Methode Hybrid)	42
3.2.6	Parameter für Probengeber spezifizieren (Fenster Methode Probenzufuhr)	46
3.2.7	Kalibrierparameter spezifizieren (Fenster Methode Kalib.)	54
3.2.8	Statistikparameter spezifizieren (Fenster Methode Statistik)	61
3.2.9	Qualitätskontrollproben spezifizieren (Fenster Methode QCS)	63
3.2.10	Qualitätskontrolle spezifizieren (Fenster Methode QCC)	67
3.2.11	Ergebnisausgabe spezifizieren (Fenster Methode Ausgabe)	69
4	Sequenzen	70
4.1	Sequenzen erstellen, speichern und laden	70
4.1.1	Neue Sequenz erstellen	70
4.1.2	Sequenz speichern	70
4.1.3	Sequenz laden	71
4.2	Fenster Sequenz	72
4.3	Messungen und Aktionen in einer Sequenz spezifizieren	73
5	Probeninformationsdaten	77
5.1	Probeninformationsdaten erstellen, speichern, öffnen	77
5.2	Fenster Proben-ID	77

5.3	Informationsdaten für Proben und QC-Proben spezifizieren	80
6	Analysen durchführen und Ergebnisse berechnen	81
6.1	Übersicht der Menübefehle und Schaltflächen zum Starten der Analysen im Hauptfenster.....	81
6.2	Messroutine starten	81
6.3	Messroutine unterbrechen, stoppen und fortsetzen	84
6.4	Aktionen der Sequenz wiederholen.....	84
6.5	Analysenergebnisse Neuberechnen	85
6.6	Messungen parallel zur laufenden Analyse auswerten.....	86
6.7	Anzeige der Ergebnisse und des Analysenfortschritts im Hauptfenster	87
6.7.1	Karte Sequenz/Ergebnisse	87
6.7.2	Karte Sequenz	88
6.7.3	Karte Ergebnisse	88
6.7.4	Karte Übersicht	92
6.7.5	Karte Feststoff.....	92
6.8	Details der Probeneinzelwerte anzeigen.....	93
6.9	Feststoffanalytik mit Graphitofentechnik	95
6.9.1	Funktionen auf der Karte Feststoff	96
6.9.2	Feststoffproben messen.....	98
6.9.3	Daten bereits vorbereiteter Proben speichern	99
6.9.4	Proben einer Feststoffanalyse nachmessen.....	100
6.10	System spülen	101
7	Kalibration	102
7.1	Kalibrierkurve anzeigen.....	103
7.2	Kalibrierergebnisse anzeigen.....	104
7.3	Kalibrierkurve modifizieren.....	105
7.4	Kalibrierstandards durch Nachmessen ersetzen.....	105
8	Qualitätskontrolle.....	107
8.1	QC-Karten anzeigen	107
8.2	Parameter der QC-Karten.....	108
8.3	Einträge und Grenzen der QC-Karten.....	109
9	Gerät und Zubehör steuern und kontrollieren	110
9.1	Spektrometer	110
9.1.1	Optische Parameter am Spektrometer einstellen.....	110
9.1.2	Lampenenergie kontrollieren (novAA 400 P/ZEEnit).....	112
9.1.3	Lampenenergie kontrollieren (novAA 800).....	114
9.1.4	Lampendrift untersuchen.....	116
9.1.5	Lampenspektrum aufnehmen und Peaks ermitteln.....	117
9.1.6	Untergrundkorrekturen für Zeeman-AAS ZEEnit 700/650 P.....	119
9.1.7	Untergrundkorrektur für ZEEman-AAS ZEEnit 700 Q.....	122
9.1.8	Spektrometer justieren.....	123
9.2	Flamme	124
9.2.1	Kontrolle der Flammenfunktionen	124
9.2.2	Flamme optimieren	127
9.2.3	Flamme löschen.....	130
9.3	Ofen	130
9.3.1	Ofenprogramm ansehen	130

9.3.2	Matrixmodifikatoren, Anreicherung und Vorbehandlung ansehen	131
9.3.3	Atomisierungstemperatur optimieren.....	132
9.3.4	Ofenprogramm graphisch darstellen oder Graphitrohr beschichten.....	134
9.3.5	Weitere Ofenfunktionen	135
9.3.6	Ofenposition einstellen (novAA 800)	138
9.4	Hydridsystem	138
9.4.1	Funktionen des Hydridsystems kontrollieren.....	139
9.4.2	Hydridsystem auf Fehler testen	141
9.5	Probengeber für Flammentechnik.....	142
9.5.1	Probengeber für Flammentechnik spezifizieren	143
9.5.2	Technische Parameter der Probengeber für Flammentechnik	144
9.5.3	Tauchtiefe und Dosiergeschwindigkeit der Probengeber einstellen	146
9.5.4	Funktionsprüfung des Probengebers für Flammentechnik.....	146
9.5.5	Probengeber justieren.....	149
9.5.6	Positionsübersicht im Probengeber für Flammentechnik.....	150
9.5.7	Zugabe von Reagenzien zur Probe	150
9.6	Probengeber für Graphitofentechnik	150
9.6.1	Probengeber für Graphitofentechnik spezifizieren.....	151
9.6.2	Technische Parameter des Probengebers für Graphitofentechnik.....	152
9.6.3	Automatische Tiefenverstellung bei Probengeber für Graphitofentechnik	154
9.6.4	Probengeber zum Graphitofen ausrichten.....	156
9.6.5	Funktionsprüfung des Probengebers für Graphitofentechnik	156
9.6.6	Positionsübersicht für Probengeber für Graphitrohrtechnik.....	158
9.7	Feststoffprobengeber SSA 600.....	158
9.7.1	Funktionsprüfung des Feststoffprobengebers.....	159
9.7.2	Justierung des Feststoffprobengebers.....	159
10	Datenmanagement.....	161
10.1	Druckfunktionen	161
10.1.1	Analysenergebnisse drucken.....	161
10.1.2	Weitere Analysenparameter und Einstellungen drucken.....	163
10.1.3	Protokollvorlagen anpassen.....	163
10.2	Verwaltung für alle Dateitypen	165
10.2.1	Methoden und Sequenzen verwalten	165
10.2.2	Ergebnisdaten verwalten	168
10.2.3	Protokollvorlagen importieren.....	169
10.2.4	Worksheets importieren, exportieren und löschen	169
10.3	Einheiten spezifizieren	170
10.4	Datenbanken für Stocks und QC-Proben verwalten	170
10.5	Vordefinierte Bemerkungen erstellen	171
10.6	Daten in das ASCII/CSV-Format exportieren	171
10.7	Windows-Zwischenablage verwenden.....	172
11	Kochbuch	174
12	Optionen - ASpect LS anpassen	175
12.1	Ansichtsoptionen.....	175
12.2	Speicherpfade	176
12.3	Exportoptionen.....	177
12.4	Optionen zum fortlaufenden ASCII-Export	177
12.5	Optionen zum Analysenablauf.....	178

12.6	Allgemeine Einstellungen für die Kalibration und Blindwertkorrektur	180
13	Optionales FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul.....	182
13.1	Benutzerverwaltung	182
13.1.1	Benutzerverwaltung – Anzeigen und Einstellungen	182
13.1.2	Benutzerebenen konfigurieren	183
13.1.3	Allgemeine Einstellungen der Benutzerverwaltung konfigurieren.....	185
13.1.4	Neues Benutzerkonto anlegen.....	187
13.1.5	Bestehendes Benutzerkonto ändern	188
13.2	Kennwort ändern.....	189
13.3	Audittrail anzeigen, drucken und exportieren	189
13.4	Elektronische Signaturen	190
13.4.1	Messergebnisse signieren	191
13.4.2	Signatur anzeigen.....	191
13.5	AJ File Protection	192
14	Anhang	193
14.1	Übersicht über Markierungen in der Werteanzeige	193
14.2	Speicherorte der ASpect LS Dateien	193

1 Software ASpect LS

ASpect LS ist die Steuer- und Auswertesoftware für die die Atomabsorptionsspektrometer der Typen novAA und ZEEnit von Analytik Jena.

Folgende Zubehöre werden unterstützt:

- Probengeber AS-F/AS-FD und AS 51s/AS 52s für Flammentechnik
- Probengeber AS-GF und MPE 60 für Graphitrohrtechnik
- Hydridsysteme HS60 modular und HS 55 modular
- Hydridsysteme HS60 / HS60A, HS55 / HS55A und Hydridinjektor HS50 (Hybrid/Hg-Kaltdampf-Technik)
- Injektionsschalter SFS 6 (Flammentechnik)
- Feststoffprobengeber SSA 600 mit oder ohne Flüssigdosierung

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

Beschriebene Software-Version Das vorliegende Dokument orientiert sich an der Version ASpect LS 1.8.

Bestimmungsgemäße Verwendung Die Software ASpect LS dient ausschließlich der Ansteuerung der oben genannten Atomabsorptionsspektrometer-Typen und der Auswertung der mit diesen Geräten aufgenommenen Daten.

Der Hersteller übernimmt keine Haftung für Probleme oder Schäden, die durch nichtbestimmungsgemäße Verwendung von ASpect LS verursacht werden.

ASpect LS und die damit zu steuernden Geräte dürfen nur durch ausgebildetes und eingewiesenes Personal bedient werden. Der Anwender muss mit dem Inhalt dieses und des Geräte-Handbuches vertraut sein.

1.1 ASpect LS starten

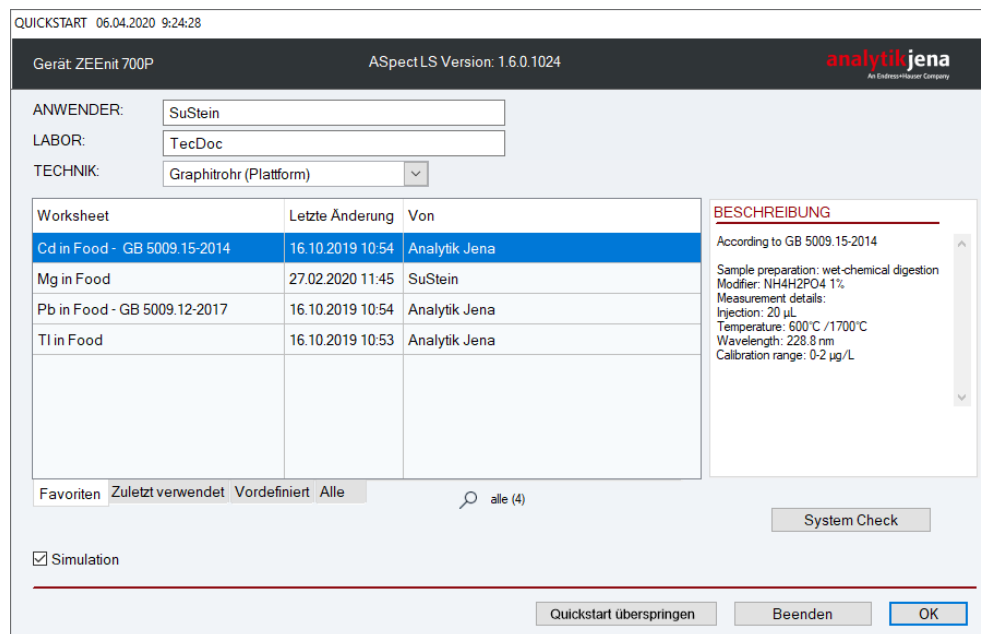
ASpect LS starten Sie zusammen mit dem AAS-Gerät. Bei dieser Prozedur wird das Gerät mit dem PC verbunden und in der Software initialisiert.

- ▶ Schalten Sie das AAS-Gerät und den Probengeber ein.
- ▶ Klicken Sie auf das ASpect LS-Icon auf dem Windows-Desktop klicken.
 - ✓ ASpect LS wird gestartet.
- ▶ Wenn die optionale Benutzerverwaltung installiert ist, erfolgt eine Abfrage von Benutzernamen und Passwort. Erst bei erfolgreicher Eingabe wird das Programm ASpect LS freigegeben.

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

1.1.1 Fenster Quickstart

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



Einstellungen im Fenster Quickstart


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

Option/ Schaltfläche	Beschreibung
Anwender	Bei Verwendung der optional installierbaren Benutzerverwaltung wird der angemeldete Benutzer angezeigt. Wenn die Rechteverwaltung nicht verwendet wird, kann hier manuell ein Benutzer eingetragen werden.
Labor	Es können bis zu 30 Zeichen eingegeben werden. Die zuletzt eingegebene Bezeichnung wird gespeichert und als Information in den Ergebnisprotokollen ausgegeben.
Technik	<p>Je nach Konfiguration des AAS-Gerätes können unterschiedliche Techniken ausgewählt werden.</p> <p>Graphitrohr (Wand) Elektrothermische Atomisierung (EA) im Standardgraphitrohr Die Probe liegt in flüssiger Form vor. Die Atomisierung der Probe erfolgt an der Wand des Graphitrohrs.</p> <p>Graphitrohr (Plattform) Elektrothermische Atomisierung (EA) in einem Graphitrohr mit Plattform Die Probe liegt in flüssiger Form vor. Die Atomisierung der Probe erfolgt auf der Plattform des Graphitrohrs.</p> <p>Flamme Atomisierung mit Brenner-Zerstäuber-System</p> <p>Hydrid Bestimmung von hydridbildenden Metallen und Quecksilber in einer Quarzküvette ggf. in Kombination mit einer Anreicherung von Quecksilber</p> <p>HydrEA Bestimmung von hydridbildenden Metallen und Quecksilber mit Anreicherung im beschichteten Graphitrohr</p> <p>Graphitrohr solid Elektrothermische Atomisierung (EA) in einem Graphitrohr für Feststoffe</p>

Option/ Schaltfläche	Beschreibung
	Die Proben werden auf Probenplattformen mit einem Feststoffprobengeber (SSA 600 oder SSA 6z) in das Graphitrohr überführt.
Simulation	Für Trainings- und Demonstrationszwecke ist es möglich, ASpect LS ohne ein angeschlossenes AAS-Gerät zu betreiben. Bei Aktivierung werden alle Gerätefunktionen (einschließlich Messwerterfassung und -auswertung) im Simulationsmodus abgearbeitet.
System Check	Verbindung zwischen AAS-Gerät und PC (Software) herstellen Bei Klick auf die Schaltfläche erfolgt eine Erkennung und Konfiguration von Spektrometer und Zubehör in Abhängigkeit von der gewählten Atomisierungstechnik. Bei Geräten mit Lampen-Codierung wird geprüft, welche Hohlkathodenlampen (HKL) und Superhohlkathodenlampen (SHKL) im Lampenwechsler eingesetzt sind.
Quickstart überspringen	Ohne Auswahl eines Worksheets zur Oberfläche von ASpect LS wechseln
Beenden	Fenster Quickstart schließen und ASpect LS beenden
OK	Nach Auswahl eines Worksheets zur Oberfläche von ASpect LS wechseln

Worksheet-Tabelle

Die Worksheet-Tabelle zeigt die aktuell verfügbaren Worksheets an, die zur ausgewählten Technik passen. Die 4 Tabs erleichtern Ihnen das Auffinden eines Worksheets:

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

1.1.2 Mit Worksheet starten

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

- ▶ Installieren Sie das für die Technik vorgesehene Zubehör am AAS-Gerät und schalten Sie danach das Zubehör und das AAS-Gerät ein.
- ▶ Starten Sie die Software.

- ✓ Das Fenster **Quickstart** erscheint.
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Technik** die Atomisierungstechnik aus.
- ▶ Klicken Sie auf **System Check**.
 - ✓ Das Gerät und das Zubehör werden initialisiert und mit dem PC/der Software verbunden. Im Feld darüber wird die Gerätekonfiguration angezeigt. Es wird auch geprüft, ob das installierte Zubehör mit der gewählten Technik übereinstimmt.
- ▶ Nehmen Sie die notwendigen Eingaben in den Feldern **Anwender** und **Labor** vor.
- ▶ Markieren Sie in der Worksheet-Tabelle das benötigte Worksheet.
- ▶ Klicken Sie auf **OK**.
 - ✓ Die Oberfläche von ASpect LS erscheint. Die Methode und die Sequenz sind bereits geladen.

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

Sehen Sie dazu auch

 Fenster Quickstart [▶ 7]

1.1.3 Ohne Worksheet starten

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

- ▶ Installieren Sie das für die Technik vorgesehene Zubehör am AAS-Gerät und schalten Sie danach das Zubehör und das AAS-Gerät ein.
- ▶ Starten Sie die Software.
 - ✓ Der **Quickstart** erscheint.
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Technik** die Atomisierungstechnik aus.
- ▶ Klicken Sie auf **System Check**.
 - ✓ Das Gerät und das Zubehör werden initialisiert und mit dem PC/der Software verbunden. Im Feld darüber wird die Gerätekonfiguration angezeigt. Es wird auch geprüft, ob das installierte Zubehör mit der gewählten Technik übereinstimmt.
- ▶ Nehmen Sie die notwendigen Eingaben in den Feldern **Anwender** und **Labor** vor.
- ▶ Klicken Sie auf **Quickstart überspringen**.
 - ✓ Die Programmoberfläche von ASpect LS erscheint.

Allgemeiner Ablauf einer Messroutine

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

- ▶ **Lampen** spezifizieren. Lampen mit RFID-Chip werden bei einigen Gerätemodellen automatisch erkannt und in der Software zur Verfügung gestellt.
- ▶ **Methodenparameter** (Methodenentwicklung) spezifizieren.
- ▶ **Sequenz** erstellen. Diese enthält Proben und Aktionen in der abzuarbeitenden Reihenfolge. Einige probenbeschreibende Daten wie Probenbezeichnung und Position auf dem Probenteller können ebenfalls direkt eingegeben werden und werden mit der Sequenz gespeichert.
- ▶ Für die Routine-Analytik ist es vorteilhaft, eine **Probenidentifikationsdatei** zu erstellen. Diese enthält probenbeschreibende Daten wie Bezeichnung, Verdünnungsfaktor und Probenteller-Positionen. Die Daten werden benötigt, wenn eine Rückrechnung

der Konzentrationen auf die Originalprobe erfolgen soll. Probenidentifikationsdateien sind Textdateien und können daher auch über externe Programme erstellt werden.


► **Messung** starten.

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

Nach dem Starten der **Messung** werden die Ergebniswerte fortlaufend im Hauptfenster eingetragen. Für eine Detailanzeige (Einzelwerte, Signalverläufe) kann die entsprechende Zelle ausgewählt werden. Die zuletzt gemessenen Ergebnisse werden stets an das Ende der Tabelle angefügt, ein Überschreiben ist nicht möglich.

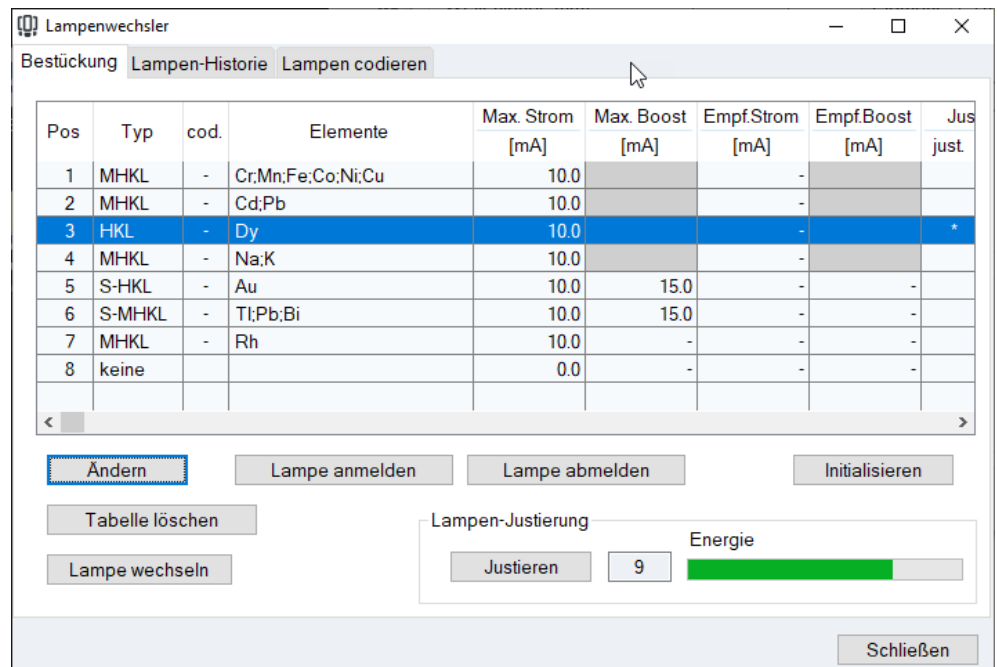
Falls notwendig, kann eine weitere Datenauswertung durch **Neuberechnen** erfolgen. Messdaten können für den Protokolldruck aufbereitet oder exportiert werden.

1.1.4 Lampenwechsler bestücken

- Öffnen Sie mit Klick auf  in der Symbolleiste das Fenster **Spektrometer | Kontrolle**.
- Öffnen Sie mit Klick auf **Lampenwechsler** das gleichnamige Fenster.

Das Fenster **Lampenwechsler** zeigt die aktuelle Bestückung des 6fach- bzw. 8fach-Lampenwechslers. Bei Geräten mit Lampen-Codiereinheit wird die Bestückung des Lampenwechslers für Lampen mit RFID-Chip bei der Initialisierung automatisch ermittelt.

Bei Geräten mit 8fach-Lampenwechsler können auf den Plätze 5 bis 8 Superhohlkathodenlampen (S-HKL) eingesetzt werden. Bei Geräten mit 6fach-Lampenwechsler kann der Lampenplatz 6 nur mit einer S-HKL bestückt werden, wenn er mit der nötigen Stromversorgung ausgerüstet ist. Im ZEE nit 700 Q können keine Superhohlkathodenlampen verwendet werden.



Pos	Typ	cod.	Elemente	Max. Strom [mA]	Max. Boost [mA]	Empf. Strom [mA]	Empf. Boost [mA]	Jus just
1	MHKL	-	Cr,Mn,Fe:Co:Ni:Cu	10.0		-		
2	MHKL	-	Cd:Pb	10.0		-		
3	HKL	-	Dy	10.0		-		*
4	MHKL	-	Na:K	10.0		-		
5	S-HKL	-	Au	10.0	15.0	-	-	
6	S-MHKL	-	Tl:Pb:Bi	10.0	15.0	-	-	
7	MHKL	-	Rh	10.0		-	-	
8	keine			0.0		-	-	

Tabellenbereich

Spalte	Beschreibung
Pos	Position der Hohlkathodenlampe im Lampenwechsler
Typ	Lampentyp
cod.	Nur Geräte mit Codiereinheit

Spalte	Beschreibung
	Ist auf der Lampenposition eine codierte Lampe bestückt, dann enthält der Eintrag einen Stern ("*"). Die Lampenparameter werden in diesem Fall automatisch ermittelt und lassen sich manuell nicht ändern.
Elemente	Elemente, die mit dieser Lampe analysierbar sind
Max. Strom	Maximal möglicher Lampenstrom
Max. Boost	Maximal möglicher Boost-Strom bei S-HKL
Empf.Strom	Empfohlener Lampenstrom bei codierten Lampen
Empf.Boost	Empfohlener Boost-Strom bei codierten S-HKL
Justierung / just.	Wenn mit "*" gekennzeichnet, wurde die Lampe justiert (siehe unten Abschnitt "Lampenjustierung").
Justierung / Wert	Justagewert der Lampe, wird für den Kundendienst benötigt

Schaltflächen

Schaltflächen	Beschreibung
Ändern	Parameter für die markierte Lampenposition ändern. Es erscheint das Fenster Lampe/Element auswählen . Hinweis für codierte Lampen: Die Lampenparameter codierter Lampen werden automatisch ermittelt und lassen sich nicht ändern.
Lampe anmelden	Nur Geräte mit Codiereinheit Die Lampe mit der ausgewählten Lampenposition identifizieren. Für codierte Lampen werden die Parameter ermittelt und eingetragen.
Lampe abmelden	Alle Lampenparameter der ausgewählten Zeile löschen.
Initialisieren	Den Lampenwechsler in den Grundzustand versetzen. Beim Initialisieren werden die Lampeninformationen dem Programm übergeben.
Tabelle löschen	Alle Positionen ohne Sicherheitsabfrage löschen.
Lampe wechseln	Die aktuell ausgewählte Lampe ausschalten und im Lampenwechsler in die Lampenwechselposition fahren. Die Lampe kann dann nach ausreichender Abkühlung gewechselt werden.

Lampenjustierung


Bei den Lampen kann die optische Achse von der mechanischen Achse abweichen. Im Ergebnis gelangt nicht das mögliche Energiemaximum zum Empfänger. Während der automatischen Justierung wird der Lampenwechsler gedreht, bis das Energiemaximum erreicht wird. Neu eingesetzte Lampen sollten deshalb immer justiert werden.

Die Justierung der HKL und SHKL erfolgt automatisch nach Betätigen der Schaltfläche **Justieren**. Der Justierwert wird dauerhaft gespeichert und die Lampe in der Spalte **Justierung/just.** mit "*" gekennzeichnet. Die Justierung muss erst bei Austausch der Lampe wiederholt werden.

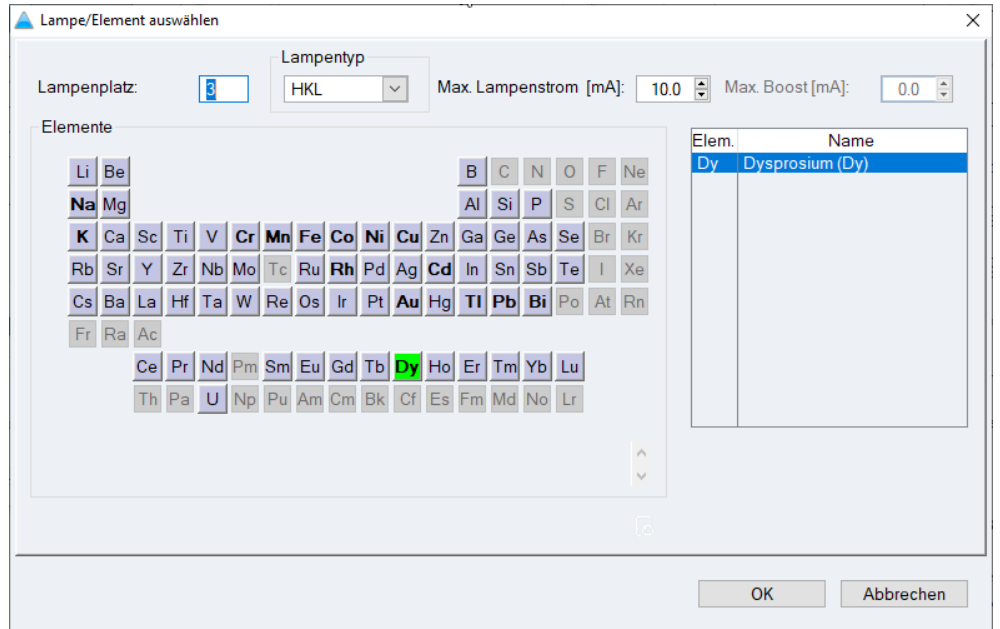
Nach dem Wechsel der Deuteriumhohlkatodenlampe muss diese ebenfalls nach Energiemaximum justiert werden. Die Justierung erfolgt im Fenster **Spektrometer**.

Nichtkodierte Lampen wählen

Beim ZEE nit 700 Q, novAA 400 und älteren Gerätetypen sind die Lampen nicht kodiert. Es erfolgt keine Rückmeldung vom Lampenwechsler zum PC. Zur Vermeidung von Messfehlern bestücken Sie unbedingt den Lampenwechsler entsprechend den eingegebenen Positionen. Im Fenster **Lampe/Element auswählen** spezifizieren Sie die nichtcodierten Lampen im Lampenwechsler.

- ▶ Rufen Sie mit dem Symbol  das Fenster **Spektrometer** auf und wechseln Sie auf die Karte **Kontrolle**.

- ▶ Öffnen Sie mit Klick auf **Lampenwechsler** das gleichnamige Fenster.
- ▶ Markieren Sie die Position des Lampenwechslers in der Tabelle, welche Sie mit einer Lampe bestücken oder deren Bestückung Sie ändern wollen.
- ▶ Öffnen Sie mit **Ändern** das Fenster **Lampe/Element auswählen**.



- ▶ Geben Sie folgende Werte ein:

Wert	Beschreibung
Lampenplatz	Anzeige der Position im Lampenwechsler
Typ der Hohlkathoden-Lampe	Lampentyp auswählen Diese Auswahl richtet sich nach der Lampenposition und der dort möglichen Lampentypen. S-HKL und S-MHKL sind beim 8fach-Lampenwechsler nur auf den Positionen 5 bis 8 und beim 6fach-Lampenwechsler nur auf der Position 6 verfügbar. keine Position enthält keine Lampe. HKL Ein-Element-Hohlkatodenlampe MHKL Mehr-Element-Hohlkatodenlampe S-HKL Superhohlkatodenlampe mit einem Element S-MHKL Superhohlkathodenlampe mit mehreren Elementen
Max. Lampenstrom	Maximalen Lampenstrom einstellen
Max. Boost	Nur bei S-HKL und S-MHKL Maximalen Boost-Strom einstellen
Elemente	Mit Mausclick auf das Elementsymbol im Periodensystem Lampelement auswählen: Blaue Schaltflächen kennzeichnen wählbare Elemente. Graue (inaktive) Schaltflächen markieren Elemente, die mit AAS-Technik nicht analysierbar sind. Grüne Element-Schaltflächen bezeichnen ausgewählten Elemente.

Wert	Beschreibung
	Bei M-HKL und S-MHKL können mehrere Elemente angeklickt werden. Ein erneuter Klick auf ein Elementsymbol annulliert die Auswahl. Ausgewählte Elemente werden in der nebenstehenden Tabelle angezeigt.

- ▶ Verlassen Sie mit **OK** das Fenster **Lampe/Element auswählen** und kehren Sie in das Fenster **Lampenwechsler** zurück.
 - ✓ Die Lampenspezifikation wird in die Tabelle des Fensters **Lampenwechsler** eingetragen.

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Lampenenergie kontrollieren (novAA 400 P/ZEEnit) [▶ 112]
- 📖 Lampenenergie kontrollieren (novAA 800) [▶ 114]

1.2 ASpect LS beenden und Analysengerät ausschalten

Schalten Sie das Analysengerät immer softwaregestützt durch Beenden von ASpect LS ab.

- ▶ Menüpunkt **Datei | Beenden** wählen.
- ▶ Wenn zu diesem Zeitpunkt Methoden-, Sequenz- oder Probeninformationsdaten noch nicht gespeichert sind, erscheint ein Hinweis zum Speichern der Daten.
- ▶ In Abhängigkeit des installierten Zubehörs und der verwendeten Atomisierungstechnik erfolgen weitere Benachrichtigungen über softwaregestützte Handlungen:
 - Flamme: Brennende Flamme löschen
 - Hydridsystem: Hydridsystem spülen
 - ✓ Nach Abarbeitung der Handlungen wird ASpect LS beendet. Schalten Sie das Analysengerät am Netzschalter aus.

1.3 Allgemeine Bedienhinweise

1.3.1 Die Arbeitsoberfläche

Das Hauptfenster von ASpect LS öffnet sich nach Verlassen des Quickstarts mit den Einstellungen der dort gewählten Atomisierungstechnik.

ASpect LS 1.6.0.1024 ZEEnit 700P Tech: Flamme

Datei Bearbeiten Aktionen Ansicht Methodenentwicklung Routine Extras ?

Meth: AspectLS_SW-Test1 Sequ: Unbenannt Proben: Unbenannt




Sequenz/Ergebnisse Sequenz Ergebnisse Übersicht

Nr.	Typ / Name	Pos.	Nr.	Name	Linie	Ext	SD(Ext)	RSD%	Datum	Zeit	Einzelwerte(Ext)
1	Flamme ein		1	AspectLS_SW-Tes					26.06.2015	9:21	
2	Nullabgleich	43	2	Nullabgleich	Cu 324	0.00000			26.06.2015	9:22	
3	Kal.-Null1	43	3	Kal.-Null1	Cu 324	-0.00036	0.00054	149.1	26.06.2015	9:23	0.00008 -0.00096 -0.00020
4	Kal.-Std.1	45	4	Kal.-Std.1	Cu 324	0.02354	0.00035	1.5	26.06.2015	9:24	0.02359 0.02386 0.02317
5	Kal.-Std.2	46	5	Kal.-Std.2	Cu 324	0.06145	0.00038	0.6	26.06.2015	9:25	0.06127 0.06119 0.06189
6	Kal.-Std.3	47	6	Kal.-Std.3	Cu 324	0.11973	0.00067	0.6	26.06.2015	9:26	0.11931 0.12050 0.11938
7	Kal.-Std.4	48	7	Kal.-Std.4	Cu 324	0.23508	0.00291	1.2	26.06.2015	9:27	0.23249 0.23452 0.23823
8	Kalib. berechnen		8	Kalib. berechnen	Cu 324				26.06.2015	9:27	
9	Probe 001	1	9	Nullabgleich	Cu 324	0.00000			26.06.2015	9:28	
10	Probe 002	2	10	Kal.-Null1	Cu 324	-0.00067	0.00071	105.4	26.06.2015	9:29	-0.00110 -0.00107 0.00015
11	Probe 003	3	11	Kal.-Std.1	Cu 324	0.02344	0.00018	0.8	26.06.2015	9:30	0.02329 0.02364 0.02339
12	Probe 004	4	12	Kal.-Std.2	Cu 324	0.06462	0.00078	1.2	26.06.2015	9:31	0.06375 0.06482 0.06528
13	Probe 005	5	13	Kal.-Std.3	Cu 324	0.12505	0.00152	1.2	26.06.2015	9:32	0.12358 0.12495 0.12661
14	Probe 006	6	14	Kal.-Std.4	Cu 324	0.23834	0.00120	0.5	26.06.2015	9:33	0.23768 0.23973 0.23762
15	Probe 007	7	15	Kalib. berechnen	Cu 324				26.06.2015	9:33	
16	Probe 008	8	16	Kalib. anzeigen					26.06.2015	9:33	
17	Probe 009	9	17	0.1ppm Cu	Cu 324	0.01545	0.00081	5.2	26.06.2015	9:34	0.01459 0.01558 0.01619
18	Probe 010	10	18	0.1ppm Cu	Cu 324	0.01532	0.00150	9.8	26.06.2015	9:35	0.01698 0.01491 0.01406
			19	QC-Std.1	Cu 324	0.02453	0.00029	1.2	26.06.2015	9:36	0.02454 0.02424 0.02482
			20	QC-Std.4	Cu 324	0.23760	0.00264	1.1	26.06.2015	9:37	0.23581 0.23636 0.24063
			21	10ppm Cu	Cu 324	0.99817			26.06.2015	9:38	0.99817
			22	10ppm Cu	Cu 324	0.17167	0.00902	5.3	26.06.2015	9:41	0.16530 0.17805 0.02610
			23	10ppm Cu	Cu 324	1.0033			26.06.2015	9:48	1.0033
			24	10ppm Cu	Cu 324	0.16321	0.00132	0.8	26.06.2015	9:50	0.16470 0.16277 0.16218
			25	QC1_2ppm Cu	Cu 324	0.23664	0.00163	0.7	26.06.2015	9:52	0.23604 0.23541 0.23849
			26	QC2_2ppm Cu	Cu 324	0.23480	0.00132	0.6	26.06.2015	9:53	0.23464 0.23619 0.23356
			27	Flamme aus					26.06.2015	9:54	
			28	Lampe aus					26.06.2015	9:54	

Ext/Ems/Zeit Konz.1 Konz.2 QC-Erg. Fehler Einzelw. Proben-ID Energie Einst. Benutzerdefiniert

ZEEnit 700P 140n-P1281 SuStein Simulation Flamme_linear3

Elemente auf der Arbeitsoberfläche

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

Sehen Sie dazu auch

 Anzeige der Ergebnisse und des Analysenfortschritts im Hauptfenster [▶ 87]

1.3.2 Hilfe verwenden

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

Das Programm blendet Kurzinformationen (Tooltips) zu Schaltflächen der Werkzeug- und der Symbolleiste, wenn Sie den Mauszeiger darüber bewegen.

1.3.3 Übersicht über Menüleiste, Werkzeugleiste und Symbolleiste

Funktionen in der Menüleiste










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

Menüpunkt	Beschreibung
Datei	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Methoden, Sequenzen und Probeninformationsdaten neu erstellen, öffnen und speichern ▪ Ergebnisdaten öffnen ▪ Methoden und Sequenzen löschen ▪ Aktives Fenster oder Protokoll drucken ▪ Protokollentwurfsmodus aufrufen ▪ Offline- bzw. Online-Programminstanz starten ▪ Quickstart öffnen ▪ Anwendung beenden ▪ Zuletzt geöffnete Methoden und Sequenzen direkt aufrufen
Bearbeiten	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Inhalt von Text- und Eingabefeldern kopieren und einfügen ▪ Ausgewählte Zeilen der Ergebnisliste in die Zwischenablage kopieren ▪ Inhalt der Ergebnisliste löschen
Aktionen	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Ofen öffnen/schließen, ausheizen und formieren ▪ Flamme löschen ▪ Scraper auslösen ▪ System spülen (Hydridsystem, Probengeber oder Brennersystem)
Ansicht	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Fenster, die Darstellungen und Informationen während des Analysenablaufs enthalten, z. B. Signalverlauf, öffnen und schließen ▪ Skalierung der Signalachse der Darstellungen auswählen ▪ Probeneinzelwerte anzeigen
Methodenentwicklung	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Fenster, die während der Methodenentwicklung benötigt werden, öffnen ▪ Worksheets auswählen, bearbeiten oder neu erstellen ▪ Kochbuch öffnen
Routine	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Messroutine starten, pausieren und abrechnen ▪ Einzelne Sequenzzeilen starten ▪ Ergebnisse Neuberechnen
Extras	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Fenster Daten und Optionen öffnen ▪ Proben suchen ▪ Scientific Mode für die Methodenerarbeitung aktivieren ▪ Monitor-Modus aktivieren, um Diagnosedaten zu dokumentieren (nur für Diagnosemaßnahmen nach Aufforderung durch autorisiertes Servicepersonal notwendig)
System	<p>Verfügbar, wenn das optionale Modul "21 CFR Part 11 Compliance ASpect LS" installiert ist</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Benutzerverwaltung konfigurieren

Menüpunkt	Beschreibung
	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Kennwort ändern ▪ Audit Trail ansehen ▪ Ergebnisse signieren
?	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Hilfe und Versionsinformation anzeigen







Werkzeuggeste






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

Tool	Beschreibung
	Sequenzmessung starten
	Markierte Zeilen in der Sequenz messen
	Laufende sofort Messroutine abbrechen
	Stopp der Messroutine nach Abarbeitung der laufenden Messung Nötige Reinigungsschritte der Atomisierungseinheit werden noch ausgeführt.
	Ergebnisse neu berechnen
	Dateien öffnen Es können gespeicherte Methoden, Sequenzen oder Proben-ID in das Programm geladen und für die aktuelle Analyse verwendet werden.
	Kochbuch öffnen
	Neues Worksheet erstellen
	Nur in zweiter Programminstanz: Ergebnisliste aktualisieren

Symbolleiste

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

Schaltfläche	Beschreibung
	Spektrometerfunktionen überprüfen
	Flammenfenster öffnen
	Ofenfenster öffnen
Hy	Fenster Hybridsystem öffnen
	Methodenfenster öffnen
	Probengeber spezifizieren
	Fenster mit Probeninformationsdaten öffnen



Schaltfläche	Beschreibung
	Sequenzfenster öffnen
	Fenster mit Kalibrierung öffnen
	Fenster mit Daten der Qualitätskontrolle öffnen
	Datenverwaltung öffnen
	Worksheets verwalten, gespeicherte Worksheets öffnen

1.3.4 Häufig verwendete Bedienelemente

Verschiedene Schaltflächen, Maus- und Tastaturfunktionen werden innerhalb der Software mit gleicher bzw. sehr ähnlicher Bedeutung verwendet. Diese Bedienelemente werden hier allgemein beschrieben, soweit erforderlich, finden Sie spezifische Informationen bei der Beschreibung der jeweiligen Fenster.

Allgemeine Schaltflächen

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

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

Tabellen

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

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

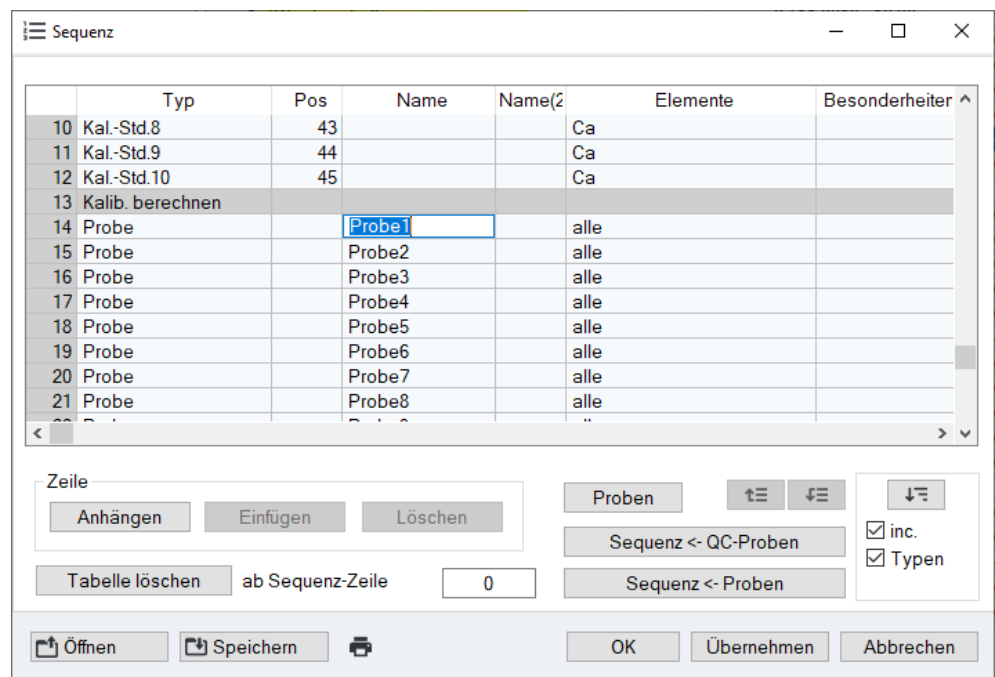
In Eingabefeldern stehen zusätzlich folgende Funktionen zur Verfügung:

- ▶ Die Funktionstaste **F2** schaltet den Editiermodus ein. In diesem Modus werden die Pfeiltasten zum zeichenweisen Editieren verwendet. Erneutes Drücken von **F2** aktiviert den Standardmodus, bei dem die Pfeiltasten zur Navigation zwischen den Zellen verwendet werden.

- ▶ Texte können über die Menüpunkte **Bearbeiten | Kopieren Strg+C** und **Bearbeiten | Einfügen Strg+V** oder über die Tastenkombination **Strg+C** und **Strg+V** in die Windows-Zwischenablage kopiert und wieder eingefügt werden.

Schaltflächen in den Tabellen

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



The screenshot shows a window titled 'Sequenz' with a table containing the following data:




	Typ	Pos	Name	Name(2)	Elemente	Besonderheit
10	Kal.-Std.8	43			Ca	
11	Kal.-Std.9	44			Ca	
12	Kal.-Std.10	45			Ca	
13	Kalib. berechnen					
14	Probe		Probe1		alle	
15	Probe		Probe2		alle	
16	Probe		Probe3		alle	
17	Probe		Probe4		alle	
18	Probe		Probe5		alle	
19	Probe		Probe6		alle	
20	Probe		Probe7		alle	
21	Probe		Probe8		alle	


Below the table, there are several control elements:

- Buttons: Anhängen, Einfügen, Löschen, Proben, Sequenz <- QC-Proben, Sequenz <- Proben, Tabelle löschen, ab Sequenz-Zeile, 0, Öffnen, Speichern, OK, Übernehmen, Abbrechen.
- Checkboxes: inc., Typen.
- Navigation icons: Up arrow, Down arrow, Down arrow with equals.

Grafiken

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

Symbol	Beschreibung
	Aktiviert den Zoommodus Ziehen Sie nach Aktivierung der Schaltfläche mit gedrückter linker Maustaste um den zu vergrößernden Grafikbereich einen Rahmen ziehen und die Maustaste los.
	Deaktiviert den Zoommodus und stellt die Darstellung auf die ursprüngliche Skalierung wieder her
	Aktiviert den Textmodus

Symbol	Beschreibung
	Ziehen Sie nach Aktivierung der Schaltfläche mit gedrückter linker Maustaste in der Grafik einen Rahmen auf und geben Sie den Text ein. Ein Doppelklick auf einen bestehenden Text öffnet das Fenster, um den Text zu ändern oder zu löschen. Mit der Kombination Strg + rechte Maustaste kann ein bestehender Text verschoben werden.
	Aktiviert den Markierungsmodus in Darstellungen des Signalverlaufs oder Spektren Mit der linken Maustaste werden Beschriftungen zu den Messpunkten hinzugefügt.

Funktionstasten

Taste	Funktion
F1	Kontextsensitive Hilfe aufrufen
F2	Tabellenzellen editieren
F6	Ausgewählte Zeile der Sequenz messen
F7	Zusätzliche Anzeigefenster während einer Messroutine (z. B. Signalverlauf) öffnen
F8	Anzeigefenster schließen
F10	Für die Bedienung per Tastatur zwischen Menüzeile des Arbeitsbereichs und Ergebnisfenster umschalten
F11	Gestoppten Messroutine fortsetzen
F12	Messroutine starten und stoppen


Drucker verwenden

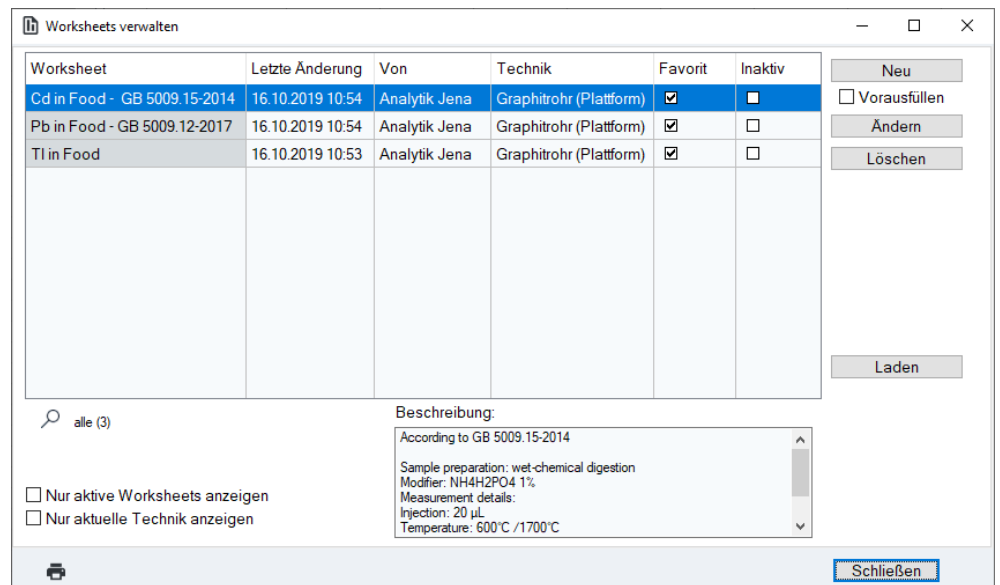
In der Software wird der unter Windows eingerichtete Standarddrucker verwendet.

2 Worksheets verwalten

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

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

Das Fenster **Worksheets verwalten** öffnen Sie mit einem Klick auf  in der Symbolleiste oder dem Menübefehl **Methodenentwicklung | Worksheets verwalten**.



Elemente im Fenster Worksheets verwalten

Schaltflächen/Optionen	Beschreibung
Neu	Neues Worksheet erstellen
Vorausfüllen	Die geladene Sequenz und Methode werden voreingetragen
Ändern	Markiertes Worksheet editieren
Löschen	Markiertes Worksheet löschen
Laden	Markiertes Worksheet für eine Messung laden Hinweis: Es können nur Worksheets geladen werden, die zur aktuell eingestellten Atomisierungstechnik passen.
Nur aktive Worksheets anzeigen	In der Tabelle alle Worksheets ausblenden, die mit Inaktiv gekennzeichnet sind
Nur aktuelle Technik anzeigen	In der Tabelle alle Worksheets anzeigen, die die aktuell eingestellte Atomisierungstechnik verwenden
Beschreibung	Beschreibung des markierten Worksheets Diese Informationen werden beim Erstellen des Worksheets hinterlegt.

In der Tabelle werden folgende Informationen zu den Worksheets ausgegeben:

Tabellenspalte	Beschreibung
Worksheet	Name des Worksheets
Letzte Änderung	Letzte Änderung des Worksheets

Tabellenspalte	Beschreibung
Von	Dieser Anwender hat die letzte Änderung vorgenommen. Der Name des Anwenders wird aus dem Quickstart übernommen.
Technik	Verwendete Atomisierungstechnik
Favorit	Wenn aktiviert, wird das Worksheet auf dem Tab Favoriten im Fenster Quickstart angezeigt
Inaktiv	Wenn aktiviert, wird dieses Worksheet nicht im Quickstart angezeigt Ein als inaktiv markiertes Worksheet kann jedoch aus dem Fenster Worksheets verwalten geladen werden.

Sehen Sie dazu auch

 Mit Worksheet starten [▶ 9]



2.1 Worksheet neu erstellen


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

Neues Worksheet - Technik: Graphitrohr (Plattform)

Name: Favorit


Methode: Inaktiv

16.10.2019 10:34  

Sequenz: 

19.10.2019 16:56

Proben-ID: ▼

Maske: 

Platzhalter * und ? verwenden, um die neueste passende Datei zu laden

Ergebnisdatei: ▼

Ordner: ▼

Name: ▼


C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectLS\EA\RESULTS\Pb in apples.tps


Elemente: |

Letzte Änderung: 27.02.2020 14:24



Beschreibung:

Elemente im Fenster Neues Worksheet

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

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

Worksheet spezifizieren

- ▶ Um ein neues Worksheet zu erstellen, öffnen Sie mit einem Klick auf  in der Symbolleiste das Fenster **Worksheets verwalten** und klicken Sie auf **Neu**. Alternativ können Sie in der Werkzeugleiste auf  klicken.
 - ✓ Das Fenster **Neues Worksheet** erscheint.
- ▶ Wählen Sie eine Methode und eine Sequenz.
Hinweis: In einer Sequenz können weitere Methoden als Aktionen nachgeladen werden.
- ▶ Optional können Sie das Speichern der Ergebnisdatei und der Verwendung einer Proben-ID-Datei treffen und die Beschreibung editieren.


- ▶ Verlassen Sie das Fenster mit **OK**.
 - ✓ Das neue Worksheet erscheint im Fenster **Worksheets verwalten** und kann geladen werden.

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Messroutine starten [▶ 81]


2.2 Worksheet editieren

Sie können alle Einstellungen in einem vorhandenen Worksheet editieren.

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


2.3 Worksheet löschen

Sie können ein Worksheet löschen.

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

2.4 Worksheet laden

Ein Worksheet können Sie beim Starten von ASpect LS im **Quickstart** oder im Fenster **Worksheets verwalten** laden.

- ▶ Öffnen Sie mit Klick auf  in der Symbolleiste das Fenster **Worksheets verwalten**.
- ▶ Aktivieren Sie die Option **Nur aktuelle Technik anzeigen**.
- ▶ Markieren Sie das Worksheet in der Tabelle und klicken Sie auf **Laden**.
 - ✓ Das Worksheet wird geladen und Sequenz im Hauptfenster angezeigt.

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




HINWEIS

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

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

Sehen Sie dazu auch


 [Mit Worksheet starten \[▶ 9\]](#)

3 Methoden

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

- Auswahl der Analysenlinien
- Parameter für die Linienauswertung
- Einstellung des Spektrometers
- Einstellungen des Atomisators
- Art der Probenzufuhr
- Kalibrierparameter
- Statistische Auswertungen
- Einstellungen zur Qualitätskontrolle und Qualitätssicherung
- Einstellungen zur Messwertausgabe

Auf Grundlage einer Methode können Messesequenzen erstellt werden. In den Sequenzen sind die Abfolgen von Probenmessungen und anderen Aktionen innerhalb einer Analyse festgelegt. Gespeicherte Methoden können somit für Analysen mit unterschiedlichen Sequenzen genutzt werden.


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

3.1 Methoden erstellen, speichern und laden

Methoden werden in einer Datenbank gespeichert. Wenn die Methodenparameter einer vorhandenen Methode variiert und diese Änderungen mit gleichen Namen gespeichert werden, wird von der Methode eine neue Version angelegt. Die vorhandene Methode kann also nicht überschrieben und auf diese Weise unabsichtlich gelöscht werden. Sie können Methoden neu erstellen, ändern, speichern und laden. Weiter Funktionen zur Verwaltung von Methoden finden Sie im Fenster **Daten | Datenverwaltung**.

3.1.1 Neue Methode erstellen

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

- ▶ Wählen Sie den Menübefehl **Datei | Neue Methode**.
Alternativ klicken Sie auf , wenn keine Methode aktiviert ist.
- ▶ Eine der drei Optionen im Fenster **Neue Methode** wählen:
 - **Basierend auf Standardwerten:** Das Fenster **Methode** nur mit Voreinstellungen für Kalibrierung und Statistik öffnen.
 - **Basierend auf aktuellen Parametern:** Das Fenster **Methode** mit den aktuellen Methodenparametern öffnen.
 - **Basierend auf gespeicherter Methode:** Im Datenbankfenster der Methoden **Methode öffnen** eine Methode wählen.
- ▶ Bestätigen Sie die Auswahl mit **OK** bestätigen.
 - ✓ Das Fenster **Methode** mit den gewählten Voreinstellungen erscheint.
- ▶ Spezifizieren Sie die Methode auf den verschiedenen Registerkarten und nehmen Sie die nötigen Optimierungen vor.
- ▶ Aktivieren Sie die Methodenparameter mit den Schaltflächen **OK** oder **Übernehmen**.

- ✓ Sie können jetzt die Methode speichern oder für die nächste Analyse verwenden. Für die Analyse erstellen Sie auf Grundlage der Methode eine Sequenz und füllen Sie optional eine Proben-ID-Tabelle aus. Starten Sie anschließend die Messung.

3.1.2 Methoden speichern

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

Elemente im Fenster Methode speichern

The screenshot shows the 'Methode speichern' dialog box. At the top, there is a 'Name:' field containing 'Cd in Food' and a 'Kat:' field containing 'KK'. Below this is a table with the following data:

Name	Vers.	Datum	Zeit	Kat	Anwender
Cd in Food	1	16.10.2019	10:33	KK	Analytik Jena
Cr for ZEEman test	1	12.03.2020	13:44		SuStein
Mq in Food	1	27.02.2020	11:40		User
Pb in Food	1	16.10.2019	10:34	KK	Analytik Jena
Tl in Food	1	16.10.2019	10:26		Analytik Jena

Below the table, there are sorting options: 'Sortieren nach' with a dropdown set to 'Name/Vers.', and radio buttons for 'Aufsteigend' (selected) and 'Absteigend'. There are also checkboxes for 'Nur aktuelle Versionen anzeigen' and 'Kalibrierkurve(n) mitspeichern'. A 'Beschreibung:' field contains the text 'According to GB 5009.15-2014'. At the bottom, there are 'OK' and 'Abbrechen' buttons.

Option	Beschreibung
Name	Methodenname
Kat.	Kategorie (drei Zeichen) für eine weitere Kennzeichnung und Sortierung der Methoden Diese Eingabe ist optional. Wenn das FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul installiert ist, können Sie mit ausgewählten Kategorien eine Methode als freigegeben kennzeichnen. Die Kategorien definieren Sie in den Einstellungen der Benutzerverwaltung.
Tabelle	Übersicht vorhandener Methoden
Sortieren nach	Mit den Optionen in dieser Gruppe können Sie die Methodenliste sortieren. Wenn die Option Nur aktuelle Versionen anzeigen aktiviert ist, wird bei gleichnamigen Methoden jeweils nur neueste Version angezeigt.
Kalibrierkurve(n) mitspeichern	Vorhandene Kalibrierkurven mit der Methode speichern Die Kalibrierkurven können für weitere Analysen verwendet werden.
Beschreibung	Optional nähere Erläuterungen zur Methode eingeben Mit Klick auf ... wird eine Liste mit vordefinierten Bemerkungen geöffnet. Diese Bemerkungen verwalten Sie im Fenster Daten Vordefinierte Bemerkungen .

Methode speichern

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Methode** auf **Speichern** oder wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Speichern | Methode** wählen.
- ✓ Das Fenster **Methode speichern** erscheint.

- ▶ Geben Sie den Namen der Methode ein und wählen Sie weitere Parameter.
 - ✓ Die Methode wird in der Datenbank gespeichert. Bei Verwendung eines vorhandenen Methodennamens wird eine neue Version der Methode in der Datenbank angelegt.

Hinweis: Die Methode wird auch in der Ergebnisdatei der Messung gespeichert. Nach Aufrufen der Ergebnisdatei kann auch die Methode wiederhergestellt werden. Weitere Verwaltungsfunktionen für Methoden stehen im Fenster **Daten | Datenverwaltung** zur Verfügung.



Sehen Sie dazu auch

- 📖 Vordefinierte Bemerkungen erstellen [▶ 171]
- 📖 Allgemeine Einstellungen der Benutzerverwaltung konfigurieren [▶ 185]

3.1.3 Methoden laden


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

Aus Datenbank laden

- ▶ Das Datenbankfenster mit einer der folgenden Alternativen öffnen:
 - In der Werkzeugleiste auf das Ordner-Symbol  neben dem Feld **Methode** klicken.
 - Menüpunkt **Datei | Methode öffnen** wählen.
 - Das Fenster **Methode** mit Klick auf  öffnen und dort auf **Öffnen** klicken.
- ▶ Optional im Feld **Kat.** die angezeigten Methoden mit Auswahl einer Kategorie einschränken. Zur Anzeige aller Methoden den Eintrag im Feld **Kat.** löschen.
- ▶ Optional die Option **Nur aktuelle Versionen anzeigen** aktivieren, wenn bei Methoden mit mehreren Versionen nur die neueste angezeigt werden soll.
- ▶ In der Liste die Methode markieren und auf **OK** klicken.
 - ✓ Das Fenster **Methode** mit gespeicherten Parametern erscheint.

Aus Ergebnisdatei laden

Aus einer im Hauptfenster angezeigten Ergebnisdatei kann die Methode extrahiert werden. Das geschieht automatisch, wenn die Probeneinzelwerte angezeigt werden.

- ▶ Auf eine beliebige Probe in der Ergebnisliste einen Doppelklick ausführen oder nach Rechtsklick auf eine Probe im Kontextmenü den Punkt **Probeneinzelwerte** wählen.
- ▶ Abfrage, ob die Methodenparameter geladen werden sollen, mit Klick auf **Ja** quittieren.
 - ✓ Die Methode kann jetzt mit Klick auf  geöffnet werden.



3.2 Methodenparameter spezifizieren

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

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

Schaltflächen im Fenster Methode

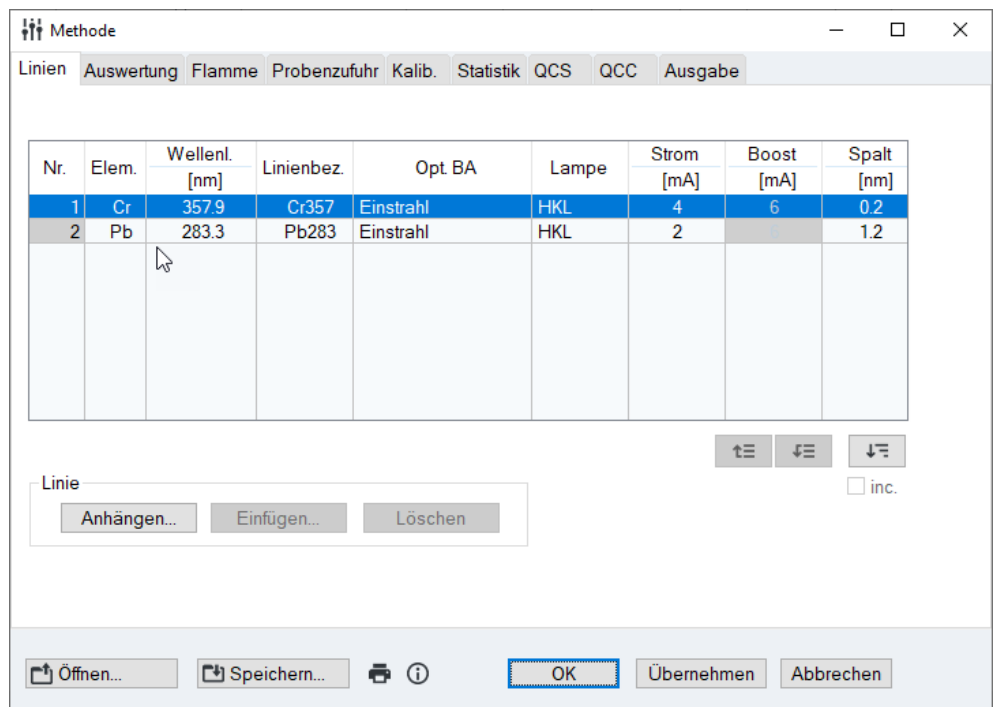
Im unteren Bereich des Fensters befinden sich Schaltflächen, die ständig zur Verfügung stehen.

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

3.2.1 Analyselinien spezifizieren (Fenster Methode | Linien)

Die Elementlinien spezifizieren Sie im Fenster **Methode | Linien**. Maximal 200 Linien können gewählt werden. Bei dieser Auswahl werden die Daten aus dem Kochbuch mit den Voreinstellungen zur Atomisierung der Elemente geladen.

Elemente im Fenster Methode | Linien



Parameter der Linientabelle

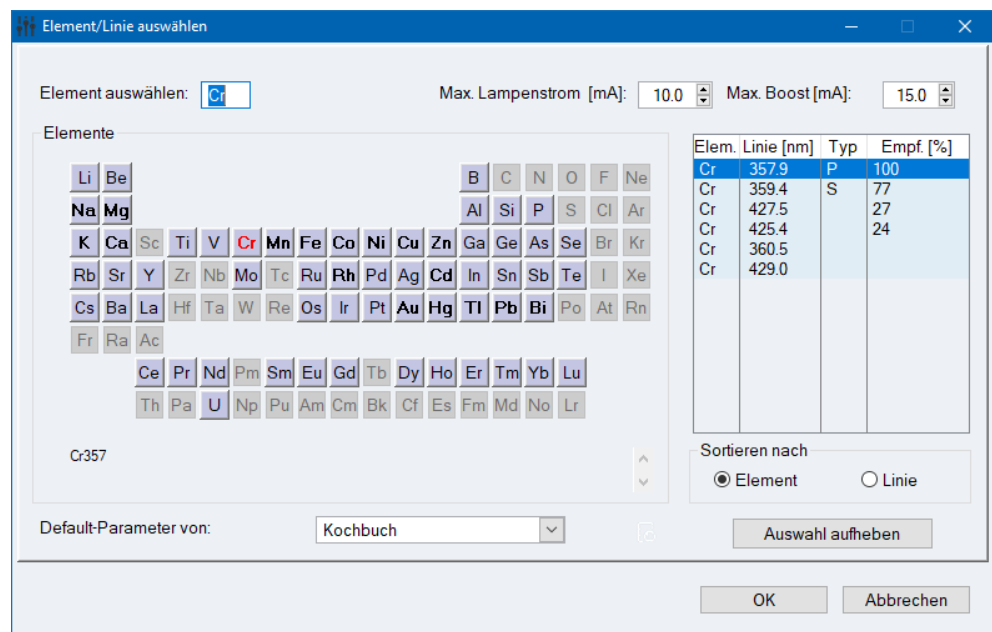
Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer der Elementlinie
Elem.	Elementsymbol des zu analysierenden Elements
Wellenl.	Wellenlänge der Analyselinie in nm Nach einem Klick auf diese Tabellenzelle kann eine andere Linie des gleichen Elementes ausgewählt werden.
Linienbez.	Linienbezeichnung Die Bezeichnung kann frei vergeben werden und dient der eindeutigen Zuordnung der Analyselinie.
Opt. BA	Optische Betriebsart für Flammen- und Hydridtechnik: Einstrahl Das Licht wird durch den Probenraum geleitet, die Lampendrift wird durch einen automatischen Nullabgleich unmittelbar vor der Messung korrigiert.

Spalte	Beschreibung
	<p>Zweistrahl Bei der Messung des Referenzsignals wird das Licht am Probenraum vorbeigeführt und zur Korrektur der Lampendrift benutzt.</p> <p>Emission Messung des Emissionssignals des Element in der Flamme</p>
Lampe	<p>Verwendeter Lampentyp:</p> <p>HKL Ein-Element-Hohlkatodenlampe</p> <p>S-HKL Super-Hohlkatodenlampe mit einem Element</p> <p>MHKL Mehr-Element-Hohlkatodenlampe</p> <p>S-MHKL Super-Hohlkatodenlampe mit mehreren Elementen</p>
Strom	Eingestellter Lampenstrom (nicht für die Betriebsart Emission)
Boost	Eingestellter Boost-Strom (nur bei S-HKL)
Spalt	Eingestellte Spaltbreite

Mit den Schaltfläche **Anhängen** und **Einfügen** fügen Sie eine neue Analysenlinie der Liste am Ende bzw. am markierten Listenplatz hinzu. Mit **Löschen** entfernen Sie eine markierte Linie aus der Liste.

Elementlinien in die Liste einfügen

- Öffnen Sie im Fenster **Methode | Linien** mit Klick **Anhängen** das Fenster **Element/Linie auswählen**.



Das Fenster enthält ein Periodensystem und eine Linientabelle. Im Periodensystem sind die wählbaren Elemente als blaue Schaltflächen abgebildet. Elemente, für die eine Lampe im Lampenwechsler vorhanden ist, sind fett markiert. Die Linientabelle enthält folgende Spalten:

Spalte	Beschreibung
Elem.	Elementsymbol
Linie	Wellenlänge in nm
Typ	P = Primärlinie, S = Sekundärlinie, * = eigene Linie

Spalte	Beschreibung
Empf.	Analysenempfindlichkeit der Linie Die Empfindlichkeit der Primärlinie entspricht 100 %.

- ▶ Mit Auswahl der Option **Element** bzw. **Linie** sortieren Sie die Linientabelle aufsteigend nach chemischen Symbol bzw. Wellenlänge.
- ▶ Wenn Sie im Periodensystem auf ein Element klicken (dunklere Schaltflächen sind wählbare Elemente), werden nur die Linien des gewählten Elements in der Linientabelle angezeigt.
Alternativ geben Sie im Feld **Element auswählen** das Elementsymbol ein.
Löschen Sie die Eingabe im Feld **Element auswählen**, um die vollständige Elementliste in der Linientabelle anzuzeigen.
- ▶ Zur Auswahl klicken Sie nacheinander auf die Zeilen der gewünschten Linien in der Linientabelle.
Die gewählten Linien werden unter dem Periodensystem angezeigt.
- ▶ Die Auswahl einer Linie machen Sie durch erneutes Anklicken in der Linientabelle rückgängig.
Mit **Auswahl aufheben** löschen Sie die gesamte Auswahl.
- ▶ Sie können zwischen zwei Parametervoreinstellungen für die weitere Methodenerarbeitung wählen. Aktivieren Sie dafür im Listenfeld **Default-Parameter von** die Option **Kochbuch** oder **Methoden-DB**.
- ▶ Bestätigen Sie mit **OK** die Auswahl.
 - ✓ Die gewählten Elemente/Linien werden in das Fenster **Methode | Linien** übernommen.

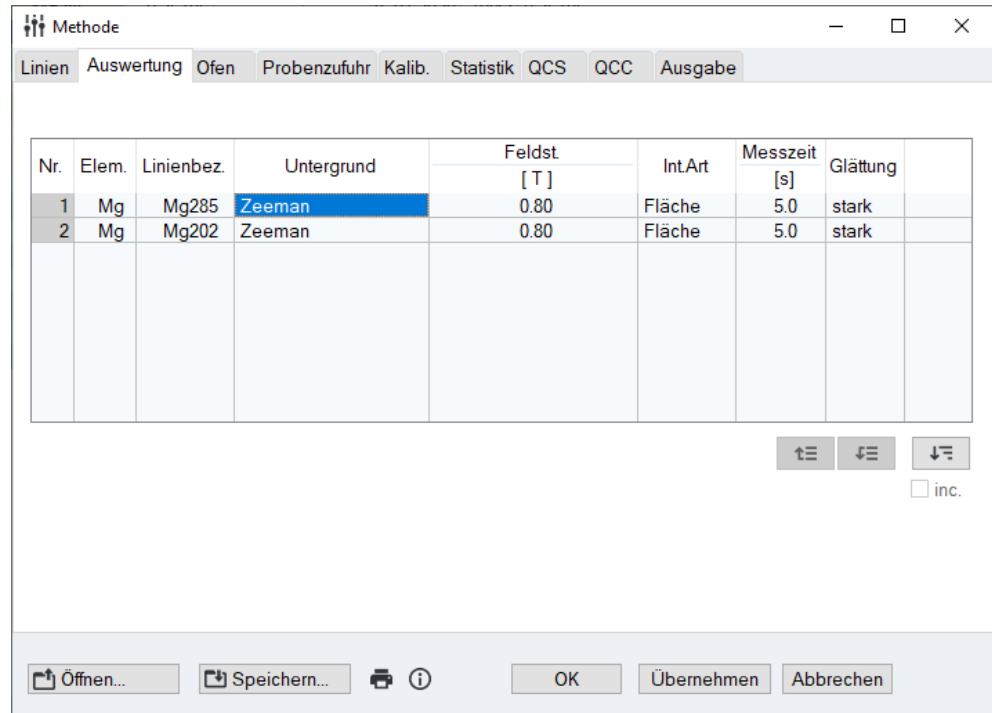
Hinweis: Sie können für ein Element mehrere Linien mit unterschiedlicher Empfindlichkeit auswählen.

Sehen Sie dazu auch

 Kochbuch [▶ 174]

3.2.2 Auswerteparameter der Signale spezifizieren (Fenster Methode | Auswertung)

Im Fenster **Methode | Auswertung** spezifizieren Sie die Art und Weise der Signalauswertung.



Folgende Linien-Parameter können festgelegt werden:

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer der Elementlinie
Elem.	Elementsymbol
Linienbez.	Linienbezeichnung
Int.Art	<p>Mittelwert Mittelung der Extinktion (Emission) über die Extinktionszeit</p> <p>Fläche Berechnung der Peakfläche der Extinktion (Emission) über die Integrationszeit</p> <p>Höhe Berechnung der Peakhöhe (größter Wert nach erfolgter Glättung) der Extinktion (Emission) während der Integrationszeit</p> <p>Wählen Sie den Mittelwert bei ausreichender Probenmenge (Flammtechnik, selten Hydridtechnik). Die Optionen Fläche und Höhe kommen bei Atomisierung einer definierten Probenmenge zum Einsatz (Graphitrohrtechnik, Hydridtechnik oder in der Flammtechnik in Verbindung mit einem Injektionsmodul).</p>
Untergrund	<p>kein Untergrund Keine Untergrundkorrektur, Deuterium-HKL ausschalten</p> <p>D2HKL-Untergrund Messung der Untergrundstrahlung zur Eliminierung der unspezifischen Absorption, Deuterium-HKL einschalten</p> <p>nur D2HKL-Untergrund Nur Untergrundmessung, aber keine Probenmessung, Deuterium-HKL einschalten</p> <p>Die speziellen Untergrundkorrekturen für das Zeeman-AAS sind im Abschnitt unten beschrieben</p>
Ems-WD	Nur bei Flammen-Emissionsmessungen mit der Integrationsart Mittelwert Wellenlängen-Differenz (in nm) zur Analyselinie, bei der der Emissionsuntergrund gemessen wird

Spalte	Beschreibung
	Um Proben mit hohem Emissionsuntergrund (z. B. Salze) messen zu können, besteht die Möglichkeit, den Untergrund neben der Analyselinie zu erfassen und von den gemessenen Emissionen zu subtrahieren.
Glättung	Glättung des Messwertpeaks
AZDK	Auto-Zero-Driftkontrolle Wenn eingeschaltet, erfolgt während der Autozerophase (AZ) des Ofenprogramms eine Überprüfung der Energieschwankung der Lampe



Untergrundkorrekturen speziell für Zeeman-AAS (Graphitrohr- und HydrEA-Technik)

Hinweis: Beim ZEEnit 700 Q steht nur der Zeeman-2-Feld-Modus zur Verfügung. Er wird durch Auswahl der Option **Zeeman** aktiviert.

Option	Beschreibung
kein Untergrund	Keine Untergrundkorrektur, Deuterium-HKL bzw. Zeeman-Magnet aus
Zeeman 2-Feld-Mode oder Zeeman	Untergrund-Korrektur mittels Zeeman-2-Feld-Mode, Zeeman-Magnet ein In der Spalte Max.FS müssen Sie die maximale Feldstärke in Tesla einstellen.
Zeeman 3-Feld-Mode	Untergrundkorrektur mittels Zeeman-3-Feld-Mode, Zeeman-Magnet ein Sie müssen in der Spalte Max.FS die maximale Feldstärke und in Mitt.FS die mittlere Feldstärke in Tesla einstellen.
Zeeman Dyn.-Mode	Untergrund mittels Zeeman-Dynamik-Mode, Zeeman-Magnet ein Sie müssen in der Spalte Max.FS die maximale Feldstärke und in Mitt.FS die mittlere Feldstärke in Tesla einstellen. In der Spalte Grenz. geben Sie die Nummer des Standards mit der Grenzkonzentration ein.
nur Zeeman-Untergr.	Nur Untergrund messen, keine Probenmessung, Zeeman-Magnet ein
D2HKL-Untergrund	Messung der Untergrundstrahlung zur Eliminierung der unspezifischen Absorption mittels Deuterium-HKL Deuterium-HKL ein, Zeeman-Magnet aus

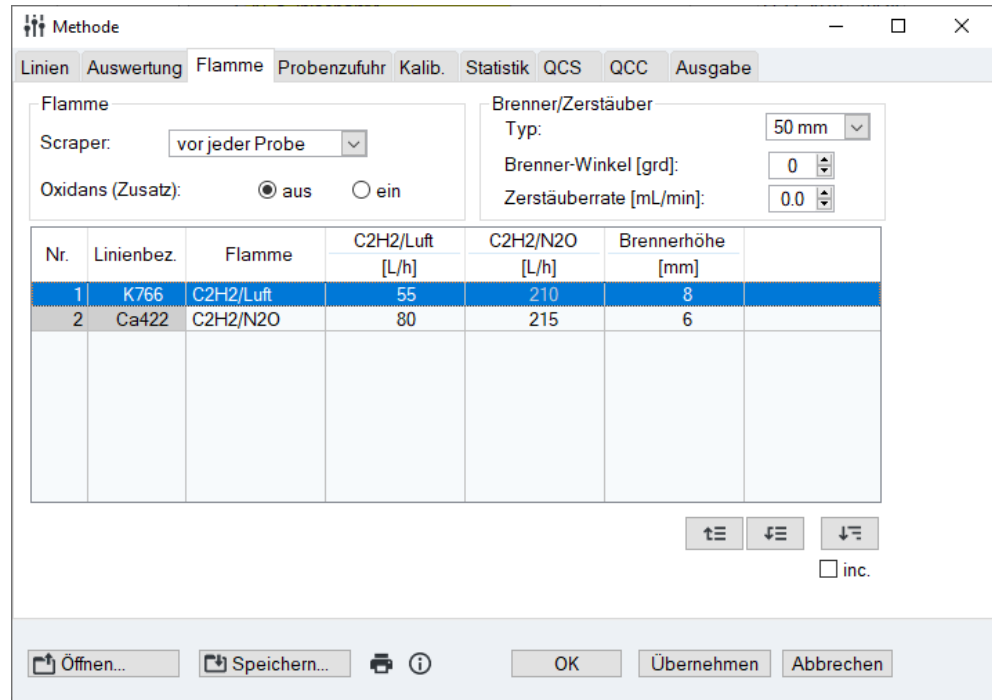
Die Parameter für die Zeeman-Untergrundkorrektur können Sie automatisch im Fenster **Spektrometer | Feldstärke-Opt.** optimieren.

Sehen Sie dazu auch

-  Untergrundkorrekturen für Zeeman-AAS ZEEnit 700/650 P [▶ 119]
-  Untergrundkorrektur für ZEEman-AAS ZEEnit 700 Q [▶ 122]

3.2.3 Flammenparameter spezifizieren (Fenster Methode | Flamme)

Im Fenster **Methode | Flamme** stellen Sie für Flammentechnik die Brennerparameter und Gasströme ein.



Linienunabhängige Einstellungen


Die linienunabhängigen Parameter sind für alle Elementanalysen mit der aktuellen Methode gleich. Stellen Sie zunächst die Parameter ein, die für die gesamte Methode gültig sind und nicht bei der Analyse der einzelnen Elemente/Linien variiert werden können.

Option	Beschreibung
Scraper	Nur für Acetylen-Lachgas-Flamme Der Scraper wird für den automatischen Analysenablauf für den 50-mm-Brenner mit Acetylen-Lachgas-Flamme aktiviert. Der automatische Reinigungsvorgang kann zu verschiedenen Zeitpunkten erfolgen.
Ox.-Regelung	aus Betrieb ohne Zusatzoxidans ein Betrieb mit Zusatzoxidans Bei Verwendung von Zusatzoxidans optimieren Sie die Flammenparameter manuell.
Typ	Auswahl des verwendeten Brennertyps
Brenner-Winkel	Winkel des Brenners bezogen auf die optische Achse Der Winkel des Brenners muss manuell am Brenner eingestellt werden (im Regelfall auf 0°). Die Eingabe ist optional und erfolgt hier nur für die Vollständigkeit der Methode und des Protokolls. Wertebereich: 0 – 90°
Zerstäuberrate	Ansaugrate des Zerstäubers Die Ansaugrate ist ein zerstäuberspezifischer Wert. Die Eingabe ist optional und erfolgt hier nur für die Vollständigkeit der Methode und des Protokolls. Wertebereich: 1,0 – 9,9 mL/min

Linienabhängige Parameter

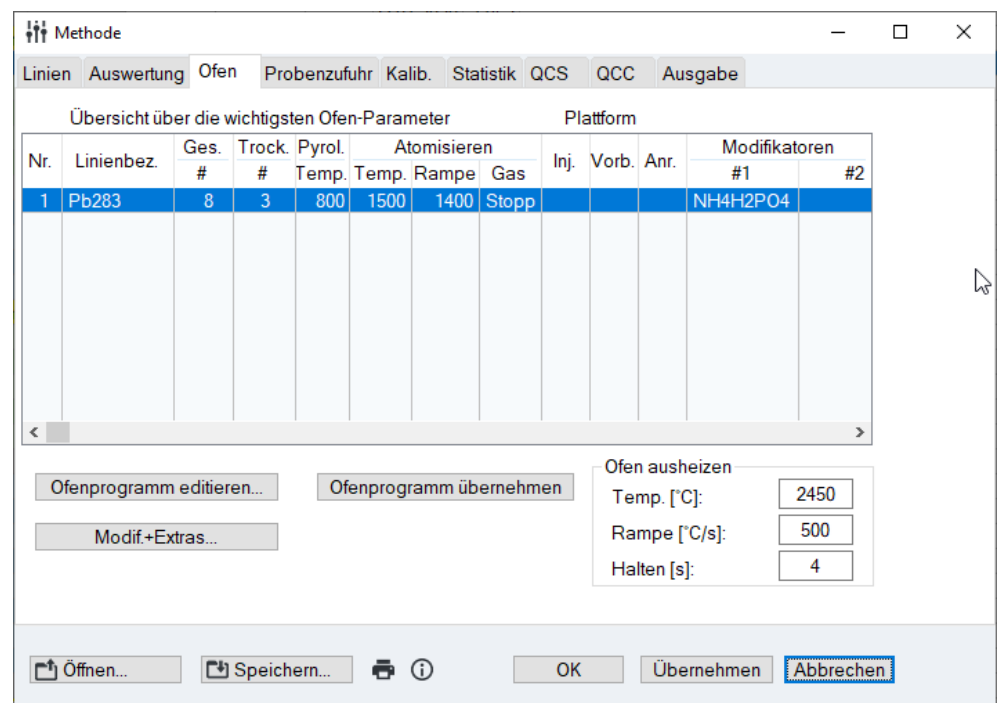
In der Tabelle sind die linienabhängigen Parameter der Brenngasflüsse und Brennerhöhen aufgelistet. Die Werte können im Programm zur Flammenoptimierung manuell oder automatisch gesucht und in diese Tabelle der linienabhängigen Flammenparameter übertragen werden. Wenn Sie Zusatzoxidans verwenden, können Sie die Flamme nur manuell optimieren. Alternativ können Sie die Werte manuell editieren.

Sehen Sie dazu auch

 Flamme optimieren [[▶ 127](#)]

3.2.4 Ofenprogramm eingeben (Fenster Methode | Ofen)

Das Fenster **Methode | Ofen** enthält eine Übersicht über die wichtigsten Parameter der Ofenprogramme für die Atomisierung der zu analysierenden Elemente. Als Voreinstellungen für die Atomisierung der einzelnen Elemente mit Graphitofentechnik sind die Daten der Ofenprogramme aus dem Kochbuch eingetragen. Das Ofenprogramm kann für jede Analyselinie im Fenster **Ofen** editiert werden.



The screenshot shows the 'Methode | Ofen' window with the following table of parameters:

Nr.	Linienbez.	Ges. #	Trock. #	Pyrol. Temp.	Atomisieren			Inj.	Vorb.	Anr.	Modifikatoren	
					Temp.	Rampe	Gas				#1	#2
1	Pb283	8	3	800	1500	1400	Stopp				NH4H2PO4	

Below the table are buttons: 'Ofenprogramm editieren...', 'Ofenprogramm übernehmen', and 'Modif.+Extras...'. To the right is a 'Ofen ausheizen' section with input fields for 'Temp. [°C]: 2450', 'Rampe [°C/s]: 500', and 'Halten [s]: 4'. At the bottom are buttons: 'Öffnen...', 'Speichern...', 'OK', 'Übernehmen', and 'Abbrechen'.

Über der Tabelle finden Sie die Information, für welche Graphitrohrtyp (Wand oder Plattform) die Methode erstellt wurde. Falls dieser Typ vom initialisierten Typ abweicht, wird dies ebenfalls angezeigt.

Folgende Parameter der Ofenprogramme werden aufgelistet:

Spalte	Beschreibung
Linienbez.	Name der Elementlinie
Ges.	Gesamtanzahl Schritte des Ofenprogramms
Trock.	Anzahl Trocknungsschritte im Ofenprogramm
Pyrol. Temp.	Pyrolysetemperatur in °C
Atomisieren	Detaillierte Anzeige der Temperaturdaten während der Atomisierungsphase: Temp. Endtemperatur der Atomisierungsphase Rampe Temperaturänderung in der Atomisierungsphase in °C/s

Spalte	Beschreibung
	Gas Zufuhr von Schutzgas
Inj.	keine Markierung Die Probeninjektion erfolgt vor Beginn des Ofenprogramms. Markierung mit Stern * Die Probe wird zu einem späteren Zeitpunkt injiziert.
Vorb.	Thermische Vorbereitung Wenn markiert, werden Probe oder Modifikatoren thermisch vorbereitet.
Anr.	Wenn markiert, wird die Probe angereichert.
Modifikatoren	Zusätzlich verwendete Modifikatoren. Bei jeder Messung können maximal 5 Modifikatoren zugesetzt werden.

Schaltflächen

Schaltfläche	Bedeutung
Ofenprogramm editieren	Öffnet das Fenster Ofen Ofenprogramm , in dem das vollständige Ofenprogramm abgebildet ist. Die Ofenparameter können für jede zu analysierende Elementlinie angepasst werden. Alternativ können Sie auch mit einem Doppelklick auf die Zeile der Analysenlinie das Fenster Ofen Ofenprogramm öffnen.
Ofenprogramm übernehmen	Überträgt die Parameter der markierten Analysenlinie auf alle in der Liste nachfolgenden Linien.
Modif.+Extras	Öffnet das Fenster Ofen Modif.+Extras zur Spezifikation der verwendeten Modifikatoren

Ofen ausheizen als zusätzliche Aktion in der Sequenz

Der Ofen wird am Ende des Ofenprogramms für eine Elementlinie grundsätzlich zur Reinigung ausgeheizt. Zusätzlich kann als weiterer Reinigungsschritt in der Sequenz die Sonderaktion **Ofen ausheizen** vereinbart werden. Die Parameter für diese Aktion werden im Bereich **Ofen ausheizen** eingegeben.

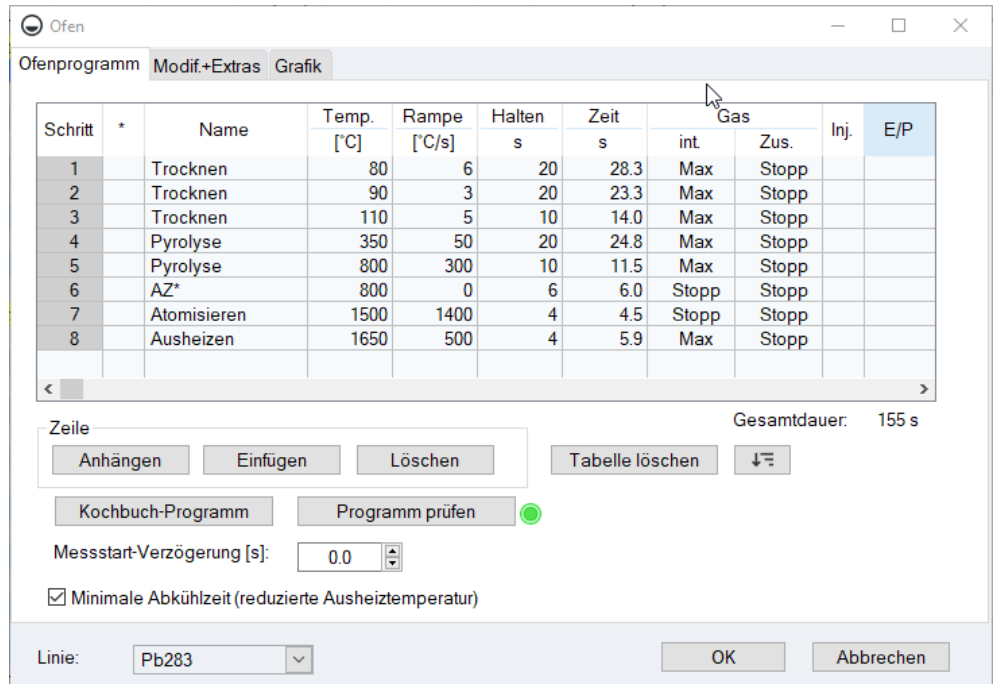
Option	Bedeutung
Temp.	Zu erreichende Endtemperatur im Ausheizprozess
Rampe	Geschwindigkeit der Temperaturänderung
Halten	Haltezeit der Endtemperatur

Sehen Sie dazu auch

 Messungen und Aktionen in einer Sequenz spezifizieren [► 73]

3.2.4.1 Ofenprogramm editieren

Wenn Sie im Fenster **Methode | Ofen** auf die Schaltfläche **Ofenprogramm editieren** klicken, erscheint das Fenster **Ofen | Ofenprogramm** in editierbarer Version.



Tabellenanzeige

Die Tabelle listet alle zum aktuellen Ofenprogramm gehörenden Schritte mit den zugehörigen Einstellungen für Temperatur, Haltezeit, Gaszufuhr, Verwendung von Modifikatoren und Anreicherung/thermische Vorbehandlung auf.

Schaltflächen und Eingabefelder

Option	Beschreibung
Anhängen	Neue Zeile am Ende der Liste einfügen
Einfügen	Neue Zeile vor markierten Listenplatz einfügen
Löschen	Markierte Zeilen löschen
Tabelle löschen	Gesamte Ofenprogrammtabelle löschen
↓	Kopiert die Parameter der Zeile auf alle nachfolgenden Zeilen
Messstart-Verzögerung	Optional zeitverzögerte Aufnahme des Messsignals eingeben Standardmäßig beginnt die Aufnahmen des Messsignals mit Beginn des Ofenprogrammschritts Atomisieren . Durch Eingabe einer Zeit wird der Aufnahmebeginn des Messsignals um diese Zeit verzögert. Die Funktion wird genutzt, um die Messung erst nach Erreichen der Atomisierungstemperatur auf dem Temperaturplateau zu starten.
Kochbuch-Programm	Ofenprogramm für die gewählte Analysenlinie aus dem Kochbuch laden
Programm prüfen	Wenn das Ofenprogramm Fehler enthält, die eine Abarbeitung unmöglich machen, wird der fehlerhafte Schritt in einem Hinweisfenster angezeigt. Ein Start des Programms ist nicht möglich. Ändern Sie den fehlerhaften Schritt (oder ändern Sie das dem Schritt vorangehende Ofenprogramm). Eine mögliche thermische Überlastung des Ofens wird bei Programmstart geprüft (wenn alle Randbedingungen bekannt sind). Sind Temperaturen bzw. Zeiten zu groß gewählt, erscheint nach Programmstart die Fehlermeldung "Thermische Überhitzung Ofen – das Ofenprogramm wird nicht abgearbeitet. Ändern Sie die Schritte mit der höchsten Ofentemperatur und der längsten Haltezeit".
Trocknung übernehmen	Bei Analyse mehrerer Linien Die eingestellten Trocknungsparameter in die Ofenprogramme aller Analysenlinien übernehmen

Option	Beschreibung
Ausheizen übernehmen	Bei Analyse mehrerer Linien Die eingestellten Parameter für das Ausheizen des Graphitrohrs in die Ofenprogramme aller Analyselinien übernehmen
Minimale Abkühlzeit (reduzierte Ausheiztemperatur)	Die Höhe der Ausheiztemperatur und die daraus resultierende Abkühlzeit sind ein entscheidender Faktor für die Analysendauer einer Probe. Die Ausheiztemperatur ist standardmäßig auf mindestens 2450 °C gesetzt. Bei schwer atomisierbaren Elementen kann die voreingestellte Ausheiztemperatur auch höher sein. Diese Temperatur ist ausreichend, um die meisten Proben- und Matrixrückstände aus dem Graphitrohr zu entfernen. Bei Proben mit einer geeigneten Matrix, die meist eine geringere Atomisierungstemperatur benötigen, kann die Ausheiztemperatur und damit die benötigte Analysenzeit verringert werden. Durch Aktivieren der Option wird die Ausheizzeit automatisch auf den Wert der Atomisierungstemperatur plus 150 °C gesetzt.

Parameter einzelner Ofenprogramm-Schritte spezifizieren

Bei Auswahl der Analyselinie wird zunächst ein passendes Ofenprogramm aus dem Kochbuch geladen.

- ▶ Mit den Schaltflächen **Neu**, **Einfügen** oder **Löschen** ändern Sie das Ofenprogramm nach Ihren Wünschen.
- ▶ Zum Editieren klicken Sie in eine Tabellenzelle.
- ▶ Bei einer beschränkten Vorauswahl öffnet sich in der Zelle eine Liste. Zahlen werden direkt im Feld editiert.

Programmschritte

Schritt	Beschreibung
Trocknen	Verdampfen des Lösemittels in der Probe
Pyrolyse	Thermische Vorbehandlung, bei der die Probe ohne Sauerstoffzufuhr thermisch zersetzt wird
Veraschen	Thermische Vorbehandlung, bei der Probe unter Verwendung eines entsprechend gewählten Zusatzgases (bspw. mit Sauerstoffzufuhr) thermisch zersetzt wird
AZ	Nullabgleich: Messen des optischen Nullzustandes (Extinktion = 0)
Atomisieren	Freisetzen der Analytotope
Ausheizen	Abbau von Probenrückständen

Temperaturparameter

Parameter	Beschreibung
Temperatur	Endtemperatur dieses Schritts Wertebereich für novAA 400 P und ZEEmit-Serie: Maximaltemperatur bis 3000 °C in 1-°C-Schritten Minimaltemperatur mindestens 20 °C über der Kühlwasser-Temperatur (vorzugsweise 35 °C) des Umlaufkühlers Wertebereich für novAA 800: Maximaltemperatur bis 2600 °C in 1-°C-Schritten Minimaltemperatur mindestens 20 °C über der Kühlwasser-Temperatur (vorzugsweise 35 °C) des Umlaufkühlers
Rampe	Aufheizrate, die zum Erreichen der Zieltemperatur führen soll Wertebereich für novAA 400 P und ZEEmit-Serie: 1 ... 3000°C/s in 1-°C/s-Schritten; FP (Full Power), NP (No Power) sind die jeweils möglichen Grenzzraten

Parameter	Beschreibung
	Wertebereich für novAA 800: 1 ... 1100°C/s in 1-°C/s-Schritten; FP (Full Power), NP (No Power) sind die jeweils möglichen Grenzzahlen
Halten	Zeit, die die Zieltemperatur gehalten werden soll Wertebereich: 0 ... 999 s abzüglich Aufheizzeit
Zeit	Gesamtdauer des Schritts (Summe aus Aufheizzeit und Haltezeit), wird automatisch berechnet

Gaszufuhr

Option	Beschreibung
int.	Schutzgasstrom novAA 400 P und ZEEnit-Serie Stopp: Keine Zufuhr, wirkt 2 s vor Schrittwechsel Min: Minimale Zufuhr rate (0,1 L/min Ar) Max: Maximale Zufuhr rate (2,0 L/min Ar) novAA 800 Min: Minimale Zufuhr rate (0,1 L/min) Mittel: Mittlere Zufuhr rate (0,5 L/min Ar) Max: Maximale Zufuhr rate (2,0 L/min)
Zus.	Zusatzgasstrom, z. B. Luft, Stickstoff etc. novAA 400 P und ZEEnit-Serie Stopp: Keine Zufuhr, wirkt 2 s vor Schrittwechsel Max: Maximale Zufuhr rate (0,5 L/min) novAA 800 Min Minimale Zufuhr rate (0,2 L/min) Mittel Mittlere Zufuhr rate (0,5 L/min Ar) Max: Maximale Zufuhr rate (0,7 L/min)

Injektionsschritt/Thermische
Vorbehandlung

Option	Beschreibung
Inj.	Wenn mit "*" gekennzeichnet, wird die Probe (in der HydrEA-Technik das Gas) erst nach diesem Schritt ins Graphitrohr gebracht (Pipettieren in das vorgewärmte Rohr).
E/P	Nur Lösungsanalytik Anreichern/Thermisch vorbehandeln (Enrichment/Pretreatment) Beim Anreichern wird während des Messzyklusses die Probe bis zum Anreicherungs-schritt vorbehandelt, anschließend das Rohr wieder auf Raumtemperatur gekühlt und das nächste Probenvolumen injiziert. Bei thermischer Vorbehandlung von Analytlösung und/oder Modifikatoren erfolgt diese Vorbehandlung bis zum ausgewiesenen Schritt. Am Ende des Schrittes muss das Graphitrohr heruntergekühlt und die Probe injiziert werden. Die Zahl der Anreicherungszyklen, die Verwendung von Modifikatoren und Art der thermischen Vorbehandlung wird im Fenster Ofen Modif.+Extras spezifiziert.

Sie können ein Ofenprogramm für eine Analysenlinie softwaregestützt im Fenster
Ofen | Optimierung optimieren.

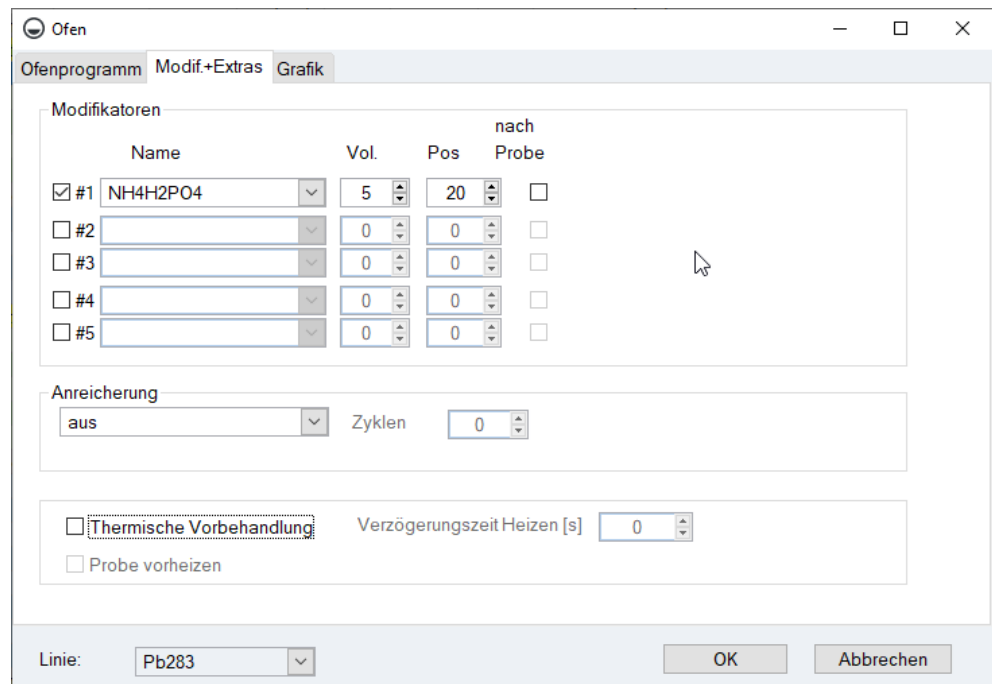
Sehen Sie dazu auch

Atomisierungstemperatur optimieren [▶ 132]

3.2.4.2 Matrixmodifikatoren, Anreicherung und Vorbehandlung spezifizieren

Wenn Sie im Fenster **Methode | Ofen** auf die Schaltfläche **Modif.+Extras** klicken, erscheint das Fenster **Ofen | Modif.+Extras** in editierbarer Version. Sie können folgende Parameter spezifizieren:

- Verwendung und Volumen von Matrixmodifikatoren
- Anreicherung im Graphitrohr durch wiederholtes Pipettieren und Trocknen
- Thermischen Vorbehandlung der Probe



Die Verwendung von Modifikatoren zur Matrixabtrennung und die thermische Vorbehandlung werden linienspezifisch eingestellt.

Matrixmodifikatoren

Für die Analyse einer Elementlinie können bis zu 5 verschiedene Modifikatoren spezifiziert werden. Diese werden durch Anklicken des jeweiligen Modifikator-Kontrollkästchens aktiviert.

Um Verschleppungsfehler zu vermeiden, erfolgt die Aufnahme der Analysenkomponenten standardmäßig in folgender Reihenfolge:

- Blank (bei Verdünnung)
- Modifikator 1
- Weitere Modifikatoren (falls vereinbart)
- Probenlösung

Die Reihenfolge der Abgabe in das Graphitrohr erfolgt umgekehrt, so dass die Probe zuerst injiziert wird. Mit allen weiteren Komponenten werden Probenrückstände aus dem Dosierschlauch gespült und in das Graphitrohr injiziert. Die Standardreihenfolge von Probe und Modifikatoren kann bei Bedarf geändert werden.

Geben Sie folgende Parameter für die Modifikatoren ein:

Option	Beschreibung
<input type="checkbox"/> Kontrollkästchen	Modifikator für die Analyse verwenden

Option	Beschreibung
Name	Das Listenfeld enthält die Namen der gebräuchlichsten Modifikatoren. Einen Namen aus der Liste auswählen oder direkt in das Eingabefeld eingeben.
Vol.	Entnahmehvolumen (1 bis 50 µL) eingeben
Pos	Position des Modifikators auf dem Probenwechsler eingeben
nach Probe	Wenn aktiviert, wird der betreffende Modifikator nach der Probe durch den Probengeber aufgenommen, d.h. vor der Probe in das Graphitrohr injiziert.
Vorb.	Modifikator thermisch vorbehandeln

Anreicherung

Bei einer Anreicherung wird das Ofenprogramm bis zum ausgewiesenen Schritt (Spalte **E/P**) wiederholt durchlaufen. Dabei wird jeweils die in der Probenabelle spezifizierte Probenmenge injiziert und vorbehandelt, anschließend das Rohr wieder auf Raumtemperatur gekühlt und das nächste Probenvolumen injiziert. Auf diese Weise kann eine größere Probenmenge in den Ofen gebracht werden. Das Volumen der Modifikatoren wird nur einmal injiziert.

Folgende Anreicherungsmodi können spezifiziert werden:

Option	Beschreibung
aus	Es erfolgt keine Anreicherung.
Permanent (nur Proben)	Anreicherung bei jeder Probe (ohne Sonderproben wie Standards etc.)
Permanent (inkl. Kalibrierung)	Anreicherung bei jeder Probe inklusive Standards, QC-Proben und Additionsstandards
bei BG-Unterschreitung	Anreicherung nur bei Proben, deren Konzentration geringer als die Bestimmungsgrenze ist
Zyklen	Anzahl der Anreicherungszyklen (2 bis 100) Hinweis: Da neben dem zu messenden Element auch alle Verunreinigungen im Rohr angereichert werden, sollte die Zahl der Anreicherungsschritte bei Realproben in Grenzen gehalten werden.

Thermische Vorbehandlung

Bei thermischer Vorbehandlung von Analytlösung und/oder Modifikatoren erfolgt diese Vorbehandlung bis zum ausgewiesenen Schritt im Ofenprogramm. Am Ende des Schritts werden die restlichen Komponenten in das Rohr injiziert.

Option	Beschreibung
Thermische Vorbehandlung	Wenn aktiviert, erfolgt eine thermische Vorbehandlung von Modifikatoren oder Probe. Im Bereich Modifikatoren müssen für die vorzubehandelnden Modifikatoren die Kontrollkästchen Vorb. aktiviert werden. Hinweis: Die Vorbehandlungstemperatur des Modifikators kann höher sein als die Pyrolysetemperatur der Probe.
Probe vorheizen	Analytlösung vorbehandeln, Modifikatoren und sonstige Komponenten zugeben
Verzögerungszeit Heizen	Wartezeit zwischen der Zugabe der thermisch zu behandelnden Komponente und der nächsten Komponente



HINWEIS

Nach thermischer Vorbehandlung höher als 300 °C Rohr abkühlen!

Wenn die Temperatur der thermischen Vorbehandlung mehr als 300 °C beträgt, ist vor der Zugabe der restlichen Komponenten in einem zusätzlichen Schritt das Graphitrohr auf unter 300 °C zu kühlen.

Wird in das heiße Rohr (über 300 °C) pipettiert, wird die Schlauchspitze zerstört! Bei höheren Temperaturen gibt es keine Fehlermeldung!

Feststoffanalytik unter Verwendung des Feststoffprobengebers SSA 600

Für die Feststoffanalytik kann nur die Zugabe von Matrixmodifikatoren vereinbart werden. Wenn einer der Modifikatoren aktiviert ist, können Name und Volumen festgelegt werden (wie oben).

Beim **SSA 600 ohne Flüssigdosierung** müssen die Modifikatoren von Hand auf die Probe pipettiert werden. Die Zugabe erfolgt unmittelbar, bevor die Plattform in den Ofen gebracht wird, oder als letzter Schritt einer kompletten Probenvorbereitung mit Hilfe des SSA 600.

Beim **SSA 600 mit Flüssigdosierung** werden der Modifikator bzw. die flüssigen Proben automatisch pipettiert.

Bei der thermischen Vorbehandlung in der Feststoffanalyse werden die Plattformen zunächst mit den Modifikatoren (z.B. Palladium) vorbehandelt. Dabei wird das Ofenprogramm bis zum Schritt **E/P** abgearbeitet. Danach wird von der beschichteten Plattform die Tara ermittelt und die Probe dosiert. Das Ofenprogramm wird anschließend ab dem Schritt **E/P** fortgesetzt.

3.2.5 Hydrid- und HydrEA-Systeme spezifizieren (Fenster Methode | Hydrid)

Im Fenster **Methode | Hydrid** stellen Sie die Parameter für folgende Hydridsysteme ein:

- HS60A/HS60
- HS55A/HS55
- HS 60 modular
- HS 55 modular

Das angeschlossene Hydridsystem wird bei der Geräteinitialisierung erkannt. Die Parameter für den Hydridinjektor HS50 werden im Fenster **Methode | Probenzufuhr** vereinbart. Die Befehle zum zusätzlichen Spülen oder Laden des Hydridsystems erfolgen im Fenster **Hydridsystem**.

Betriebsart

Der Anwender kann je nach Ausrüstung des Hydrid-Systems zwischen verschiedenen Betriebsarten wählen.

Option	Beschreibung
Hydrid (kontinuierlich)	Betrieb mit Probengeber oder manuell Die Reaktion erfolgt im Reaktor unter kontinuierlichen Bedingungen (HS 60 A / HS 60 / HS 60 modular).
Hydrid (Batch)	Manueller Betrieb Die Probe wird in den Reaktionsbecher pipettiert (max. 30 mL), dieser wird am Kopf des Batch-Moduls gasdicht geklemmt. Mit dem ersten Kanal der Komponenten-Pumpe wird das Reduktionsmittel in den Reaktionsbecher gefördert. Die schnelle und teils heftige Reaktion setzt gasförmiges Metallhydrid bzw. atomaren Hg-Dampf frei (HS 55 A / HS 55 / HS 55 modular).
FBR-Verfahren	Nur für kontinuierlichen Betrieb, empfohlen für Hg-Analyse Fast Baseline Return, FBR Nach Erreichen des Absorptionsmaximums spült der direkte Argon-Gasstrom während der Spülzeit 2 die Küvette frei und lässt das Signal schnell auf die Basislinie zurückkehren.

Küvetten temperatur/Pumpgeschwindigkeit

Option	Beschreibung
Küvetten-Temp.	Nur für Hydrid-Technik Für die Hydridbildner As, Se, Sn, Sb, Te und Bi kann eine Küvetten-temperatur zwischen 600 °C und 1000 °C gewählt werden. Für Hg steht RT (Raumtemperatur < 60 °C) oder 150 °C zur Auswahl. Das Heizen auf die gewählte Küvetten-temperatur erfolgt beim Start des Analysenablaufs oder kann im Fenster Hydridsystem gestartet werden.
Pumpgeschw.-Stufe	Es stehen 4 Geschwindigkeiten (1 ... 4) für den Transport der Probe (im kontinuierlichen Betrieb) und der Komponenten zur Auswahl. Im kontinuierlichen Betrieb wird daraus zusammen mit der Reaktionszeit die zugeführte Probenmenge bestimmt.

Systemspülung

Für kontinuierlichen Betrieb

Optional kann eine Systemspülung nach jeder Probenmessung oder als Aktion vereinbart werden.

Option	Beschreibung
nach jeder Probe	<p>Systemspülung nach jeder Probenmessung</p> <p>aus Das System wird nicht gespült.</p> <p>Spülung mit Säure Nach jeder Probe erfolgt eine Spülung mit verdünnter Säure. Die Zeit wird unter Spülzeit Säure festgelegt. Nach der Hälfte der Spülzeit wird der Probenweg auf Reaktor umgeschaltet.</p> <p>Spülung mit Red.Mittel/Säure Bei stark kontaminiertem System (Proben mit hohem Element-Gehalt) ist dieses Spülverfahren zu empfehlen. Zunächst erfolgt eine Spülung mit Reduktionsmittel über die Zeit Spülzeit Red.-Mittel, anschließend eine Wartezeit (Einwirkzeit), um das Reduktionsmittel auf die Ablagerungen an den Schlauchwänden einwirken zu lassen. Abschließend wird mit verdünnter Säure gespült (Spülzeit Säure).</p>
bei Aktion	<p>Die Systemspülung als Aktion wird in der Sequenz unter Sonderfunktion vereinbart. Dieser zusätzliche Spülschritt kann nach Proben mit hohem Elementgehalt eingefügt werden.</p> <p>Spülung mit Säure wie bei Option nach jeder Probe</p> <p>Spülung mit Red.Mittel/Säure wie bei Option nach jeder Probe</p>
Pos. Red.Mittel	Position des Reduktionsmittels auf dem Probenteller
Spülzeiten	<p>Öffnet ein Eingabefenster für die drei Spülzeiten: Spülzeit Red.-Mittel, Einwirkzeit, Spülzeit Säure</p> <p>Stellen Sie die Zeiten entsprechend den eingestellten Spüloptionen ein.</p>

Operationszeiten

Je nach gewählter Betriebsart sind die Operationszeiten einzustellen. Alle Operationszeiten werden in Sekunden eingegeben.

Option	Beschreibung
Ladezeit Probe	Zeit, in der die Probenpumpe den Probenschlauch vor der 2er-Ventilgruppe mit Probe füllt. Diese Zeit wird nur für die erste Messung einer neuen Probe benötigt.
AZ-Wartezeit	Zeit unmittelbar vor dem Basislinien-Abgleich (AZ = Auto Zero)
Vorspülzeit	Spülzeit des Bechers mit Argon vor der Reaktion (bei Hydridbildner) Die Vorspülzeit wird zum Austreiben der Luft verwendet, um bei der anschließenden Reaktion eine Knallgasreaktion zu verhindern.
Reaktionszeit	Zeit, in der die Probenpumpe Probe in den Reaktor pumpt. Sie ist der entscheidende Parameter für die zugeführte Probenmenge und die Messempfindlichkeit.
Pumpzeit	Zeit, in der Reduktionsmittel in den Becher gepumpt wird, um eine Reaktion herbeizuführen.
Spülzeit 1 ... 3	Zeiten, die dem Transport des Reaktionsgases mit Hilfe des Argon-Stromes dienen. Die Transportwege sind in den einzelnen Phasen für die verschiedenen Betriebsarten unterschiedlich. Die Transportwege können grafisch dargestellt werden.
Heizzeit Kollektor	Zeit, in der die Kollektorheizung läuft, um das angereicherte Hg freizugeben.

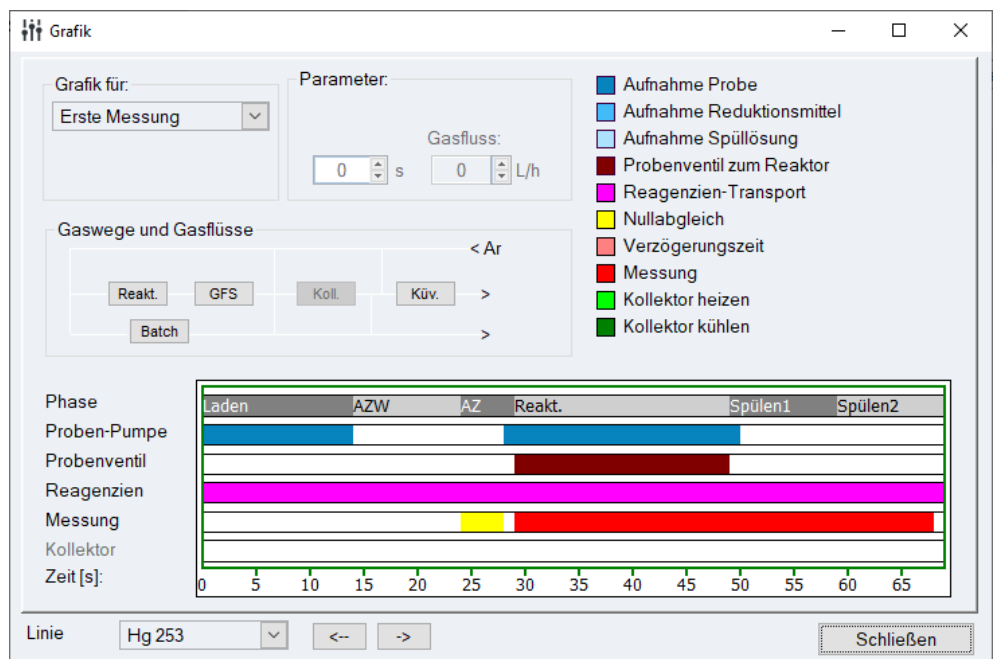
Option	Beschreibung
Kühlzeit Kollektor	Zeit, in der die Lüftung des Kollektors läuft, um den Kollektor für die erneute Anreicherung abzukühlen.
Gasfluss	Argonfluss festlegen, der in den danebenstehenden Phasen fließt. Er gilt so lange, bis ein neuer Gasfluss eingegeben werden kann. Für die unterschiedlichen Betriebsarten kann der Gasfluss unterschiedlich oft umgestellt werden. Die Gaswege für die einzelnen Phasen des Analysenablaufs können der aus der grafischen Darstellung des Analysenablaufs im Hydridsystem entnommen werden. Die Gasflüsse sind in 3 Stufen von 5 bis 15 Liter/Stunde wählbar.

Batch-Parameter

Option	Beschreibung
Probenvolumen	Volumen der im Becher befindlichen Probe im mL eingeben
Anreicherungs-Zyklen	Für den Batch-Betrieb mit Hg-Anreicherung auf dem Kollektor Anzahl der Becher, deren Inhalt angereichert wird, festlegen

Gasflüsse und Analysenabläufe des Hydrid-/HydrEA-Systems grafisch darstellen

Mit **Grafik für** öffnen Sie die grafische Darstellung der Gaswege für die einzelnen Phasen des Analysenablaufs.





Die einzelnen Phasen des Analysenablaufs sind in der Ablaufgrafik farbig dargestellt. Durch Anklicken einer bestimmten Phase, dargestellt durch eine farbige Fläche, erscheinen die zugehörigen Parameter im Bereich **Parameter** und der eingestellte Gasfluss im Bereich **Gaswege und Gasflüsse**. Der Ablauf ist durch die Wahl der Betriebsart im Fenster **Methode | Hydrid** bestimmt.

Element	Beschreibung
Grafik für	Wenn eine Probenstatistik eingeschaltet ist, können die unterschiedlichen Abläufe für die erste, weitere und letzte Messung dargestellt werden.
Gaswege und Gasflüsse	Im Flussdiagramm werden die Gaswege des Hydridsystems angezeigt. Die Module Reakt. (Reaktor), GFS (Gas-Flüssig-Separator), Koll. (Goldkollektor), Batch (Batch-Modul) und Küv. (Küvette) bzw. Ofen sind mit ihren Verbindungsschläuchen (für Argon und Reaktionsgas) dargestellt.

Element	Beschreibung
	Klicken Sie in der Ablaufgrafik auf die Phase, deren Gasstrom Sie anzeigen möchten. Der Gasweg wird rot markiert und der Argon-Fluss numerisch in L/h angezeigt.
Parameter	Die Operationszeiten, Messzeiten und gegebenenfalls die zugehörigen Gasflüsse einer ausgewählten Phase anzeigen und ändern. Klicken Sie auf die entsprechende Phase. Name und Zahlenwert der Operations- bzw. Messzeit / Gasfluss werden angezeigt und können geändert werden. Die Ablaufgrafik wird an die geänderten Parameter angepasst.
Linie	Angezeigte Liniendaten umschalten

Sehen Sie dazu auch

-  Methodenparameter für Probengeber für Flammen- und Hydrid-/HydrEA-Technik [▶ 46]
-  Hydridsystem [▶ 138]

3.2.6 Parameter für Probengeber spezifizieren (Fenster Methode | Probenzufuhr)

Die Anzeige im Fenster **Methode | Probenzufuhr** passt sich der Atomisierungstechnik und den damit verwendeten Probengebern an.

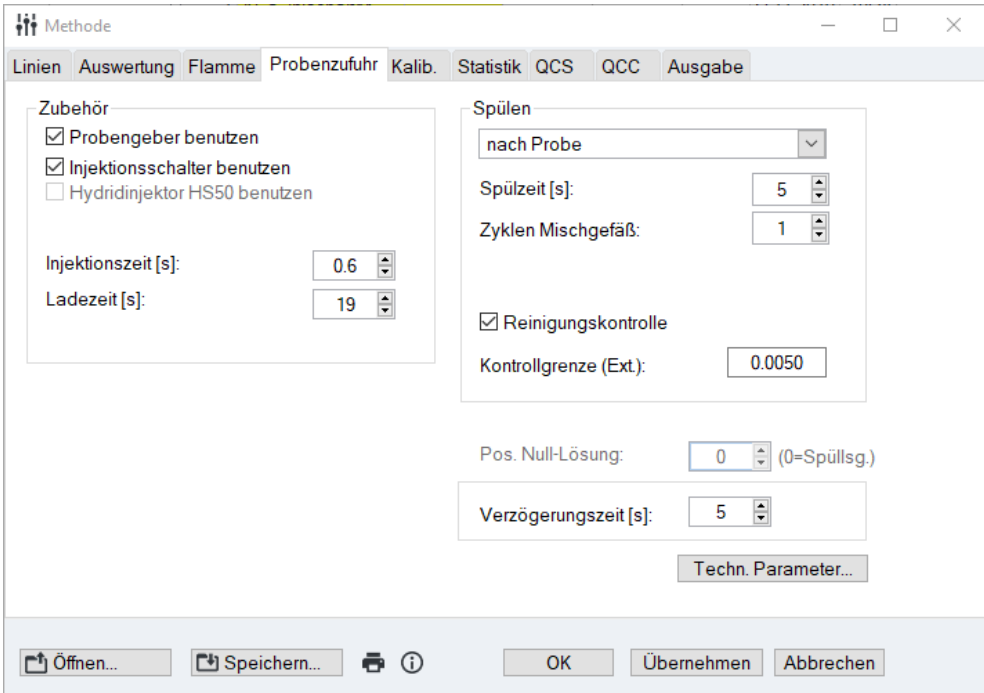
3.2.6.1 Methodenparameter für Probengeber für Flammen- und Hydrid-/HydrEA-Technik

Folgende Probengeber stehen für die Flammentechnik zur Verfügung:

- AS-FD / AS-F
- AS 52s / AS 51s

Im Fenster **Methode | Probenzufuhr** Probenzufuhr spezifizieren Sie folgende Parameter:

- Verwendung des Probengebers
- Spülmodus und Reinigungskontrolle
- Automatische Verdünnungen während der Analyse
- Verwendung des Injektionsschalters SFS 6 oder des Hydridinjektors HS 50



Zubehör verwenden

Option	Beschreibung
Probengeber benutzen	Den angeschlossenen und initialisierten Probengeber verwenden. Wenn deaktiviert, wird die Probe manuell ohne Probengeber zugeführt.
Injektionsschalter benutzen	Der Injektionsschalter SFS 6 kann zusammen mit einem Probengeber oder im manuellen Betrieb eingesetzt werden. Das SFS 6 sorgt für reproduzierbare Bedingungen in der Flamme. Es saugt ständig Spül- oder Trägerlösung an und hält den Brenner dadurch auf konstanter Temperatur. Kleine Probenmengen können gegen eine Trägerlösung reproduzierbar gemessen werden. Das Injektionsmodul ist auch für die Verarbeitung von zeitkonstanten Signalen (Mittelwert-Integration) einsetzbar. Injektionszeit In dieser Zeit öffnet das Ventil des SFS 6 den Probenweg, um die Probe zu zerstäuben und das Aerosol zum Brenner zu transportieren. Diese Zeit richtet sich nach der höchsten zu erwarteten Konzentration. Typische Werte: 0,5 ... 2,0 s. Ladezeit Diese Zeit wird benötigt, um den Probenansaugweg zwischen Probe und Injektionsmodul mit neuer Probe zu füllen.
Hydridinjektor HS50 benutzen	Der Hydridinjektor HS 50 ist ein rein pneumatisches Batch-System für den manuellen Betrieb. Es besteht aus Batch-Einrichtung und Küvettenhalter mit Quarzküvette. Die Reduktionsmittellösung wird pneumatisch von der Vorratsflasche in den Reaktionsbehälter transportiert. Die Quarzküvette wird durch die Flamme geheizt. Der HS 50 arbeitet mit den Signalauswertungen Fläche oder Höhe. Der Messablauf gliedert sich in die Abschnitte: Vorspülen – Nullabgleich – Reaktion/Integration. Reaktionszeit Während der Reaktionszeit wird Reaktionsmittel in den Reaktionsbecher transportiert. Mit Beginn der Reaktionszeit beginnt gleichzeitig die Messwertaufnahme. Die Integrationszeit muss so lang gewählt werden, dass in der Zeitspanne das gesamte Signal erfasst wird Vorspülzeit Während der Vorspülzeit wird der Reaktionsbecher von Luft freigespült. Das Vorspülen entfällt bei der Hg-Bestimmung, weil der Argonfluss bereits Hg aus der Probe austreibt. Probenvolumen Eingesetztes Probenvolumen
Verzögerungszeit	Diese Zeit wird benötigt, um die Probe zur Atomisierungseinheit (z.B. Flamme oder Reaktionskammer im Hydridsystem) zu transportieren. Die Zeit wird im Wesentlichen durch Länge der Probenschläuche bestimmt. Nach Ablauf der Verzögerungszeit beginnt die Messung des Signals.

Verdünnung bei Konzentrationsüberschreitung

Mit den Probengebern AS-FD und AS 52s können Sie Proben automatisch verdünnen. Hier in der Methode können Sie den Füllstand im Mischgefäß festlegen und eine automatische Verdünnung bei Konzentrationsüberschreitungen aktivieren.

Bei der Verdünnung bei Konzentrationsüberschreitung wird die gemessene Konzentration der Proben überprüft. Überschreitet die Konzentration den Messbereich der Kalibrierkurve um mehr als 10 %, wird die Probe im Mischgefäß verdünnt. Die Volumina werden im Programm in Abhängigkeit vom Extinktionswert der unverdünnten Lösung berechnet. Das berechnete Analytvolumen wird in das Mischgefäß gebracht und das

Mischgefäß bis zum eingegebenen Füllstand mit Verdünnungslösung aus der Vorratsflasche aufgefüllt. Den Grenzwert 10 % können Sie im Fenster **Optionen | Kalibration** editieren.

Liste / Option	Beschreibung
Verdünnung bei Konz.-Überschreitung	<p>keine Es wird keine automatische Verdünnung bei Konzentrationsüberschreitung ausgeführt.</p> <p>im Mischgefäß Die Verdünnung bei Konzentrationsüberschreitung wird wie oben beschrieben vorgenommen.</p>
Füllst. Mischgefäß	Auf dieses Volumen wird das Mischgefäß mit Verdünnungslösung aufgefüllt.

Hinweis: Die individuellen Verdünnungsfaktoren für jede Probe stellen Sie im Fenster **Proben-ID** ein.

Spülen und Reinigungskontrolle

Während der Abarbeitung einer Mess-Sequenz können Sie Spülschritte zur Reinigung der Probenwege im Gerät und im Zubehör vereinbaren.

Überschreitet die Konzentration der Probe den Messbereich der Kalibrierkurve um mehr als 10 %, kann das Brenner-Zerstäuber-System (Flammentechnik) oder das Hydridsystem (Hydridtechnik) gespült werden, um Kontaminationen aus der vorangegangenen Messung zu entfernen. Während der Spülung wird zur Kontrolle des Reinigungsergebnisses die Extinktion/Emission gemessen. Die automatische Reinigungskontrolle wird nach der Messung von hochkonzentrierten Proben empfohlen, insbesondere bei aktiviertem Modus **Verdünnung bei Konz.-Überschreitung**.

Option	Beschreibung
Spülen	<p>aus Spülung ist ausgeschaltet. Es wird nicht automatisch gespült.</p> <p>nach jeder Probe Spülung nach jeder Probe, aber nicht innerhalb einer Statistikserie</p>
Spülzeit	Zeit, in der Spülmittel aus dem Spülgefäß angesaugt wird. Dabei werden der Schlauchweg und das Brenner-Zerstäuber-System gespült.
Zyklen Mischgefäß	Anzahl der Spülzyklen für das Mischgefäß In einem Spülzyklus wird das Mischgefäß mit Spülflüssigkeit / Verdünnungslösung gefüllt und wieder geleert.
Reinigungskontrolle	Wenn aktiviert, erfolgt bei Konzentrationsüberschreitungen automatisch eine kontrollierte Reinigung.
Kontrollgrenze (Ext.)	Auf diesen Wert muss der Signalpegel während der Spülung zurückgegangen sein, bevor die verdünnten Proben oder Proben mit geringerer Konzentration gemessen werden.

Hinweis: Eine Reinigungskontrolle kann auch in der Sequenz, unabhängig von einer vorliegenden Konzentrationsüberschreitung, vereinbart werden.

Spülablauf des Probengebers

Zur Spülung von Probenansaugweg und Brenner-Zerstäuber-System taucht der Probengeberarm mit der Kanüle in das Spülgefäß des Probengebers. Eine Membranpumpe stellt aus der Vorratsflasche Spülflüssigkeit für den Zeitraum des Eintauchens zur Verfügung. Die Pumprate ist größer als die Ansaugrate des Zerstäubers bzw. die Pumprate des Hydridsystems. Der gesamte Probenweg wird gespült (Kanüle, Probenschlauch, Probeninjektor SFS6 und das Brenner-Zerstäubersystem). Die überflüssige Spülflüssigkeit fließt in die Abfallflasche ab.

Bei der Spülung des Mischgefäßes des AS 52s und AS-FD wird in einem Spülzyklus das Mischgefäß mit Spülflüssigkeit/Verdünnungslösung gefüllt und wieder geleert.

Verzögerungszeit

Die Verzögerungszeit wird benötigt, um die Probe zur Atomisierungseinheit (z.B. Flamme oder Reaktionskammer im Hydridsystem) zu transportieren. Abhängig von der Länge der Ansaugstrecke zwischen Probe und Zerstäuber muss die Verzögerungszeit der Messung angepasst werden.

- ▶ Stellen Sie die Zeit im Feld **Verzögerungszeit** ein. Wenn Sie im Fenster **Methode | Statistik** eine Pseudomessung vereinbaren, verwenden Sie die folgenden Zeiten. Wenn Sie keine Pseudomessung aktivieren, verlängern Sie die angegebenen Zeiten um 3 s.

Zubehör / mit aktivierter Pseudomessung	Zeit
Kurze Ansaugkapillare bei manuellem Arbeiten	8 s
Standardansaugkapillare bei manuellem Arbeiten	12 s
Injektionsmodul SFS bei manuellem Arbeiten	18 s
Probengeber ohne Injektionsmodul	18 s
Probengeber mit Injektionsmodul	20 s

Weitere Schaltflächen/Optionen

Option/Schaltfläche	Beschreibung
Pos. Null-Lösung	Position der Referenzlösung auf dem Probensteller Hinweis: Alle weiteren Probenpositionen legen Sie in der Sequenz oder der Proben-ID fest.
Techn. Parameter	Fenster Probengeber Techn. Parameter öffnen Hier können Sie weitere Parameter des Probengebers, wie z. B. die Eintauchtiefe in die Probengefäße und die Dosiergeschwindigkeit, spezifizieren.

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Fenster Proben-ID [▶ 77]
- 📖 Messungen und Aktionen in einer Sequenz spezifizieren [▶ 73]
- 📖 Allgemeine Einstellungen für die Kalibration und Blindwertkorrektur [▶ 180]

3.2.6.2 Methodenparameter für Probengeber für Graphitofentechnik (Lösungsanalytik)

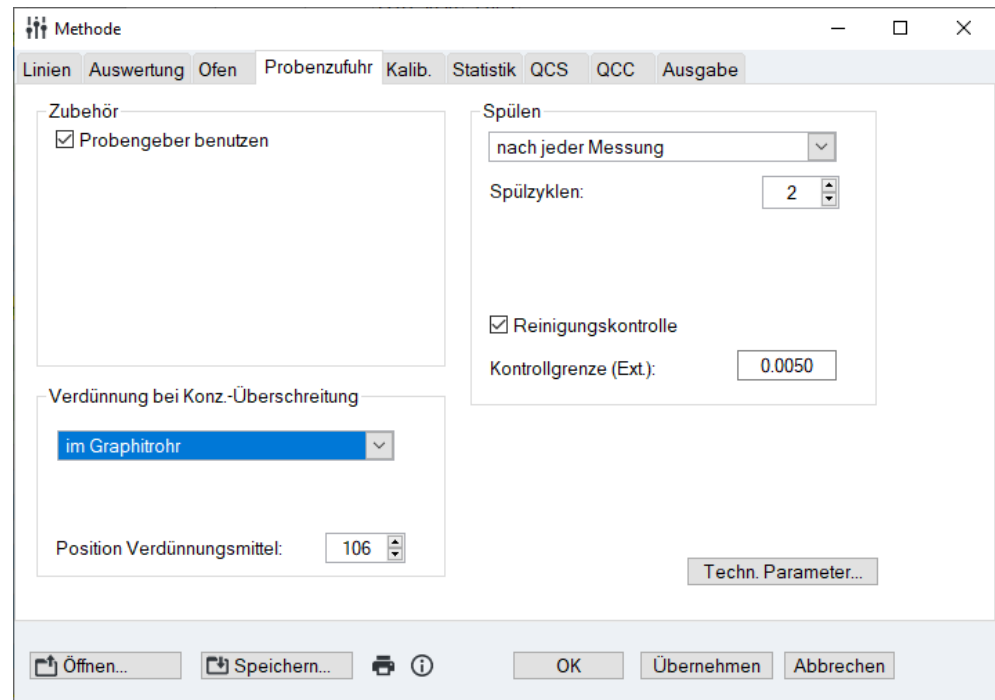
Für die Probenzufuhr zum Graphitofen muss einer der folgenden Probengeber verwendet werden:

- AS-GF
- MPE 60 oder MPE 60/2

Im Fenster **Methode | Probenzufuhr** spezifizieren Sie folgende Parameter für diese Probengeber:

- Verwendung eines Probengebers
- Spülmodi
- Automatische Verdünnungen während der Analyse

Die Option **Probengeber benutzen** muss bei Verwendung der Graphitrohrtechnik für Lösungsanalytik immer aktiviert sein.



Mit Probengeber automatisch verdünnen

In Verbindung mit dem Probengeber kann eine automatische Probenverdünnung ausgeführt werden. Die individuellen Verdünnungsfaktoren für jede Probe stellen Sie im Fenster **Proben-ID** ein. In der Methode legen Sie den Verdünnungsmodus und Position des Verdünnungsmittels fest.

Außerdem können Sie Parameter für eine automatische Verdünnung bei Konzentrationsüberschreitung spezifizieren. Überschreitet dabei die Konzentration den durch die Kalibrierkurve bestimmten Messbereich um mehr als 10 %, wird die Probe verdünnt. Der maximal erreichbare Verdünnungsfaktor wird durch das minimale exakt zu dosierende Injektionsvolumen von 2 µl begrenzt. Den Grenzwert 10 % können Sie im Fenster **Optionen | Kalibration** ändern.

Eine Verdünnung im Mischgefäß ist nur bei der MPE 60 möglich. Bei den MPE 60/2 und AS-GF erfolgt eine Analytreduzierung direkt im Graphitrohr. Zusätzlich können unbenutzte Probengefäße für die Verdünnung bei Konzentrationsüberschreitung verwendet werden.

Option	Beschreibung
keine	Die Probe wird nicht verdünnt.
im Graphitrohr	Das Probenvolumen wird entsprechend dem Verdünnungsfaktor reduziert und in das Graphitrohr gebracht. Der zum ursprünglichen Probenvolumen fehlende Rest wird durch Verdünnungsflüssigkeit ergänzt.
durch Volumenreduzierung	Das Probenvolumen wird entsprechend dem Verdünnungsfaktor reduziert und in das Graphitrohr gebracht. Der zum ursprünglichen Probenvolumen fehlende Rest wird nicht ergänzt.
im Mischgefäß	Nur MPE 60 Die Verdünnung erfolgt im Mischgefäß. Das Volumen wird immer auf 500 µL aufgefüllt.
in Probengefäßen	Die Verdünnung erfolgt in unbenutzten Probengefäßen, deren Anzahl und Startposition auf dem Teller unter Anz. Mischgefäße ausgewählt wird. Das Auffüllvolumen wird unter Füllst. in Mischpositionen spezifiziert. Die verwendeten Positionen müssen nach Ersetzen der Pro-

Option	Beschreibung
	bengefäße für die weitere Verwendung im Fenster Probengeber Techn. Parameter mit der Option Mischgefäße leeren zurückgesetzt werden.
Position Verdünnungsmittel	Position des Verdünnungsmittels auf dem Probenteller auswählen.

Spülschritte spezifizieren

Während der Abarbeitung einer Mess-Sequenz können Sie Spülschritte zur Reinigung der Probenwege im Zubehör vereinbaren.

Option	Beschreibung
Spülen	<p>aus Spülung ist ausgeschaltet. Es wird nicht automatisch gespült.</p> <p>nach jeder Messung Spülung nach jedem Statistik-Run</p> <p>nach jeder Komponente Nach Überführung jeder Komponente (Modifikator, Standard, Probe, usw.) ins Graphitrohr wird der Probengeber gespült.</p>
Spülzyklen	Anzahl der Spülzyklen pro Spülung, 1 bis 5
Zyklen Mischgefäß	<p>Nur MPE 60</p> <p>Anzahl der Spülzyklen für das Mischgefäß In einem Spülzyklus wird das Mischgefäß mit Spülflüssigkeit oder Verdünnungslösung gefüllt und wieder geleert.</p>

Kontrollierte Reinigung

Wenn Proben analysiert werden, die zu einer Überschreitung des Arbeitsbereichs der Kalibrierkurve um mehr als 10 % führen, kann das Graphitrohr ausgeheizt werden, um Kontaminationen aus der vorangegangenen Messung zu entfernen. Während der Reinigung wird zur Kontrolle des Reinigungsergebnisses die Extinktion gemessen. Die automatische Reinigungskontrolle wird nach der Messung von hochkonzentrierten Proben und bei aktivierten Modus **Verdünnung bei Konz.-Überschreitung** empfohlen.

Option	Beschreibung
Reinigungskontrolle	Wenn aktiviert, erfolgt bei Konzentrationsüberschreitungen automatisch eine kontrollierte Reinigung.
Kontrollgrenze (Ext.)	Auf diesen Wert muss der Signalpegel während der Reinigung zurückgegangen sein, bevor die verdünnten Proben oder Proben mit geringerer Konzentration gemessen werden.

Hinweis: Eine Reinigungskontrolle kann auch in der Sequenz, unabhängig von einer vorliegenden Konzentrationsüberschreitung, vereinbart werden.

Spülung des Probengebers

Nach der Aufnahme der Proben bzw. anderer Flüssigkeiten wird der Dosierschlauch mit der im Vorratsgefäß befindlichen Spülflüssigkeit (deionisiertes Wasser, leicht angesäuert mit 0,1 N HNO₃) automatisch gereinigt. Dabei wird die Spülflüssigkeit von der Vorratsflasche durch den Dosierschlauch gepumpt und in das Spülgefäß des Probengebers abgegeben.

Parameter Eintauchtiefe und Dosiergeschwindigkeit

Die Parameter des Probengebers bezüglich der Eintauchtiefe in die verschiedenen Gefäße und Dosiergeschwindigkeiten werden im Fenster **Probengeber** eingestellt. Das kann hier mit der Schaltfläche **Techn. Parameter** geöffnet werden.

Sehen Sie dazu auch

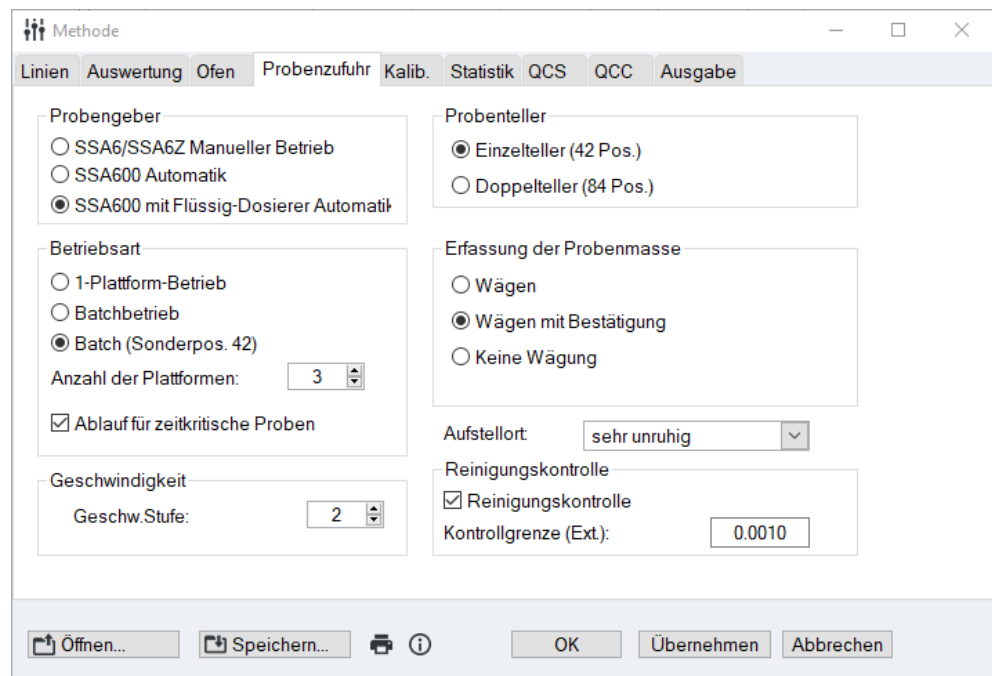
- 📖 Technische Parameter des Probengebers für Graphitofentechnik [▶ 152]
- 📖 Messungen und Aktionen in einer Sequenz spezifizieren [▶ 73]
- 📖 Fenster Proben-ID [▶ 77]
- 📖 Allgemeine Einstellungen für die Kalibration und Blindwertkorrektur [▶ 180]

3.2.6.3 Methodenparameter für Probengeber für Graphitofentechnik (Feststoffanalytik)

Hinweis: Die Analytik von Feststoffen mit Graphitofentechnik kann mit dem novAA 800 und dem ZEE nit 700 Q nicht ausgeführt werden. Die entsprechenden Einstellungen stehen für diese Geräte deshalb nicht zur Verfügung.

Im Fenster **Methode | Probenzufuhr** spezifizieren Sie dafür folgende Parameter:

- Die Verwendung der Feststoffprobengeber SSA 600 oder SSA 6 (z)
- Betriebsart – Analysenablauf
- Probengebermodifikationen



Probengeber

Option	Beschreibung
SSA6/SSA6Z Manueller Betrieb	Manuellen Probengeber SSA 6 (z) verwenden Bei der Verwendung des manuellen Probengebers SSA 6 sind keine weiteren Optionen zur Probenzufuhr spezifizieren. Die Proben müssen separat gewogen und die Probenmassen im Hauptfenster auf der Karte Feststoff eingetragen werden.
SSA600 Automatik	Automatischen Feststoffprobengeber SSA 600 ohne Flüssigdosierung
SSA600 mit Flüssig-Dosierer Automatik	Automatischen Feststoffprobengeber SSA 600 mit integrierter Dosierautomatik für flüssige Komponenten (Standards oder Modifikatoren)

Für den Probengeber SSA 600 spezifizieren Sie in diesem Fenster den Ablauf der Probenzufuhr näher.

Option	Beschreibung
Betriebsart	<p>1-Plattform-Betrieb Die Analyse wird nur mit einer einzigen Plattform ausgeführt, die immer wieder neu bestückt wird. Die Plattform liegt auf der Tellerposition 1. Während des Analysenablaufes werden alle notwendigen Schritte (Tariieren, Dosieren, Wägen, Flüssig-Dosierung) mit dieser Plattform durchgeführt.</p> <p>Batchbetrieb Während der Analyse wird mit mehreren Plattformen gearbeitet. Je nach Einstellung kann die Analyse automatisiert werden.</p> <p>Batch (Sonderpos. 42) Während der Analyse wird mit mehreren Plattformen gearbeitet. Je nach Einstellung kann die Analyse automatisiert werden. Für Proben, die keiner Wägung bedürfen z.B. Kal.-Null oder flüssige Standards, wird die Position 42 auf dem Probenteller verwendet. Zu diesem Zweck muss dort eine leere Plattform liegen, auf die bei Bedarf die Proben pipettiert werden.</p> <p>Anzahl der Plattformen Für Batchbetrieb und Batch (Sonderpos. 42) Anzahl verwendeter Plattformen und damit verfügbarer Anzahl Probenpositionen</p>
Ablauf für zeitkritische Proben	<p>Verhalten des Probengebers bei der Vorbereitung der Proben und bei der Dosierung</p> <p>Wenn aktiviert, werden die Plattformen erst direkt vor der Messung mit Proben bestückt. Dadurch wird verhindert, dass Proben sich bei längeren Standzeiten auf dem Probenteller verflüchtigen oder durch hohe Adhäsion über die Plattform "kriechen", wie es zum Beispiel bei Ölen der Fall ist. Dieser Modus erfordert die ständige Anwesenheit des Anwenders.</p> <p>Wenn deaktiviert, werden alle verfügbaren Plattformen vor dem Messstart vorbereitet. Alle Handlungen, die die Anwesenheit des Nutzers erfordern (Probenaufgabe oder manuelles Pipettieren von Modifikatoren), werden dabei gebündelt ausgeführt. Das AAS-Gerät kann in diesem Modus ohne die ständige Anwesenheit des Anwenders die Proben abarbeiten.</p>
Geschwindigkeit	<p>Die Geschwindigkeit der Bewegungen des SSA600 kann in 3 Stufen eingestellt werden. Empfohlene Stufe: 2</p>
Probenteller	Anzahl aufeinandergelegter Teller
Erfassung der Probenmasse	<p>Wägen Nach der Wägung des dosierten Feststoffs, wird die Einwaage übernommen ohne eine Rückfrage, ob das Gewicht akzeptiert wird.</p> <p>Wägen mit Bestätigung Nach jeder Feststoff-Wägung wird das Wägeergebnis angezeigt. Der Anwender kann mit Betätigung der grünen Taste (Taste am Probengeber oder OK im Wägefenster auf dem Bildschirm) signalisieren, dass er mit der Einwaage zufrieden ist. Mit Betätigen der orangefarbenen Taste (Taste am Probengeber oder Wiederholen im Wägefenster auf dem Bildschirm) wird die Plattform zur Dosierposition zurück gebracht, die Dosierung verändert und anschließend erneut gewogen.</p> <p>Keine Wägung Proben werden nicht gewogen. Es ist deshalb keine Konzentrationsanalyse Messungen möglich. Das Ergebnis kann nur qualitativ ausgewertet werden.</p>

Option	Beschreibung
Aufstellort	Je nach Störfaktoren (insbesondere Erschütterungen) die Präzision der eingebauten Mikrowaage einstellen. Scheint die Wägezeit zu lange, kann durch eine andere Einstellung des Aufstellortes diese zu Ungunsten der Präzision verkürzt werden. Die Einstellung kann in 4 Abstufungen von sehr unruhig bis sehr ruhig vorgenommen werden.
Reinigungskontrolle	Wenn aktiviert, erfolgt bei Konzentrationsüberschreitung automatisch eine kontrollierte Reinigung. Werden Proben analysiert, die zu einer Überschreitung des Arbeitsbereichs der Kalibrierkurve um mehr als 10 % führen, wird das Graphitrohr und die Probenplattform ausgeheizt, um Kontaminationen aus der vorangegangenen Messung zu entfernen. Während der Reinigung wird die Extinktion gemessen. Ist die Kontrollgrenze erreicht, wird die Reinigung beendet. Hinweis: Eine Reinigungskontrolle kann auch in der Sequenz, unabhängig von einer vorliegenden Konzentrationsüberschreitung, vereinbart werden.
Kontrollgrenze (Ext.)	Extinktionswert, auf den der Signalpegel während der Reinigung zurückgegangen sein muss, bevor die nächste Probe gemessen wird.

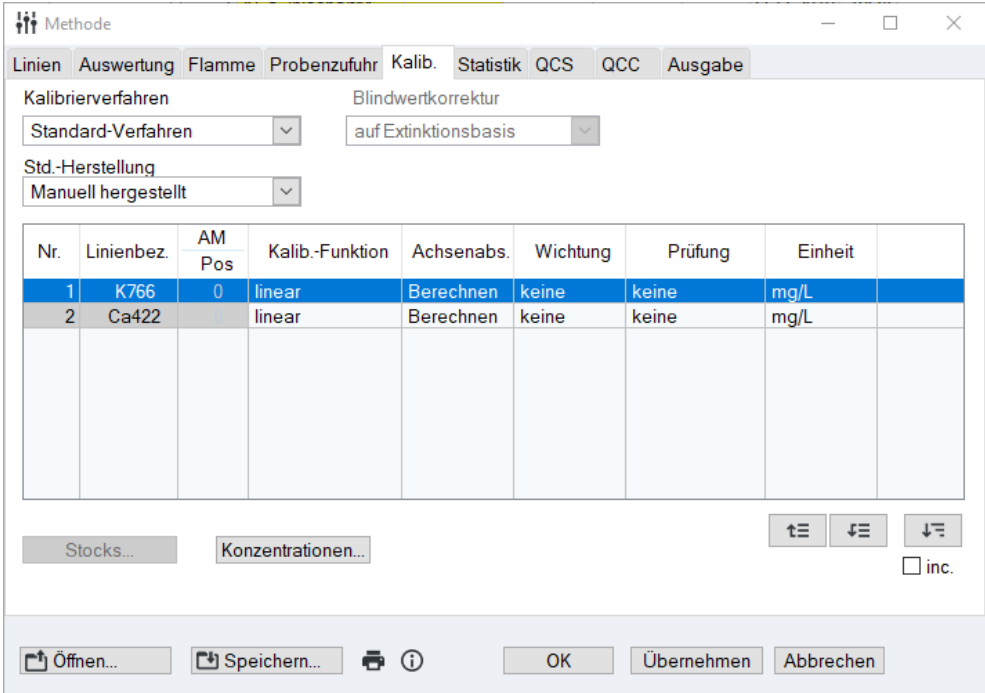
Sehen Sie dazu auch

 Feststoffanalytik mit Graphitofentechnik [▶ 95]

3.2.7 Kalibrierparameter spezifizieren (Fenster Methode | Kalib.)

Im Fenster **Methode | Kalib.** definieren Sie die Art der Kalibrierung und geben die Konzentrationstabelle der Standards ein. Sie können für die Kalibrierung Mehrelementstandards verwenden, die Sie als Stock spezifizieren.


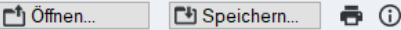



Für eine Kalibration können maximal 65 Standards verwendet werden.



The screenshot shows the 'Methode | Kalib.' window with the following settings:

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

Nr.	Linienbez.	AM Pos	Kalib.-Funktion	Achsenabs.	Wichtung	Prüfung	Einheit
1	K766	0	linear	Berechnen	keine	keine	mg/L
2	Ca422		linear	Berechnen	keine	keine	mg/L

Buttons at the bottom: Stocks..., Konzentrationen..., , inc.,  Öffnen...,  Speichern...,   OK Übernehmen Abbrechen

Kalibrierverfahren

Option	Beschreibung
Keine Kalibrierung	Die Probenergebnisse werden ausschließlich als Extinktion bzw. Emission ausgegeben. Eine Kalibration ist für diese Messungen nicht erforderlich. Auf der Karte Kalib. sind keine weiteren Einträge erforderlich. Die Sequenzliste sollte sinnvollerweise nur aus Proben bestehen.
Standard-Verfahren	Die Kalibration erfolgt mit Proben bekannter Konzentration. Die Proben unbekannter Konzentration werden gegen diese Kalibration gemessen.
Standard-Additions-Verfahren	Die unbekannte Probe wird mit unterschiedlichen Mengen einer bekannten Probe aufgestockt und gemessen. Als Ergebnis einer Ausgleichung ergibt sich die Konzentration der unbekannt Probe. Das Standard-Additionsverfahren steht nicht bei der Feststoffanalytik im Graphitrohr zur Verfügung.
Additions-Kalibrieren	Die Kalibrierkurve, mit deren Hilfe weitere Konzentrationen bestimmt werden können, wird durch Standard-Addition erzeugt. Gleichzeitig wird damit die Konzentration der ersten Probe ermittelt. Variable Einwaagen/Add. Für Feststoffanalytik / Additionskalibration Legt die Anzahl der unterschiedlichen Feststoffeinwaagen je Additionsreihe festlegen.

Herstellung der Standards

Option	Beschreibung
Manuell hergestellt vom Probengeber gemischt	Die Bezugslösungen sind bereits vorhanden. Nur für Probengeber AS 52s oder AS-FD Die Bezugslösungen werden im Mischgefäß des Probengebers durch Mischung unterschiedlicher Anteile Stock- und Verdünnungslösung hergestellt. In diesem Fall stellen Sie in der Linientabelle die Volumina für die Herstellung der Bezugslösungen ein: Mix.Vol. Gesamtfüllvolumen im Mischgefäß (Wertebereich: 1 ... 20 mL) dav.Probe Nur bei Additionsverfahren: Anteiliges Probenvolumen (Schrittweite 0,5 mL). Bei Additionsverfahren ist der Anteil Probenlösung einer Messserie immer gleich. Der Anteil Probenlösung muss kleiner sein als das Gesamtfüllvolumen. Das Differenzvolumen wird mit Stock- und Verdünnungslösung aufgefüllt. Das Verhältnis Probenmenge/Gesamtmenge ist der Korrekturfaktor für die zu berechnende Konzentration.
durch Volumenabstufung	Nur Graphitofentechnik Es werden unterschiedliche Volumina der Stammlösung bzw. Mengen der Referenzprobe zur Atomisierung gebracht und so eine Konzentrationsabstufung (bezogen auf das Probenvolumen/-gewicht) erreicht.
durch Verdünnen	Nur Graphitofentechnik Es werden definierte Volumina der Stammlösung und das zum Probenvolumen fehlende Volumen Verdünnungslösung in einem Überführungsschritt ins Graphitrohr gebracht und so eine Konzentrationsabstufung (bezogen auf das Probenvolumen) erreicht. In diesem Fall stellen Sie in der Linientabelle die Volumina für die Herstellung der Bezugslösungen ein:

Option	Beschreibung
	<p>Vol. Gesamtvolumen, welches in das Graphitrohr pipettiert wird (1 ... 50 µL).</p> <p>Max. Add.-Vol. Nur bei Additionsverfahren Maximal hinzuzufügen Menge Stocklösung Wenn die Additionslösungen durch Verdünnung hergestellt werden, ist dies das Summenvolumen aus dem Additionsvolumen und dem Verdünnungsmittel-Volumen.</p>

Blindwertkorrektur

Nur bei **Standard-Additions-Verfahren** und **Additions-Kalibrieren**

Option	Beschreibung
auf Extinktionsbasis	Bei jeder Standardaddition wird der Blindwert gemessen und der ermittelte Extinktionswert vor der Berechnung der Ausgleichsgeraden von allen Messwerten subtrahiert. Dieses Verfahren war lange Zeit üblich, kann aber bei Realproben zu fehlerhaften Ergebnissen führen.
auf Konzentrationsbasis	Mit der Blindwertlösung wird zunächst eine eigene Standardaddition mit den gleichen Konzentrationszugaben wie bei der Probe durchgeführt. Die ermittelte Konzentration wird automatisch von allen anderen durch Standardaddition bestimmten Konzentrationen subtrahiert.

Linien-spezifische Kalibrierparameter

Die linienspezifischen Kalibrierparameter werden in der Tabelle eingestellt:

Tabellenspalte	Beschreibung
Nr.	Reihenfolge der ausgewählten Linie in der Tabelle
Linienbez.	Bezeichnung der Analyselinie
Volumina	In Abhängigkeit von Atomisierungstechnik und Kalibrierverfahren müssen verschiedenen Volumina eingestellt werden (siehe oben "Herstellung der Standards")
Kalib.-Funktion	<p>Nur für Kalibrierung nach Standardverfahren</p> <p>linear Linearer Verlauf der Kalibrierfunktion $y = a + bx$</p> <p>nichtlinear ratio. Nichtlinearer Verlauf der Kalibrierfunktion beschrieben durch eine gebrochenrationale Funktion $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$</p> <p>nichtlinear quadr. Nichtlinearer Verlauf der Kalibrierfunktion beschrieben durch eine quadratische Funktion $y = a + bx + cx^2$</p> <p>automatisch Für die Kalibration werden jeweils eine lineare und eine nichtlineare Funktion berechnet. Die Summen der quadrierten Residuen werden verglichen (Mandel-Test). Ist die Summe für die nichtlineare Funktion signifikant geringer als jene für die lineare Funktion, wird der nichtlineare Verlauf der Kalibrierkurve gewählt, anderenfalls wird der lineare Verlauf der Kalibrierkurve gewählt. Die nichtlineare Funktion wird im Fenster Optionen Kalibration gewählt. Als Standardeinstellung ist hier die gebrochen rationale Funktion vorgesehen.</p>

Tabellenspalte	Beschreibung
	<p>Hinweis: Für das Standardadditionsverfahren und die Additionskalibrierung sind nur lineare Kurvenverläufe zugelassen.</p>
Achsenabs.	<p>Null setzen Kalibrierkurve exakt durch den gemessenen Nullwert-Punkt legen</p> <p>Berechnen Den Nullwert wie jeder andere Kalibrierpunkt in die Berechnung einbeziehen</p>
Wichtung	<p>keine Alle Kalibrierpunkte gleich berücksichtigen</p> <p>1/Konz Kalibrierpunkte mit kleineren Konzentrationen stärker berücksichtigen</p> <p>1/SD Punkte mit geringeren Abweichungen innerhalb der mehrfach wiederholten Messungen eines Standards stärker berücksichtigen (Voraussetzung: Mittelwert-Statistik aktiviert)</p> <p>1/(SD*Konz) Kombination aus den Berechnungsverfahren 1/Konz und 1/SD</p>
Prüfung	<p>Die Software ermöglicht eine automatische Überprüfung von ermittelten Kalibrierkurven anhand eines Prognosebandes, das auf der Basis einer manuell gewählten statistischen Sicherheit berechnet wird.</p> <p>keine Alle gemessenen und nicht gelöschten Kalibrierpunkte zur Kurvenberechnung nutzen. Kalibrierpunkte werden weder gekennzeichnet noch eliminiert.</p> <p>Ausreißer elim. Wenn Kalibrierpunkte außerhalb des berechneten Prognosebandes liegen, wird eine Ausreißereliminierung mittels F-Test durchgeführt (Prüfung, ob die Nichtberücksichtigung eines Punktes zu einer signifikanten Verbesserung der Reststreuung führt):</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ Mit dem Kalibrierpunkt, der am weitesten außerhalb des Prognosebandes liegt, wird ein F-Test durchgeführt. Sofern die Nichtberücksichtigung dieses Punktes zu keiner signifikanten Verbesserung der Reststreuung führt, wird der Punkt berücksichtigt und die Kalibrierkurve nicht weiter optimiert. ■ Führt die Nichtberücksichtigung zu einer signifikanten Verbesserung, wird der Kalibrierpunkt zum Ausreißer erklärt (in der Tabelle mit "!", in der Grafik rot gekennzeichnet) und die Kalibrierkurve ohne diesen Punkt neu berechnet. ■ Für den nunmehr am stärksten vom Prognoseband abweichenden Punkt wird erneut ein F-Test durchgeführt – das Verfahren wird so lang wiederholt, bis alle Ausreißer entfernt sind. ■ Alle außerhalb des neuen Prognosebandes liegenden Kalibrierpunkte, die nicht als Ausreißer eliminiert wurden, werden in der Tabelle mit einem "?" und in der Grafik braun gekennzeichnet.
Einheit	Einheit der Konzentration jedes Element

Sehen Sie dazu auch

📖 Allgemeine Einstellungen für die Kalibration und Blindwertkorrektur [▶ 180](#)

3.2.7.1 Stockstandards spezifizieren

Wenn Sie die Standardkonzentrationen mit einem Probengeber automatisch herstellen, müssen Sie Stock-Standards spezifizieren, aus denen dann die einzelnen Standards durch Verdünnung erzeugt werden. Dafür müssen Sie die Stock-Standards vor Ausfüllen der Kalibriertabelle spezifizieren, wobei Sie mehrere Stock-Standards mit verschiedenen Elementen und Konzentrationen verwenden können. Wenn Sie Stock-Standards öfter verwenden, können Sie diese in der Datenbank im Fenster **Daten | Stock-Standard einfügen | Stock-Std/QC-Proben** verwalten.

- ▶ Im Fenster **Methode | Kalib.** auf **Stocks** klicken.
Die Liste der Stockstandards erscheint. Es können für eine Analyse maximal 20 Standards definiert werden.
- ▶ Mit Klick auf **Anhängen** oder auf **Einfügen** eine neue Zeile in die Stock-Liste einfügen.
Das Fenster **Stock-Standard einfügen** mit zwei Optionen erscheint:
 - Option **Aus Stock-Datenbank** wählen, wenn vorhandene Standards aus der Datenbank verwendet werden. Stock-Standards in der Liste markieren.
 - Option **manuell** wählen, wenn die Stock-Standards manuell eingegeben werden sollen.
- ▶ Die Auswahl mit Klick auf **OK** bestätigen.
- ▶ Im Fenster **Stock-Standard** in der Spalte **Pos** die Position des Standards auf dem Probengeber eingeben und in der Spalte **Einheit** die Einheit wählen.
- ▶ Bei manueller Eingabe im Fenster **Stock-Standard** auf **Konzentrationen** klicken und im Fenster **Konzentrationseingabe** zu jedem Element die Konzentration eingeben.
- ▶ Die Eingaben mit Klick auf **Schließen** beenden.

Sehen Sie dazu auch

 Datenbanken für Stocks und QC-Proben verwalten [▶ 170]

3.2.7.2 Eingabe der Konzentrationen bei manueller Standard-Herstellung

Im Fenster **Kalibriertabelle** spezifizieren Sie die Kalibrierstandards mit ihren Elementkonzentrationen.

Kalibriertabelle für Standardverfahren mit manuell hergestellten Standards

Kalibriertabelle

Kalib.-Null-Std.: Kalib.-Standards:

	Typ	Pos	Rec	K [mg/L]	Ca [mg/L]
1	Kal.-Null1	10	REC	0	0
	Kal.-Std.1	50	-	2.5	
	Kal.-Std.2	51	-	5	
	Kal.-Std.3	52	-	7.5	
	Kal.-Std.4	53	-	10	
	Kal.-Std.5	54	REC	12.5	
	Kal.-Std.6	41	-		0.5
	Kal.-Std.7	42	-		1
	Kal.-Std.8	43	-		2
	Kal.-Std.9	44	-		3
	Kal.-Std.10	45	REC		4

inc.

Standardtypen

Für die verschiedenen Kalibrierverfahren müssen folgende Standardtypen definiert werden:

Kalibrierverfahren	Standardtypen
Standard-Verfahren	Kalib.-Null-Std.: Kalibrierstandards ohne Analyten Es können mehrere Kalibrier-Null-Standards eingegeben werden, z. B. wenn in die zu untersuchenden Elemente in verschiedenen Lösungsmitteln vorliegen. In diesem Fall ist die Konzentration bei den betreffenden Elementlinien "0" zu setzen, die anderen Spalten bleiben leer. Kalib.-Standards: Kalibrierstandards
Standard-Additions-Verfahren	Kalib.-Standards: Kalibrierstandards Add.-Standards: Additionsstandards
Additions-Kalibrieren	Add.-Standards: Additionsstandards

Standardtabelle

Spalte	Beschreibung
Typ	Standardtyp Entsprechend der gewählten Anzahl werden die Standards durchnummeriert.
Pos	Bei Verwendung des Probengebers Position des Standards auf dem Probensteller des Probengebers eingeben.
REC	Nur bei Standardverfahren Den betreffenden Standard als Rekalibrierstandard definieren.
Elemente	Konzentration der einzelnen Elemente im Standard

Kalibriertabelle ausfüllen

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Methode | Kalib.** auf **Konzentrationen**.
 - ✓ Das Fenster **Kalibriertabelle** erscheint.
- ▶ Wählen Sie die Anzahl Standards über der Tabelle.

- ▶ Geben Sie für jeden Standard die Konzentration der Elemente in der Tabelle ein.
- ▶ Optional können Sie die Position im Probengeber in der Tabelle eingeben. Diese Einstellung wird als Voreinstellung in die Sequenz übernommen und kann dort geändert werden.
- ▶ Bestätigen Sie die Einstellungen mit Klick auf **OK**.

3.2.7.3 Eingabe der Konzentrationen bei automatischer Herstellung der Kalibrierstandards

Die automatische Herstellung der Kalibrierstandards erfolgt bei der Flammentechnik durch Mischung mit dem Probengeber. Bei der Graphitrohrtechnik wird eine Kalibrierreihe durch Volumenabstufung oder Verdünnung im Graphitrohr realisiert.

Bei der automatischen Herstellung der Kalibrierstandards werden Stockstandards benötigt.

Kalibriertabelle für Standardverfahren mit automatisch hergestellten Standards

Kalibriertabelle

Kalib.-Null-Std.: Kalib.-Standards: Position Verdünnungsmittel:

	Typ	Pos	Herstellung		Rec	Mg1	Mg2
			Vol.	Stock		[µg/L]	[µg/L]
1	Kal.-Null1	75	0	0	-	0	0
	Kal.-Std.1	38	4	1	-	0.4	0.4
	Kal.-Std.2	38	8	1	-	0.8	0.8
	Kal.-Std.3	38	12	1	-	1.2	1.2
	Kal.-Std.4	38	16	1	-	1.6	1.6
	Kal.-Std.5	38	20	1	-	2	2

Deaktivieren von Standards mit Strg+Mausklick oder Leertaste

inc.

Standardtypen

Für die verschiedenen Kalibrierverfahren müssen folgende Standardtypen definiert werden:

Kalibrierverfahren	Standardtypen
Standard-Verfahren	<p>Kalib.-Null-Std.: Kalibrierstandards ohne Analyten Es können mehrere Kalibrier-Null-Standards eingegeben werden, z. B. wenn in die zu untersuchenden Elemente in verschiedenen Lösungsmitteln vorliegen. In diesem Fall ist die Konzentration bei den betreffenden Elementlinien "0" zu setzen, die anderen Spalten bleiben leer.</p> <p>Kalib.-Standards: Kalibrierstandards</p>
Standard-Additions-Verfahren	<p>Kalib.-Standards: Kalibrierstandards</p> <p>Add.-Standards: Additionsstandards</p>
Additions-Kalibrieren	<p>Add.-Standards: Additionsstandards</p>

Standardtabelle

Tabellenspalte	Beschreibung
Typ	Standardtyp Entsprechend der gewählten Anzahl werden die Standards durchnummeriert.
Pos	Position des Stock-Standards oder Nullwerte auf dem Probensteller
Herstellung	%: Für Flammentechnik Volumenprozent des Stockanteils in der Lösung Vol.: Für Flammentechnik Volumen des Stockanteils in μL . Der Wert errechnet sich aus dem eingegebenen %-Wert und dem in der Linientabelle des Fensters Methode Kalib. definierten Mix.Vol. Vol.: Für Graphitofentechnik Dieses Volumen wird in den Graphitofen injiziert. Stock Nummer des Stock-Standards in der Stocktabelle
REC	Nur bei Standardverfahren Standard als Rekalibrierstandard definieren
Element	Berechnete Konzentration der einzelnen Elemente im Standard

Kalibriertabelle ausfüllen

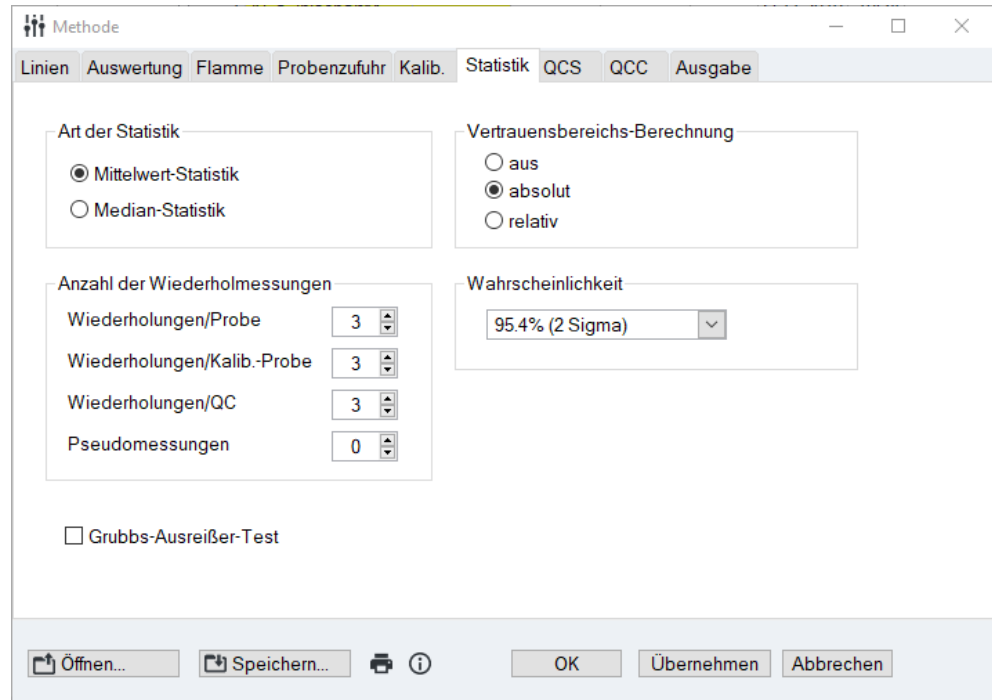
- ▶ Klicken Sie im Fenster **Methode | Kalib.** auf **Konzentrationen**.
 - ✓ Das Fenster **Kalibriertabelle** erscheint.
- ▶ Stellen Sie, in Abhängigkeit des gewählten Kalibrierverfahrens, die Anzahl Standards in den Listenfeldern über der Tabelle ein.
Maximale Anzahl Standards: 65.
- ▶ Für Flammentechnik: Geben Sie für jeden Standard das Volumenprozent in der Tabelle ein.
- ▶ Für Graphitofentechnik: Geben Sie für jeden Standard das Volumen ein, das in den Graphitofen injiziert wird.
- ▶ Geben Sie für jeden Standard die Nummer des Stockstandards ein.
- ▶ Wenn Linien in einem Standard nicht für die Kalibrierung verwendet werden sollen, deaktivieren Sie diese:
Klicken Sie auf das Linienfeld und drücken Sie die Leer-Taste. Zum erneuten Aktivieren wiederholen Sie den Vorgang.
- ▶ Bestätigen Sie die Einstellungen mit Klick auf **OK**.

Sehen Sie dazu auch

 Stockstandards spezifizieren [▶ 58]

3.2.8 Statistikparameter spezifizieren (Fenster Methode | Statistik)

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



Art der Statistik

Option	Beschreibung
Mittelwert-Statistik	Mittelwert und Standardabweichung berechnen Fehlerstatistik nach dem arithmetischen Mittel: Die Probe wird nach den Leerzyklen mehrfach gemessen. Aus den Messergebnissen werden das arithmetische Mittel sowie die Standardabweichung und die relative Standardabweichung berechnet.
Median-Statistik	Median und Spannweite (R) berechnen Fehlerstatistik nach dem Medianverfahren: Die Probe wird nach den Pseudomessungen mehrfach gemessen, die Messwerte werden nach Größe sortiert. Der angezeigte Medianwert ist dann: <ul style="list-style-type: none"> Bei ungerader Anzahl von Messzyklen der Wert in der Mitte der sortierten Liste Bei gerader Anzahl von Messzyklen der Mittelwert aus den beiden Messwerten in der Mitte der sortierten Liste. Da die kleinsten und größten Einzelmesswerte keinen Einfluss auf das Messergebnis haben, ist die Medianstatistik für die Eliminierung von Ausreißerwerten geeignet.

Anzahl der Wiederholmessungen

Option	Beschreibung
Wiederholungen/Probe	Anzahl Messwiederholungen je Probe
Wiederholungen/Kalib.-Probe	Anzahl Messwiederholungen je Kalibrierprobe
Wiederholungen/QC	Anzahl Messwiederholungen je QC-Messung
Pseudomessungen	Diese Anzahl der Messungen mit Probe (Leerzyklen) wird vor der Statistikserie eingeschoben, um z. B. die Flamme zu stabilisieren. Die Werte werden nicht für die Berechnung des Ergebnisses herangezogen.

Option	Beschreibung
	Die Funktion ist nicht für Feststoffanalyse mit Graphitofentechnik verfügbar.

Grubbs-Ausreißer-Test

Für Mittelwert-Statistik mit mindestens 3 Messwiederholungen je Probe

Option	Beschreibung
deaktiviert	Alle Werte der Statistikserie werden zur Ermittlung des Mittelwerts herangezogen.
aktiviert	Ausreißer werden eliminiert und nicht zur Berechnung der Statistikgrößen herangezogen. Die so ermittelten Mittelwerte in der Ausgabetablelle mit "!" markiert.

Vertrauensbereichs-Berechnung

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

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

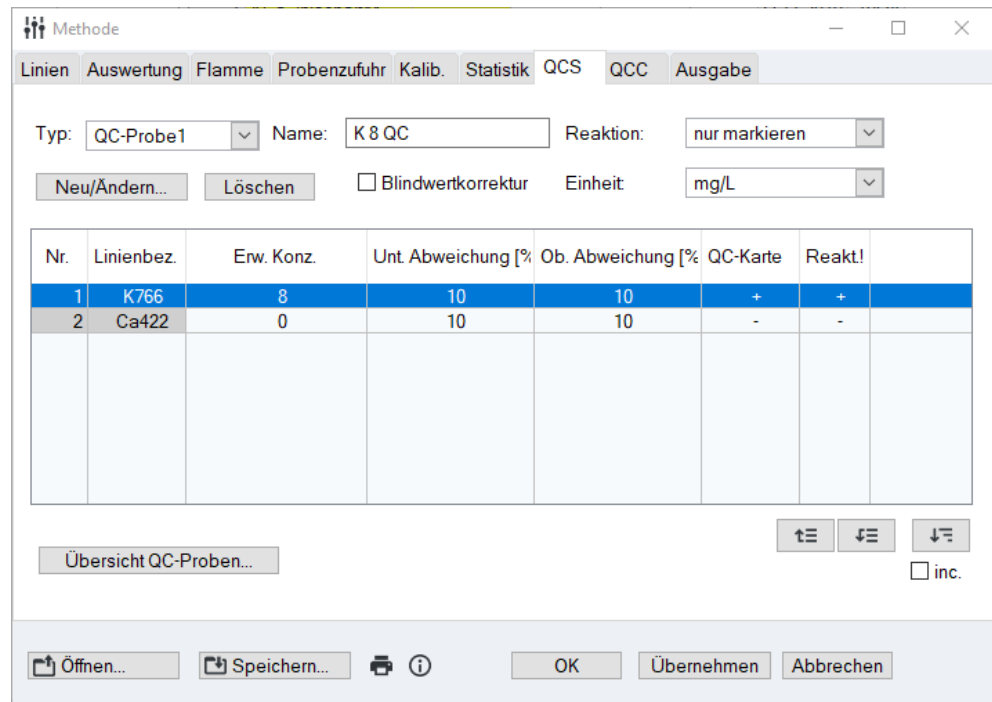
Wahrscheinlichkeit

Die Wahrscheinlichkeit ist wählbar zwischen 68,3 ... 99,9 %. Sie wird zur Berechnung des Vertrauensbereichs der Proben und der Prognosebänder der Kalibrierkurven herangezogen.

3.2.9 Qualitätskontrollproben spezifizieren (Fenster Methode | QCS)

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

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



Elemente im Fenster Methode | QCS

Option	Beschreibung
Typ	Diese QC-Probe wird in der Linientabelle angezeigt. Die Parameter der QC-Probe können hier editiert werden.
Name	Name der angezeigten QC-Probe
Reaktion	So wird verfahren, wenn die Ergebnisse der QC-Probe die vereinbarten Grenzen überschreiten oder unterschreiten
Neu/Ändern	Neue QC-Probe definieren oder eine bereits vorhandene QC-Probe ändern
Löschen	Ausgewählte QC-Probe löschen
Einheit	Konzentrationseinheit der QC-Probe
Übersicht QC-Proben	Übersicht mit den linienspezifischen Parametern der QC-Proben öffnen
Linientabelle	In der Tabelle werden die Parameter der im Listenfeld Typ ausgewählten QC-Probe angezeigt.

Typen der QC-Proben

Folgende Typen der QC-Proben können Sie spezifizieren:

Option	Beschreibung
QC-Probe	<p>Eine Probe als QC-Probe definieren</p> <p>Die Konzentrationen der QC-Probe können Sie entweder aus der Datenbank laden oder direkt eingeben.</p> <p>aus Datenbank Im danebenstehenden Listenfeld die betreffende QC-Probe auswählen. Die Datenbank der QC-Proben verwalten Sie im Fenster Daten Stock-Std/QC-Proben.</p> <p>manuell eintragen Konzentrationen der QC-Probe direkt in die Linientabelle eintragen Max. Anzahl QC-Proben: 50</p>
QC-Std.	<p>Ein Standard als QC-Probe definieren</p> <p>Als QC-Standard kann jeder in der Kalibriertabelle definierte Standard verwendet werden.</p>

Option	Beschreibung
	Mögliche Anzahl QC-Standards = Anzahl Standards in der Kalibriertabelle (max. 65)
QC-Blindwert	Die Blindprobe als QC-Probe definieren
QC-Stock	Eine aufgestockte Probe als QC-Probe definieren Bei Wiederfinden/Aufstocken werden die Messergebnisse einer definierten Konzentrationszugabe zu einer oder mehreren Proben kontrolliert. Dazu ist nach einer beliebigen Probe in der Probentabelle eine QC-Stock-Probe zu definieren (QC-Stock-Probe = Probe + Aufstockung mit einer Lösung bekannter Konzentration). Nach der Messung von Probe und QC-Stock wird die Konzentrationsdifferenz beider mit dem hier spezifizierten erwarteten Konzentrationszuwachs (Erw. Konz.-Zuwachs) verglichen und die Wiederfindungsrate berechnet. Bei Flammentchnik muss die aufgestockte Lösung bereits vorge-mischt sein.

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

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

Verfahrensweise bei Überschreiten der Fehlergrenze

Für die QC-Probentypen können Sie verschiedene Verfahrensweisen als Reaktion bei Überschreitung der Fehlergrenzen auswählen:

QC-Probentyp	Verfahrensweise
QC-Probe	nur markieren
QC-Std.	Der gemessene Wert wird in der Probentabelle gekennzeichnet, das Messprogramm fährt mit der nächsten Probe fort.
QC-Stock	rekalib. + fortsetzen Es erfolgt eine Rekalibration. Anschließend wird die QC-Probe neu gemessen. Liegt die QC-Probe nun im Bereich, wird die Messung mit der nächsten Probe fortgesetzt, anderenfalls das Messprogramm unterbrochen. kalib. + fortsetzen Es erfolgt eine neue Kalibration. Anschließend wird die QC-Probe neu gemessen. Liegt die QC-Probe nun im Bereich, wird die Messung mit der nächsten Probe fortgesetzt, anderenfalls das Messprogramm unterbrochen. rekalib. + neu messen Es erfolgt eine Rekalibration. Anschließend wird die QC-Probe neu gemessen. Liegt die QC-Probe außerhalb des Bereichs, wird das Messprogramm unterbrochen. Liegt sie im Bereich, werden alle Proben nach der letzten QC-Probe bzw. der letzten (Re-) Kalibration neu gemessen. Liegt die QC-Probe dann erneut außerhalb der Fehlergrenze, wird das Messprogramm unterbrochen.

QC-Probentyp	Verfahrensweise
	<p>kalib. + neu messen Es erfolgt eine neue Kalibration. Anschließend wird die QC-Probe neu gemessen. Liegt die QC-Probe außerhalb des Bereichs, wird das Messprogramm unterbrochen. Liegt sie im Bereich, werden alle Proben nach der letzten QC-Probe bzw. der letzten (Re-) Kalibration neu gemessen. Liegt die QC-Probe dann erneut außerhalb der Fehlergrenze, wird das Messprogramm unterbrochen.</p> <p>Nächste Linie Das aktuelle Messprogramm wird abgebrochen und das Messprogramm der nächsten Elementlinie in der Methode gestartet. Diese Option ist nur wählbar, wenn mehr als eine Elementlinie in der Methode spezifiziert wurde.</p> <p>Stopp Das aktuelle Messprogramm wird abgebrochen.</p>
QC-Blindwert	<p>nur markieren Nächstes Element Stopp</p>
QC-Trend	Keine Reaktion
QC-Matrix	

Linienspezifische Parameter der QC-Probentypen

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

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

Parameter für QC-Proben eingeben

- ▶ Im Fenster **Methode | QCS** auf **Neu/Ändern** klicken und damit einen neuen Parametersatz für eine QC-Probe anlegen oder den markierten Parametersatz editieren. Das Fenster **QC Probentyp hinzufügen/ändern** erscheint.
- ▶ In der Liste **Typ** den QC-Probentyp auswählen.

- ▶ Nur **QC-Proben**: Wenn mehrere **QC-Proben** definiert werden, im danebenstehenden Listenfeld eine fortlaufende Nummer definieren.
- ▶ Nur **QC-Std.**: Im Listenfeld die Nummer des Standards entsprechend der Reihenfolge in der Kalibriertabelle wählen.
- ▶ Die linienspezifischen Parameter in der Tabelle eintragen.
 - ✓ Weitere QC-Proben auf die gleiche Weise definieren.

3.2.10 Qualitätskontrolle spezifizieren (Fenster Methode | QCC)

Im Fenster **Methode | QCC** spezifizieren Sie folgende Parameter für die Qualitätskontrolle während eines Sequenzablaufs (Messungen):

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

Sie können verschiedene Kontrollen mit verschiedenen Reaktionen gleichzeitig wählen.

Arten der Qualitätskontrolle

Option	Beschreibung
RSD/RR%-Kontrolle	Kontrolle der relativen Standardabweichung bzw. relativen Spannweite
Kalib.-Kontrolle	Kontrolle der Kalibration
Rekal.-Kontrolle	Kontrolle des Rekalibrierfaktors

Reaktionen bei der Überschreitung von Fehlergrenzen

Option	Beschreibung
keine	Betreffende Kontrolle nicht vornehmen
nur markieren	Bei Überschreiten der Fehlergrenzen die betreffende Probe, Kalibration oder Rekalibration in der Proben-tabelle markieren
wiederh. + fortsetzen	Nur bei RSD/RR%-Kontrolle

Option	Beschreibung
	Bei Überschreitung der seriellen Präzisionsgrenze die Messung der betreffenden Probe wiederholen, bevor die nächste Probe vermessen wird
kalib.+fort.	Nur bei Kalib.-Kontrolle und Rekal.-Kontrolle Bei Überschreitung der Fehlergrenzen für die Kalibration bzw. des Rekalibrierfaktors eine neue Kalibration vornehmen und anschließend die Messung mit der nächsten Probe fortsetzen
Nächstes Element	Nur bei Kalib.-Kontrolle und Rekal.-Kontrolle Bei Überschreitung der Fehlergrenzen wird das aktuelle Messprogramm abgebrochen und das Messprogramm der nächsten Elementlinie in der Methode gestartet. Diese Option ist nur wählbar, wenn mehr als eine Elementlinie in der Methode spezifiziert wurde.
Stopp	Nur bei Kalib.-Kontrolle und Rekal.-Kontrolle Bei Überschreitung der Fehlergrenzen die Messung der aktuell laufenden Methode beenden

Kontrolle des Graphitrohrs

Nur bei Graphitofentechnik

Wenn ein Graphitrohr zu lange verwendet wird, sinkt die analytische Qualität. Sie können die Nutzungsdauer des Graphitrohr überwachen und werden darauf aufmerksam gemacht, wenn eine Anzahl Heizzyklen überschritten wird.

Option	Beschreibung
Max. Heizzyklen	Max. Anzahl der Messungen mit dem Rohr eingeben. Der aktuelle Wert der Heizzyklen wird im Feld daneben ausgegeben.
Reaktion	Reaktion bei Erreichen der maximalen Anzahl Messungen auswählen: keine Reakt. Die Graphitrohrnutzung wird nicht überwacht. nur markieren Bei Überschreiten des Grenzwertes, die Messung in der Probenabelle markieren. Stopp Bei Überschreiten des Grenzwertes den Analysenablauf stoppen.

Linienspezifische Parameter der Qualitätskontrollen

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

Qualitätskontrolle	Parameter	Bedeutung
RSD/RR%-Kontrolle	RSD/RR% <	Bei relativen Standardabweichungen bzw. Spannweiten größer oder gleich dem eingegebenen Wert wird mit der vereinbarten Verfahrensweise reagiert. RSD ! Bei mit "+" markierten Linien wird RSD% bzw, RR% kontrolliert.
Kalib.-Kontrolle	R²(adj.) >	Das Bestimmtheitsmaß der Regression R ² (adj.) muss größer oder gleich dem eingegebenen Wert sein. Im anderen Fall wird mit der vereinbarten Verfahrensweise reagiert. R² ! Bei mit "+" markierten Linien wird R ² (adjust) kontrolliert.

Qualitätskontrolle	Parameter	Bedeutung
Rekal.-Kontrolle	Rek.Fakt. <	Obere Grenze des Rekalibrierfaktors
	Rek.Fakt. >	Untere Grenze des Rekalibrierfaktors
		Bei Kalibrierfaktoren außerhalb dieser vorgegebenen Grenzwerte, wird die Reaktion ausgelöst.
		Rek. ! Bei mit "+" markierten Linien wird der Rekalibrierfaktor geprüft.

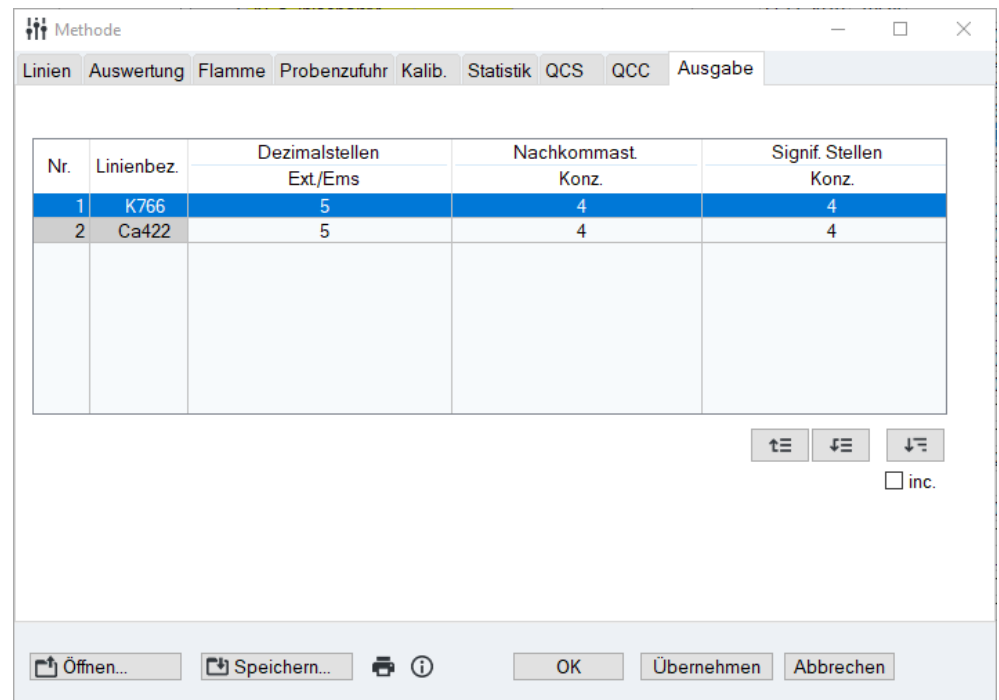
Sehen Sie dazu auch

📖 Statistikparameter spezifizieren (Fenster Methode | Statistik) [▶ 61]

3.2.11 Ergebnisausgabe spezifizieren (Fenster Methode | Ausgabe)

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

- ▶ Die Anzahl Dezimalstellen für die Anzeige und den Druck von Extinktion und Konzentration sowie legen Sie in der Tabelle separat für jedes Element fest.
- ▶ Die Druckreihenfolge der Reihenfolge in der Tabelle.



4 Sequenzen

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


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

4.1 Sequenzen erstellen, speichern und laden

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

4.1.1 Neue Sequenz erstellen

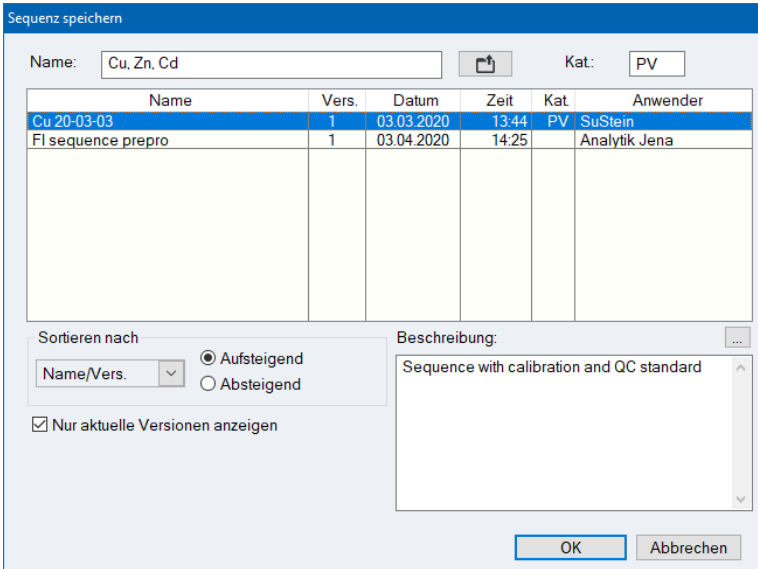
Erstellen oder laden Sie zunächst eine Methode. Auf Grundlage der Methode können Sie eine neue Sequenz aus Probenmessungen und Aktionen spezifizieren.

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

4.1.2 Sequenz speichern

Nach Eingabe der Messungen und Aktionen speichern Sie die Sequenz in der Datenbank. Damit können Sie die Sequenz für spätere Messungen wieder verwenden. Sequenzen werden im Fenster **Sequenz speichern** in der Datenbank gespeichert. Dabei können Sie weitere Daten mit der Sequenz speichern, um die Sequenzen zu kategorisieren und leichter auffindbar zu machen.


Elemente im Fenster Sequenz speichern



The screenshot shows the 'Sequenz speichern' dialog box. At the top, there is a 'Name:' field containing 'Cu, Zn, Cd' and a 'Kat:' field containing 'PV'. Below this is a table with the following data:

Name	Vers.	Datum	Zeit	Kat	Anwender
Cu 20-03-03	1	03.03.2020	13:44	PV	SuStein
FI sequence prepro	1	03.04.2020	14:25		Analytik Jena

Below the table, there are sorting options: 'Sortieren nach' with a dropdown set to 'Name/Vers.', radio buttons for 'Aufsteigend' (selected) and 'Absteigend', and a checked checkbox for 'Nur aktuelle Versionen anzeigen'. To the right, there is a 'Beschreibung:' field with a text area containing 'Sequence with calibration and QC standard'. At the bottom right, there are 'OK' and 'Abbrechen' buttons.

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

Sequenz speichern



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

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Vordefinierte Bemerkungen erstellen [▶ 171]

4.1.3 Sequenz laden

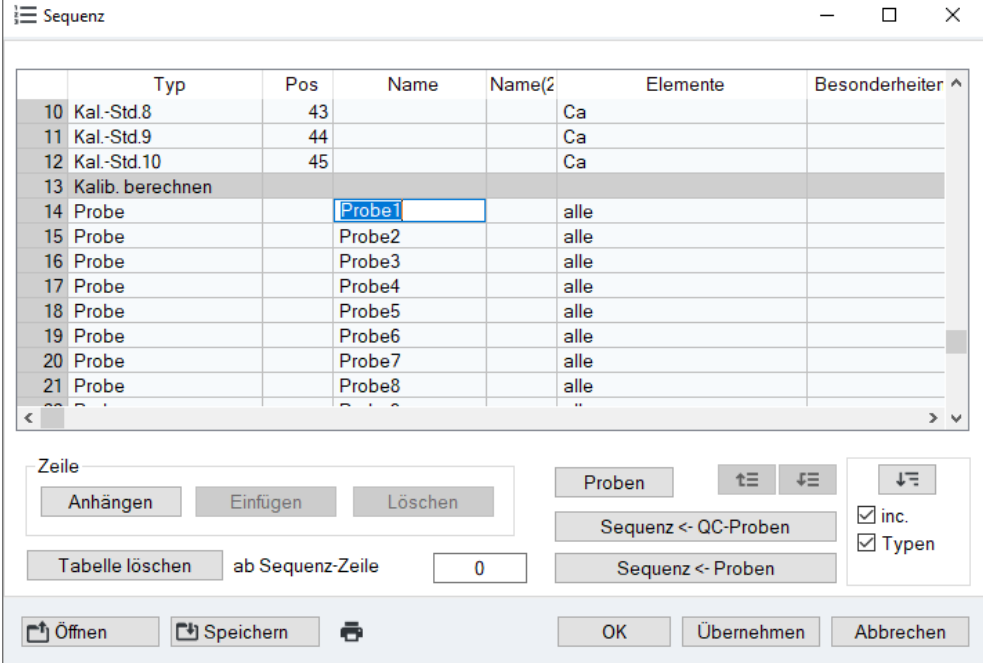
Sie könne gespeicherte Sequenzen laden und auf ihrer Grundlage zusammen mit einer Methode eine Messroutine starten.

- ▶ Öffnen Sie das Datenbankfenster der Sequenzen mit einer der folgenden Alternativen:
 - In der Werkzeugleiste auf das Ordner-Symbol  neben dem Feld Sequ klicken.
 - Menüpunkt **Datei | Sequenz laden** wählen.
 - Das Fenster **Sequenz** mit Klick auf  öffnen und dort auf **Öffnen** klicken.
- ▶ Sie können optional im Feld **Kat.** die angezeigten Sequenzen mit Auswahl einer Kategorie einschränken. Zur Anzeige aller Sequenzen löschen Sie den Eintrag in diesem Feld.
- ▶ Aktivieren Sie die Option **Nur aktuelle Versionen anzeigen**, wenn nur die neuesten Versionen der Sequenzen angezeigt werden sollen.
- ▶ Markieren Sie in der Tabelle die Sequenz und klicken Sie auf **OK**.
 - ✓ Das Fenster **Sequenz** mit gespeicherten Parametern erscheint.

4.2 Fenster Sequenz

Im Fenster **Sequenz** spezifizieren Sie die Reihenfolge von Messungen und weiteren Aktionen einer Analyse.




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



	Typ	Pos	Name	Name(2)	Elemente	Besonderheiten
10	Kal.-Std.8	43			Ca	
11	Kal.-Std.9	44			Ca	
12	Kal.-Std.10	45			Ca	
13	Kalib. berechnen					
14	Probe		Probe1		alle	
15	Probe		Probe2		alle	
16	Probe		Probe3		alle	
17	Probe		Probe4		alle	
18	Probe		Probe5		alle	
19	Probe		Probe6		alle	
20	Probe		Probe7		alle	
21	Probe		Probe8		alle	

Zeile

Anhängen Einfügen Löschen

Proben   

Sequenz <- QC-Proben inc. Typen

Sequenz <- Proben

Tabelle löschen ab Sequenz-Zeile


Öffnen Speichern  OK Übernehmen Abbrechen

Tabelle für Proben- und Aktionsfolgen

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

Tabellenspalte	Beschreibung
Typ	Probentyp bzw. Analysenschritt
Pos	Probenposition im Probengeber (falls verwendet)
Name	<p>Probenname</p> <p>Diese Eingabe ist optional. Für Kalibrier- und QC-Proben wird dieser Probenname aus der Methode übernommen, falls dort ein Probenname spezifiziert wurde.</p> <p>Für Analysenproben können die Namen aus der Probeninformationsdatei übertragen werden.</p>
Name(2)	Weitere Bezeichnung zur Probenidentifikation (optional).
Elemente	<p>Nur für Mehrelementmethoden</p> <p>Elemente / Elementlinien auswählen, die in einer Probe analysiert werden oder für die Sonderaktionen ausgeführt werden.</p> <p>Alle Spalten kopieren</p> <p>Alle in der Methode festgelegten Elemente/Elementlinien werden bestimmt (Standardeinstellung).</p> <p>Elementsymbol</p> <p>Nur die genannten Elemente werden bestimmt, z. B. Cu, Pb.</p> <p>Elementsymbol + Index (bei Analyse mehrerer Linien eines Elements)</p> <p>Nur die genannten Elementlinien werden bestimmt, z. B. Cu1, Cu2.</p> <p>nicht Elementsymbol</p> <p>Die genannten Elemente werden nicht bestimmt, z. B. nicht Cu, Pb.</p>

Tabellenspalte	Beschreibung
	nicht Elementsymbol + Index Die genannten Elementlinien werden nicht bestimmt, z. B. nicht Cu1, Pb2.
Besonderheiten	Bei Mehrlinienmethoden kann optional eingestellt werden, ob eine Aktion für jede Linie, jedes Element oder nur für die letzte Linie in der Methode erfolgen soll.

Schaltflächen

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

Schaltfläche	Funktion
Anhängen	Neue Zeile am Ende der Liste anhängen und das Fenster Sequenz bearbeiten öffnen
Einfügen	Neue Zeile über dem markierten Listenplatz einfügen
Löschen	Markierte Zeilen löschen
Tabelle löschen	Gesamte Sequenztabelle löschen
Sequenz <- QC-Proben	Informationen über Namen von QC-Proben und deren Platz im Probengeber aus dem Fenster Proben-ID QC-Probeninformation übernehmen Die Informationen aus der QC-Proben-ID-Tabelle werden in die Sequenztabelle eingetragen. Die erste Zeile mit neuer Probenidentifikation wird im Feld ab Sequenz-Zeile festgelegt.
Sequenz <- Proben	Informationen über Probennamen und Platz im Probengeber aus dem Fenster Proben-ID übernehmen Die Informationen aus der Proben-ID-Tabelle werden in die Sequenztabelle eingetragen. Die erste Zeile mit neuer Probenidentifikation wird im Feld ab Sequenz-Zeile festgelegt.

Sehen Sie dazu auch

 Probeninformationsdaten [▶ 77]

4.3 Messungen und Aktionen in einer Sequenz spezifizieren

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

Sequenz bearbeiten

Auswahl Tabellenplatz Nr.: 24

Proben
 QC
 Blindwert
 Leerw.-NWG
 Nullabgleich/Maxabgleich
 Kalibration
 Rekalibration
 Peaksuche
 Sonderaktion
 Methode laden

Sonderaktion

Flamme ein
 Flamme aus
 Lampe aus
 Wartezeit
 Pause
 Beep
 Wiederhole
 Solange
 Kalib. anzeigen
 Reinigung
 System spülen s

für jede Linie

Mögliche Messungen und Aktionen


In Abhängigkeit der verwendeten Atomisierungstechnik und Einstellungen in der Methode können Sie verschiedene Messungen und Aktionen für eine Analyse spezifizieren.

Option	Beschreibung
Proben	Die unter Anz. eingegebene Anzahl Proben messen
QC	Eine QC-Probe messen und entsprechend der Spezifikation in der Methode auswerten Nach Aktivierung der Option in der Liste eine der im Fenster Methode QCS spezifizierten QC-Proben auswählen. Die Parameter der QC-Probe werden im danebenstehenden Feld angezeigt.
Referenzwert	Nur Flammentechnik Die Referenzprobe immer als erste Messung in der Sequenz definieren. Als Referenz wird destilliertes Wasser verwendet.
Blindwert	Die Blindprobe ohne Analyten messen
Leerw.-NWG	Leerwertprobe zur Bestimmung der Nachweis- und Bestimmungsgrenzen nach dem Leerwertverfahren messen
Nullabgleich/Maxabgleich	AZ-Messung (Auto-Zero) bei Extinktionsmessungen bzw. Messung des Maximalwerts bei Emissionsanalysen ausführen
Kalibration	Die Standardproben mit bekannter Konzentration des Analyten messen und entsprechend der Spezifikation in der Methode die Kalibration berechnen
Rekalibration	Die für die Rekalibration vorgesehene Standardprobe messen und eine Rekalibration berechnen
Proben-Addition	Für das Kalibrierverfahren Additions-Kalibrieren Diese Probe aufstocken und die Kalibrierkurve und Probenkonzentration ermitteln
Blindwert-Addition	Für das Kalibrierverfahren Additions-Kalibrieren und die Blindwertkorrektur auf Konzentrationsbasis Diese Blindwertprobe aufstocken und Blindwert ermitteln
Peaksuche	Tatsächliches Linienmaximum der Spektrallinie und seine Abweichung vom Tabellenwert (Ablage) bestimmen

Option	Beschreibung
	Die Gerätewellenlänge wird entsprechend dem gefundenen optischen Linienmaximum korrigiert und ein automatischer Geräteabgleich ausgeführt. Bei langen Messungen kann mit dieser Funktion eine eventuelle Drift des Spektrometers korrigiert werden.
Sonderaktion	Diese Aktionen betreffen nicht direkt die Messung der Proben (siehe unten).
Methode laden	Eine gespeicherte Methode laden, um innerhalb Sequenz eine andere Analyse zu starten


Sonderaktionen

Folgende Sonderaktionen können in den Messablauf zusätzlich eingefügt werden:

Option	Beschreibung
Flamme ein / Flamme aus	Nur Flammentechnik Flamme löschen/zünden
Ofen ausheizen	Nur Graphitofentechnik Zusätzlicher Ausheizschritt, um das Graphitrohr zu reinigen. Dabei wird das Graphitrohr einmal auf eine vorgegebene Temperatur aufgeheizt. Die Parameter für diesen Ausheizschritt werden im Fenster Neue Methode Ofen spezifiziert.
Rohr formieren	Nur Graphitofentechnik Graphitrohr formieren
System spülen	Für Hydridtechnik System zusätzlich spülen Die Parameter für diesen Schritt werden im Fenster Methode Hydrid spezifiziert.
System laden	Für Hydridtechnik Nach einer Neuinstallation oder Reinigung des Hydridsystems, wie sie nach Beendigung der Arbeit täglich erfolgen sollte, müssen vor Beginn der Analysen die Schläuche mit Reagenzien geladen werden. Deshalb sollte diese Aktion in der Sequenz vor der ersten Messung erfolgen.
Lampe aus	Hohlkathodenlampe ausschalten
Wartezeit	Die eingegebene Zeit warten und dann mit der Analyse fortsetzen
Pause	Die Analyse stoppen Die Sequenz kann anschließend mit Klick auf  fortgesetzt werden.
Beep	Einen Signalton vom PC erzeugen, um über eine Aktion zu benachrichtigen, z. B. das Ende der Kalibrierung anzuzeigen
Wiederhole/Solange	Einen Teil der Sequenz bis zur Sonderaktion Solange wiederholen Als Abbruchbedingung kann eine Anzahl von Schleifendurchläufen oder eine Zeit in Minuten angegeben werden. Die Einträge in der Ergebnisdatei werden entsprechend dem Abbruchkriterium mit einem Zähler oder Datum und Uhrzeit ergänzt. Bei einer Onlinemessung muss die Option autom. aktiviert werden. Dies verhindert im manuellen Betrieb die Nachfrage zur Probendosierung.
Kalib. anzeigen	Während der laufenden Sequenz die Kalibrierkurve anzeigen
Kalib. berechnen	Die Kalibrierfunktion neu berechnen
Kollektor reinigen	Für Hydrid/HydrEA-Technik Goldkollektor heizen, um Analytreste zu entfernen
System spülen	Für Flammentechnik

Option	Beschreibung
	Probenweg spülen
Reinigung	Kontrollierte Reinigung bei Lösungsanalytik ausführen Die Parameter werden im Fenster Methode Probenzufuhr spezifiziert.

Sequenz spezifizieren

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Sequenz** mit Klick auf .
- ▶ Klicken Sie auf **Anhängen**.
 - ✓ Das Fenster **Sequenz bearbeiten** mit den für die aktuelle Methode verfügbaren Messungen und Aktionen erscheint.
- ▶ Aktivieren Sie der Reihe nach die benötigten Aktionen und übertragen Sie diese jeweils mit **Übernehmen** in die Sequenztabelle.
- ▶ Bestätigen Sie die letzte Aktion mit **OK**.
 - ✓ Sie kehren das Fenster **Sequenz** zurück. Die Sequenztabelle enthält nun alle Aktionen in der Reihenfolge der Auswahl.
- ▶ Geben Sie optional in der Tabellenspalte **Elemente** die zu untersuchenden Elemente ein.
- ▶ Bei Verwendung des Probengebers:
 - Spezifizieren Sie die Position der Proben auf dem Probengeber. Die Positionen von Standardproben und QC-Proben werden als Voreinstellung aus der Methode übernommen. Sie können diese Positionen hier ändern.

Hinweis: Die Namen und Positionen der zu analysierenden Proben geben Sie am besten im Fenster **Proben-ID** ein und übertragen sie anschließend in die Sequenztabelle.





Übliche Sequenz für eine Messroutine

Eine übliche Sequenz enthält die Messungen in der Reihenfolge:

1. Für Flammentechnik: Referenzmessung
2. Kalibration
3. Anzahl Proben


Optional können QC-Proben, Rekalibration oder die Messung der Wiederfindungsrate zwischen oder nach den Probenmessungen eingefügt werden.

Sehen Sie dazu auch



-  [Flammenparameter spezifizieren \(Fenster Methode | Flamme\) \[▶ 33\]](#)
-  [Hydrid- und HydrEA-Systeme spezifizieren \(Fenster Methode | Hydrid\) \[▶ 42\]](#)
-  [Parameter für Probengeber spezifizieren \(Fenster Methode | Probenzufuhr\) \[▶ 46\]](#)
-  [Ofenprogramm eingeben \(Fenster Methode | Ofen\) \[▶ 35\]](#)

5 Probeninformationsdaten


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

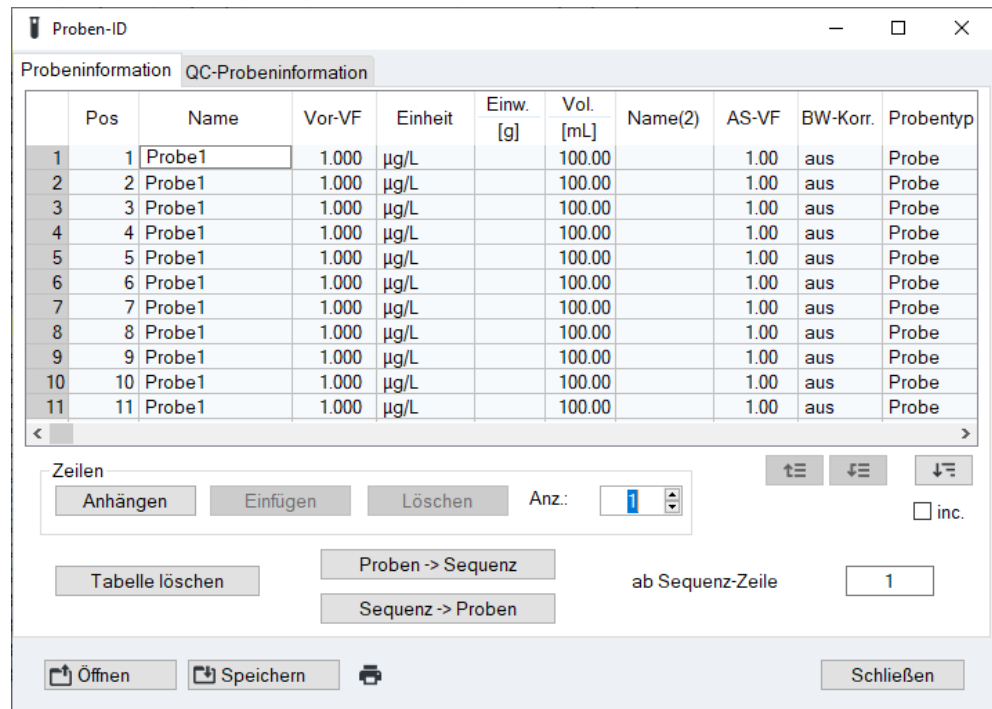
Das Fenster Proben-ID öffnen Sie mit einem Klick auf  in der Symbolleiste oder über den Menüpunkt **Methodenentwicklung | Proben-ID**.

5.1 Probeninformationsdaten erstellen, speichern, öffnen

- Einen neuen Satz Proben-ID erstellen
- ▶ Klicken Sie in der Symbolleiste auf  oder wählen Sie die Menübefehle **Methodenentwicklung | Proben-ID** oder **Datei | Neue Probeninformations-Daten**.
 - ✓ Das Fenster **Proben-ID** erscheint.
 - ▶ Spezifizieren Sie die Einstellungen für Proben und QC-Proben.
 - ▶ Aktivieren Sie den Datensatz mit Klick auf **OK** oder **Übernehmen**.
 - ✓ Die Proben-ID sind aktiviert und werden für die nächste Analyse verwendet. Sie können die Proben-ID auch für eine spätere Analyse speichern.
- Proben-ID speichern
- ▶ Klicken Sie im Fenster **Proben-ID** auf **Speichern** oder wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Speichern | Probeninformation**.
 - ▶ Speichern Sie den Datensatz im Standardfenster **Speichern unter**.
 - ✓ Die Proben-ID sind im CSV-Format gespeichert. Sie können die Daten für weitere Analysen laden oder in einem Tabellenprogramm oder Texteditor editieren.
- Probeninformationsdaten öffnen
- ▶ Eine Proben-ID-Datei können Sie mit einer der folgenden Alternativen öffnen:
 - In der Werkzeugleiste auf das Symbol  neben dem Feld **Proben** klicken.
 - Den Menüpunkt **Datei | Probeninformations-Datei öffnen** wählen.
 - Im Fenster **Proben-ID** auf **Öffnen** klicken.
 - ▶ Wählen Sie im Standardfenster **Öffnen** die Datei aus.
 - ✓ Die Proben-ID-Daten werden im Fenster **Proben-ID** angezeigt und können für die nächste Analyse verwendet werden.

5.2 Fenster Proben-ID

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



Karte Probeninformation

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

Spalte	Beschreibung
Pos	Probenposition im Probengeber
Name	Probenname Diese Eingabe ist optional. Max. Anzahl Zeichen: 20
Vor-VF	Der Vorverdünnungsfaktor ist der Faktor, mit dem die Originalprobe verdünnt wurde, bevor sie im Probengeber platziert bzw. bei der Arbeit ohne Probengeber dem Spektrometer zugeführt wird. Der Faktor ist zur Berechnung der Konzentration der Originalprobe (Konz. 2 in der Ergebnistabelle) notwendig.
Einheit	Einheit für die Konzentration der Probe
Einw.	Einwaage (nur für Lösungsanalytik) Diese Masse (in g) der Originalprobe wurde in der Probenvorbehandlung in Lösung gebracht. Die Einwaage ist zur Berechnung der Konzentration der Originalprobe (Konz. 2) notwendig. Hinweis: Für die Feststoffanalytik werden bekannte Probeneinwaagen im Ergebnisfenster Feststoff eingegeben bzw. vor der Messung unbekannte Probeneinwaagen gewogen.
Vol.	In diesem Volumen (in mL) des Lösungsmittels wurde die Einwaage gelöst. Der Wert ist zur Berechnung der Konzentration der Originalprobe (Konz. 2) erforderlich.
Name (2)	Weiterer Probenname Diese Eingabe ist optional. Max. Anzahl Zeichen: 20
AS-VF	Verdünnungsfaktor des Probengebers Hinweis: Der hier verwendete Verdünnungsmodus wird im Fenster Methode Probenzufuhr eingestellt.
BW-Korr.	Blindwertkorrektur aus Es wird keine Blindwertkorrektur durchgeführt.

Spalte	Beschreibung
	<p>ein Für Berechnung der Konzentration der Originalprobe wird der zuletzt in der Sequenz gemessene Blindwert subtrahiert.</p> <p>Hinweis: Das Verfahren zur Blindwertkorrektur vereinbaren Sie im Fenster Optionen Kalibration.</p>
Probentyp	<p>Auswahl des Probentyps Blindwert oder Probe</p> <p>Die Proben-IDs der Proben-ID werden der Probenfolge in Sequenz entsprechend dem Probentyp zugeordnet, d.h.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Blindwert in Proben-ID = 1. Blindwert in Sequenz 2. Blindwert in Proben-ID = 2. Blindwert in Sequenz <ol style="list-style-type: none"> 1. Probe in Proben-ID = 1. Probe in Sequenz 2. Probe in Proben-ID = 2. Probe in Sequenz usw.
Elemente	<p>Nur Mehrelementmethoden</p> <p>Elemente oder Elementlinien, die in einer Probe analysiert werden</p> <p>alle Alle in der Methode festgelegten Elemente/Elementlinien werden bestimmt (Standardeinstellung).</p> <p>Elementsymbol Nur die genannten Elemente werden bestimmt, z.B. Cu, Pb.</p> <p>Elementsymbol + Index (bei Analyse mehrerer Linien eines Elements) Nur die genannten Elementlinien werden bestimmt, z. B. Cu1, Cu2.</p> <p>nicht Elementsymbol Die genannten Elemente werden nicht bestimmt, z. B. nicht Cu, Pb.</p> <p>nicht Elementsymbol + Index Die genannten Elementlinien werden nicht bestimmt, z. B. nicht Cu1, Pb2.</p>

Schaltflächen

Schaltfläche	Beschreibung
Anhängen	Anzahl neue Zeilen am Ende der Liste einfügen
Einfügen	Anzahl neue Zeilen am markierten Listenplatz einfügen
Löschen	Markierte Zeile löschen
Anz.	Eingabefeld für die Anzahl einzufügender oder zu löschender Zeilen
Tabelle löschen	Die gesamte Liste der Probeninformationen löschen
Proben -> Sequenz	Probennamen und Positionen im Probengeber in die Sequenzliste übertragen. Die erste Zeile der zu übertragenden Information in der Sequenzliste im Eingabefeld ab Sequenz-Zeile festlegen.
Sequenz -> Proben	Probennamen und Positionen im Probengeber aus der Sequenzliste in die Probeninformationstabelle übertragen. Die erste Zeile der zu übertragenden Information in der Sequenzliste im Eingabefeld ab Sequenz-Zeile festlegen.

Karte QC-Probeninformation

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

Schaltfläche

Schaltfläche	Beschreibung
QC-Proben -> Sequenz	QC-Probennamen und Positionen im Probengeber in die Sequenzliste übertragen.



Weitere Schaltflächen und Eingabemöglichkeiten finden Sie in der Übersicht der häufig verwendeten Bedienelemente.

Sehen Sie dazu auch

- ☰ Parameter für Probengeber spezifizieren (Fenster Methode | Probenzufuhr) [▶ 46]
- ☰ Allgemeine Einstellungen für die Kalibration und Blindwertkorrektur [▶ 180]
- ☰ Häufig verwendete Bedienelemente [▶ 18]

5.3 Informationsdaten für Proben und QC-Proben spezifizieren







Wenn Sie für die Analyse weitere Daten zu Proben oder QC-Proben benötigen, wie z. B. die Einwaage oder den Vorverdünnungsfaktor, müssen Sie die Daten im Fenster **Proben-ID** spezifizieren. Die dort eingegebenen Daten können Sie in die Sequenz übertragen.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Proben-ID | Probeninformation** mit Klick auf .
- ▶ Geben Sie im Feld **Anz.** die Anzahl zu analysierender Proben ein. Klicken Sie anschließend auf **Anhängen**, um die Zeilen in die Tabelle einzufügen.
- ▶ Geben Sie in der Tabelle für jede Probe die benötigten Information ein.
- ▶ Wenn die Eingaben in allen Zeilen gleich sind, können Sie mit Klick auf  den Eintrag einer markierten Zelle auf alle nachfolgenden Zellen der Spalte kopieren. Wenn dabei die Option **inc.** (Inkrement) aktiviert ist, wird beim Übertragen der Information auf die nächste Zeile der Wert jeweils um 1 erhöht. So können auf einfache Weise Plätze im Probengeber belegt oder Probennamen fortlaufend nummeriert werden.
- ▶ Die Texte aus den Eingabefeldern können Sie in die Zwischenablage kopieren und wieder einfügen. Verwenden Sie dazu die Tastenkombinationen Strg+C und Strg+V oder verwenden Sie nach Rechtsklick auf die Tabellenzelle die Kontextmenübefehle.
- ▶ Wenn alle Informationen eingetragen sind, geben Sie im Feld **ab Sequenz-Zeile** die Zeile der Sequenz ein, ab welcher die Probeninformation in die Sequenz übernommen wird. Übertragen Sie die Informationen mit Klick auf **Proben -> Sequenz**.
- ▶ Spezifizieren Sie die QC-Probeninformationen analog im Fenster **Proben-ID | QC-Probeninformation** spezifizieren.
 - ✓ Die Probeninformationen werden jetzt für die nächste Analyse verwendet.

6 Analysen durchführen und Ergebnisse berechnen

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

Messungen werden mit den Symbolen der Werkzeugleiste oder über das Menü **Routine** gestartet.

Symbol	Menüpunkt Routine	Funktion
	Sequenz starten	Einen Analysenablauf starten
	Zeile(n) der Sequenz ausführen... F6	Die markierte Zeile in der Sequenz ausführen. Mit Hilfe der Maus und gedrückter Strg- bzw. Umschalttaste können mehrere Zeilen markiert werden.
	Stopp	Den Analysenablauf sofort stoppen Die Stopp-Funktion sollte nur bei Flammentechnik verwendet werden. Bei Hybrid-/HydrEA-Technik und Graphitrohrtechnik bleiben durch direkten Stopp Probenreste im System bzw. Graphitrohr zurück und können zu Verunreinigungen führen.
	Unterbrechen	Für Hybrid-/HydrEA-Technik und Graphitofentechnik Während der Abarbeitung eines Hybrid- oder Ofenprogramms eine Programmunterbrechung anmelden Nach Erkennen der Unterbrechungsanmeldung wird die Schaltfläche blass. Die laufende Probenmessung wird noch zu Ende abgearbeitet, dann wird die Analyse gestoppt.
	Fortsetzen	Eine gestoppte Routine fortsetzen
	Neuberechnen	Eine Neuberechnung der Ergebnisse ausführen, wenn sich Ausgangsdaten, z.B. die Kalibrierfunktion oder die Methode, geändert haben

6.2 Messroutine starten

Nach Auswahl der Methode, der Sequenz und gegebenenfalls der Probeninformationsdaten sind alle Informationen vorhanden, um den Analysenablauf zu starten.

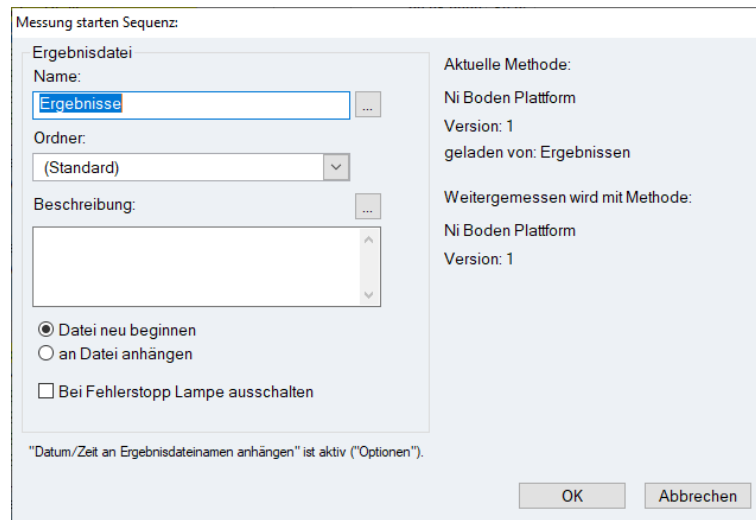
Das AAS muss für die Messung entsprechend der verwendeten Technik vorbereitet sein:

- Bei Flammentechnik: Die Flamme ist gezündet und brennt länger als die Einlaufzeit.
- Bei Graphittechnik: Der Ofen ist bereit.
- Bei Hydridtechnik: Die Küvette ist vorgeheizt.
- Bei Probengeber: Die Proben stehen vorbereitet auf dem Probengeberteller.
- HKL ist eingeschaltet und brennt mindestens 20 min.

Analysenergebnisse während des Analysenablaufs speichern

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

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




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

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

Die Ergebnisdatenbank wird mit der Erweiterung ".tps" gespeichert.

Messung starten

- ▶ Starten Sie die Messroutine mit dem Menübefehl **Routine | Sequenz starten** oder mit einem Klick auf .

- ▶ Wählen Sie im Fenster **Messung starten Sequenz** einen Dateinamen für die Ergebnisdatei aus.
Wahlweise kann das Ergebnis in einer neuen Datei gespeichert oder an eine bereits vorhandene Datei angehängt werden. Das Überschreiben einer bereits vorhandenen Datei ist nicht möglich.
 - ✓ Nach Wahl des Dateinamens startet die Messroutine entsprechend den Einstellungen in Methode und Sequenz. Bei Verwendung des Probengebers läuft die Messung automatisch ab. Bei manueller Probenzuführung ohne Probengeber folgen Sie den Anweisungen zur Probenbereitstellung auf dem Bildschirm.



HINWEIS


Bei Mehrelementmethoden erfolgt die Abarbeitung der Sequenz entsprechend der Reihenfolge der Elemente bzw. Elementlinien in der Methode. Es wird zunächst für das erste Element die Sequenz komplett abgearbeitet, bevor die Sequenz mit dem zweiten Element erneut beginnt. In der Sequenz kann für einzelne Proben die Messung von bestimmten Elementen ausgeschlossen oder vereinbart werden. Ebenso können Wartezeiten elementabhängig eingefügt werden

Anzeigen während des Analysenablaufs

Während der Messung werden die Ergebnisse in Echtzeit im Hauptfenster angezeigt. Zusätzlich können folgende Fenster geöffnet werden.

- **Signalverlauf:** Verlauf des Messsignals
- **Bargraph:** Messwerte in einer Balkengraphik
- **Report-Fenster:** aktueller Flammenstatus oder Ofenstatus
- **Probenkonz. in Bezugskurve:** Lage der ermittelten Probenkonzentration in der Kalibrierkurve


Diese Anzeigefenster vereinbaren Sie im Fenster **Optionen | Analysenablauf** voreinstellen. Die Anzeigefenster können wahlweise während der Messung geschlossen oder geöffnet werden.

- Während der laufenden Messung können Sie auf  **Anzeigefenster** klicken und die gewünschten Fenster aktivieren oder deaktivieren.
- Mit dem Menübefehl **Ansicht | Anzeigefenster öffnen F7** öffnen Sie die Anzeigefenster.
- Mit dem Menübefehl **Ansicht | Anzeigefenster schließen F8** blenden Sie die Anzeigefenster aus.

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




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

Zusätzlich werden in der Symbolleiste an der Seite während der Messung größere Schaltflächen eingeblendet:

Option	Beschreibung
 Anzeigefenster	Anzeigefenster öffnen und schließen
Scraper auslösen	Bei Betätigung der Schaltfläche reinigt der Scraper im Lachgas-Betrieb den Brennerkopf innerhalb einer Statistikreihe einer Probe zwischen zwei Messungen.
Methode anzeigen	Methodenfenster öffnen




Option	Beschreibung
	Die Methode kann nur gelesen, jedoch nicht geändert werden.
Sequenz Proben	Sequenzfenster einblenden Die Sequenz kann während laufender Messung erweitert werden. Das Sequenzfenster enthält die Schaltfläche Proben-ID mit der auch weitere Proben-ID-Daten erstellt werden können.
Flamme löschen	Den Analysenablauf sofort stoppen und Flamme löschen

Sehen Sie dazu auch

-  Vordefinierte Bemerkungen erstellen [▶ 171]
-  Fenster Sequenz [▶ 72]
-  Optionen zum Analysenablauf [▶ 178]

6.3 Messroutine unterbrechen, stoppen und fortsetzen

Ein laufende Messroutine kann unterbrochen und anschließend wieder fortgesetzt werden. Bei der Graphitofentechnik und Hydridtechnik sollte jedoch die laufende Probenmessung bis zu Ende geführt und danach erst abgebrochen werden. Diese Verfahrensweise verhindert, dass sich Probenrückstände im Graphitrohr bzw. Hydridsystem ablagern können. Bei der Flammentechnik kann zu jedem Zeitpunkt ohne Problem gestoppt werden.


- ▶ Mit **Routine | Stopp** oder Klick auf  stoppen Sie den Analysenablauf sofort.
- ▶ Mit **Routine | Unterbrechen** oder  melden Sie eine Unterbrechung Analysenablaufs an. Nach Erkennen der Unterbrechungsanmeldung wird die Schaltfläche blass. Das Hydrid-Programm oder Ofenprogramm wird noch zu Ende abgearbeitet. Dann wird ein Stopp des Analysenablaufs ausgelöst.
- ▶ Mit **Routine | Fortsetzen** oder  setzen Sie eine gestoppte/unterbrochene Routine fort.
Es öffnet sich das Dialogfenster **Sequenz fortsetzen**, in dem der Aktionsstatus vor der Unterbrechung ausgegeben wird.
Bei Änderung der Methode aktivieren Sie die Option **Fortsetzen mit geänderter Methode**. Dadurch erfolgt ein neuer Methodeneintrag in die Ergebnisdatei und von der Methode wird eine weitere Version gespeichert.
Die Messung kann in folgender Weise fortgesetzt werden:

Option	Beschreibung
Erste Statistik-Messung	Bei aktueller Probe, aktueller Linie und erster Statistik-Messung fortsetzen (Statistik zurücksetzen)
Ab Tabellenplatz ->	Bei aktueller Linie und nebenstehenden Tabellenplatz fortsetzen
Nächstes Element	Bei nächster Linie und Tabellenplatz 1 fortsetzen

6.4 Aktionen der Sequenz wiederholen

Einzelne Aktionen in einer Sequenz, Einzelmessungen in Statistikmessungen oder Sonderaktionen können wiederholt werden.

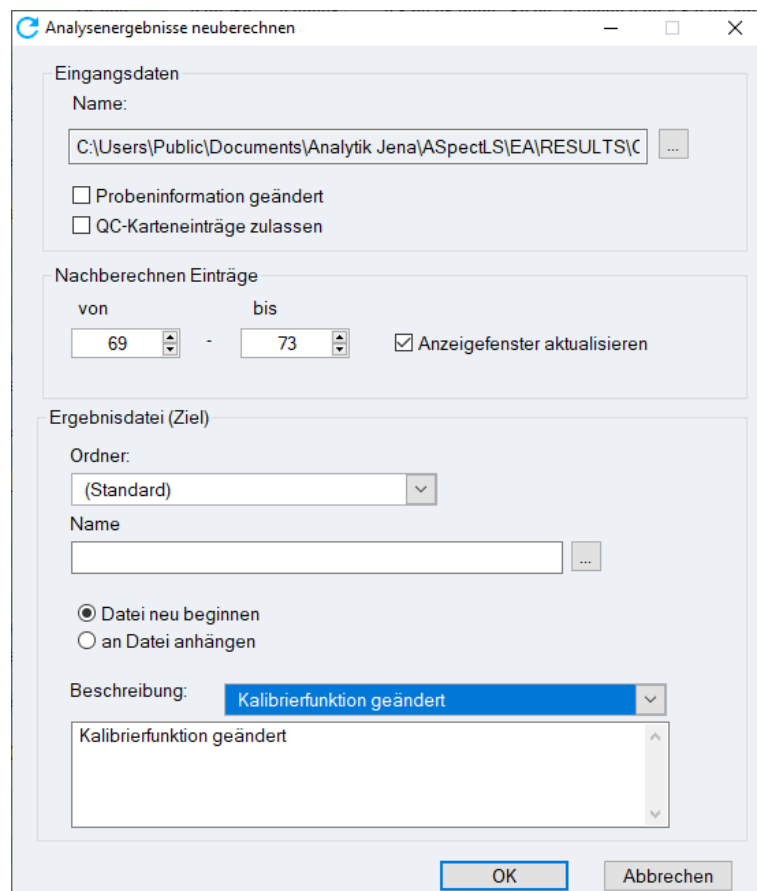
- ▶ Markieren Sie im Hauptfenster auf der Karte **Sequenz** oder **Sequenz/Ergebnisse** die Zeilen mit den zu wiederholenden Aktionen.

- ▶ Starten Sie die Messroutine mit dem Menübefehl **Routine | Zeile(n) der Sequenz ausführen... F6** oder mit einem Klick auf .
- ▶ Wählen Sie im Fenster **Messung starten** einen Dateinamen aus, in dem das Ergebnis für die Wiederholungsmessung gespeichert werden soll. Wahlweise kann das Ergebnis in einer neuen Datei gespeichert oder an eine bereits vorhandene Datei angehängt werden. Das Überschreiben bereits vorhandener Ergebnisse durch Wahl des gleichen Dateinamens ist nicht möglich.
 - ✓ Nach Wahl des Dateinamens startet die Wiederholung der ausgewählten Aktion.

Bei Wiederholungen der Sequenz oder der Messung einzelner Zeilen wird eine neue Version der Methode gespeichert. Eine Prüfung auf Änderungen in der Methode erfolgt in diesem Fall nicht.

6.5 Analyseergebnisse Neuberechnen

Nach jeder Änderung der Auswertebedingungen, z. B. Änderung der Kalibrierfunktion, Methodenänderungen usw., müssen die Ergebnisse Neuberechnet werden, um die Änderungen wirksam werden zu lassen. Ebenfalls können die Probeninformationsdaten, z.B. Probenamen, Verdünnungsfaktoren, geändert und in der Ausgabe der Analyseergebnisse neu berücksichtigt werden. Die Optionen für die Neuberechnung werden im Fenster **Analyseergebnisse Neuberechnen** spezifiziert.




Optionen im Fenster Analysenergebnisse Neuberechnen

Option	Beschreibung
Name	Name der Ursprungsdatei mit Analyseergebnissen
Probeninformation geändert	Die Probeninformationsdaten wurden geändert und sollen bei der Neuberechnung aktualisiert werden.

Option	Beschreibung
QC-Karteneinträge zulassen	Nachberechnete Werte auf den QC-Karten eintragen, wenn in der Methode QC-Karten spezifiziert sind
Nachberechnen Einträge	Die Einträge in der Ergebnisliste beginnend mit Zeile von bis Zeile bis nachberechnen
Anzeigefenster aktualisieren	Beim Nachberechnen die Anzeigefenster aktualisieren
Ordner	Speicherpfad für die Ergebnisdatei auswählen
Name	Dateinamen für die Ergebnisdatei eingeben
Datei neu beginnen	Neuen Dateiname eingegeben. Es wird geprüft, ob der Dateiname bereits vorhanden ist. Vorhandene Dateien können nicht überschrieben werden.
an Datei anhängen	Die nachberechneten Werte an die vorhandene Datei anhängen
Beschreibung	Diese zusätzliche Notiz wird mit den nachberechneten Analyseergebnissen gespeichert. Der Eintrag ist erforderlich, wenn das optionale 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul installiert ist. In der Liste können benutzerdefinierte Beschreibungen ausgewählt werden.

Neuberechnung ausführen

- ▶ Klicken Sie auf  oder wählen Sie den Menübefehl **Routine | Neuberechnen**. Es öffnet sich das Fenster **Analysenergebnisse Neuberechnen**.
- ▶ Spezifizieren Sie die Optionen und wählen Sie einen Dateinamen.
- ▶ Klicken Sie auf **OK**
 - ✓ Die Neuberechnung wird ausgeführt.


Hinweis: Neuberechnete Werte können wahlweise in einer neuen Datenbank gespeichert oder an eine vorhandene Ergebnisdatei angehängt werden. Eine Manipulation der Ursprungsdaten ist ausgeschlossen. Die ursprünglichen Ergebnisse bleiben immer erhalten, solange die Ursprungsdatei nicht gelöscht wird.

Sehen Sie dazu auch

-  Vordefinierte Bemerkungen erstellen [▶ 171]

6.6 Messungen parallel zur laufenden Analyse auswerten

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

- ▶ Starten Sie ASpect LS in der zweiten Instanz mit dem Menübefehl **Datei | Offline-Programminstanz starten**.
- ▶ Öffnen Sie die Ergebnisdatei der aktuell laufenden Messung mit dem Menübefehl **Datei | Ergebnisdatei öffnen**. Bisher gemessene Ergebnisse werden in das Ergebnisfenster geladen.
- ▶ Weitere Ergebnisse aus der laufenden Messung laden Sie mit dem Menübefehl **Ansicht | Ergebnisliste aktualisieren (neue Ergebnisse der Online-Programminstanz)** oder mit Klick auf .

- ✓ Die Ergebnisanzeige wird aktualisiert. Sie können die Ergebnisse weiter bearbeiten, z.B. durch Aufruf der Probedetails oder Auswahl einer anderen Kalibrierfunktion.

Sehen Sie dazu auch

- Details der Probeneinzelwerte anzeigen [▶ 93]
- Kalibration [▶ 102]

6.7 Anzeige der Ergebnisse und des Analysenfortschritts im Hauptfenster

Je nach Betriebsart werden Messwerte in Extinktion oder Emission ermittelt. In der weiteren Beschreibung werden nur Extinktionswerte erwähnt. Für die Emissionswerte gelten die gleiche Angaben und Aussagen. Für Extinktionswerte wird in den Werteausgaben die Abkürzung **Ext.** und für Emissionswerte die Abkürzung **Ems** verwendet.

Die Messergebnisse und die Sequenz werden großflächig im Hauptfenster der Arbeitsoberfläche angezeigt.

Die Darstellung auf verschiedenen Karten im Hauptfenster bietet eine gute Übersicht über die Messergebnisse und statistische Auswertungen.

Folgende Karten können angewählt werden:



- **Sequenz/Ergebnisse** (Inhalt der Karten Sequenz und Ergebnis auf einer Karte)
- **Sequenz** (Anzeige der aktuellen Sequenz)
- **Ergebnisse** (Darstellung der Messergebnisse)
- **Übersicht** (Zusammenfassung der Messergebnisse)
- **Feststoff** (Vorbereitung der Feststoffproben für die Analyse)

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

6.7.1 Karte Sequenz/Ergebnisse

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

Sehen Sie dazu auch


-  Karte Sequenz [▶ 88]
-  Karte Ergebnisse [▶ 88]

6.7.2 Karte Sequenz

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

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

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

Nach der Messung kann eine ausgewählte Probe erneut gemessen werden. Dafür muss die Probenzeile in der Sequenz markiert und anschließend  in der Werkzeugleiste betätigt werden.

6.7.3 Karte Ergebnisse

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

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

Tabelle Ext./Zeit

Die Tabelle enthält die Extinktionswerte und die statistischen Auswertung entsprechend den Methodeneinstellungen (Fenster **Methode | Statistik**).

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer in der Analysenfolge
Name	Probenname
Linie	Elementlinie
Ext./Ems	Mittelwert oder Median der gemessenen Einzel-Extinktionen/-Emissionen
SD(Ext.)	Standardabweichung der Extinktionen (Mittelwertstatistik)
RSD%	Relative Standardabweichung (Mittelwertstatistik)
Datum/Zeit	Datum und Zeitpunkt des Sequenzstarts
Einzelwerte(Ext./Ems)	Einzelwerte der Extinktionsmessungen (Emissionsmessung)

Tabelle Konz.1

Die Tabelle zeigt die analysierte Konzentration der Probe, wie sie dem AAS zugeführt wurde, an.

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer in der Analysenfolge
Name	Probenname
Linie	Elementlinie

Spalte	Beschreibung
Einheit	Konzentrationseinheit
Konz.1	Analysierte Konzentration der Probe
SD1	Standardabweichung der Konz.1 (Mittelwertstatistik)
RSD%	Relative Standardabweichung der Konz.1 (Mittelwertstatistik)
R	Spannweite der Konz.1 (Medianstatistik)
R%	Relative Spannweite der Konz.1 (Medianstatistik)
VB	Vertrauensbereich
VF	Verdünnungsfaktor bei Konzentrationsüberschreitung Bei Konzentrationsüberschreitungen kann im Fenster Methode Probenzufuhr eine automatische Verdünnung mit dem Probenwechsler aktiviert werden. Der Verdünnungsfaktor dieser automatischen Verdünnung wird bei der Berechnung der Konz.1 berücksichtigt.
Bem.	Markierungen von Ereignissen während der Messung
Ext./Ems	Mittelwert oder Median der gemessenen Einzel-Extinktionen/-Emissionen
SD(Ext.)	Standardabweichung der Extinktionen (Mittelwertstatistik)
Datum/Zeit	Datum und Zeitpunkt des Sequenzstarts
Einzelwerte(Ext./Ems)	Einzelwerte der Extinktionsmessungen (Emissionsmessung)

Tabelle Konz.2

Die Tabelle zeigt die Konzentration der Originalprobe an. Bei der Berechnung von **Konz.2** werden die Probeninformationsdaten (siehe Tabelle **Proben-ID** unten) berücksichtigt:

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

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer in der Analysenfolge
Name	Probenname
Linie	Elementlinie
Einheit	Konzentrationseinheit
Konz.2	Konzentration der Originalprobe unter Berücksichtigung der Probeninformationsdaten
SD2	Standardabweichung der Konz.2 (Mittelwertstatistik)
RSD%	Relative Standardabweichung der Konz.2 (Mittelwertstatistik)
VB	Vertrauensbereich der Konz.2
Bem.	Markierungen von Ereignissen während der Messung
Ext./Ems	Mittelwert oder Median der gemessenen Einzel-Extinktionen/-Emissionen
SD(Ext.)	Standardabweichung der Extinktionen (Mittelwertstatistik)
R(Ext.)	Spannweite der Extinktion (Medianstatistik)
Einzelwerte(Ext./Ems)	Einzelwerte der Extinktionsmessungen (Emissionsmessung)

Tabelle QC-Erg.

In der Tabelle werden die Ergebnisse der QC-Proben ausgegeben: Sollwert und Istwert der Konzentration, Wiederfindungsraten (nicht für Blindwert), Reaktionen auf eventuelle Abweichungen (alle Typen außer Blindwert).

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer in der Analysenfolge
Name	Probenname
Linie	Elementlinie
QC (für Kalibrierfunktionen)	R²(adj.) Anstieg Char.Konz.: Charakteristische Konzentration
QC (für QC-Proben, nicht für QC-Blindwert)	Konz.1 Sollw.: Sollwert der Konzentration WfR: Wiederfindungsrate Bei QC-Proben und QC-Standard wird die Wiederfindungsrate der Konzentration bestimmt. Bei QC-Stock, QC-Trend und QC-Matrix wird die Wiederfindungsrate der durch die Aufstockung verursachten Konzentrationserhöhung ermittelt.
QC (für Leerwert-NWG)	SD: Standardabweichung der Leerwertmessungen NWG: Nachweisgrenze UG: Bestimmungsgrenze
Bem.	Markierungen von Ereignissen während der Messung
SD(Ext.)	Standardabweichung der Extinktionen (Mittelwertstatistik)
Datum/Zeit	Datum und Zeitpunkt des Sequenzstarts
Einzelwerte(Ext./Ems)	Einzelwerte der Extinktionsmessungen (Emissionsmessung)

Tabelle Fehler

Wenn während der Analyse Fehler auftreten, werden die entsprechenden Messungen in allen Tabellen rot markiert. In der Tabelle **Fehler** wird der aufgetretene Messfehler dokumentiert.

Tabelle Einzelwerte

Die Tabelle **Einzelwerte** enthält die gemessenen Einzelwerte der Extinktion/Emissionen.

Tabelle Proben-ID

Die Tabelle enthält die Probeninformationsdaten.

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer in der Analysenfolge
Linie	Elementlinie
Typ	Probentyp (z. B. Probe, Blindwert, QC-Probe)
Pos	Position der Probe im Probenwechsler
Vor-VF	Vorverdünnungsfaktor Mit diesem Faktor wurde die Originalprobe verdünnt, bevor sie im Probengeber platziert bzw. bei der Arbeit ohne Probengeber dem Gerät zugeführt wird. Der Faktor ist zur Berechnung der Konzentration der Originalprobe notwendig.
Einw.	Nur für Lösungsanalytik Einwaage in Gramm Masse der Originalprobe, die in der Probenvorbehandlung in Lösung gebracht wurde (in mL). Die Masse ist zur Berechnung der Konzentration der Originalprobe (Konz.2) notwendig.
Vol.	Volumen des Lösungsmittels, in dem die jeweilige Einwaage gelöst wurde (in mL). Der Wert ist zur Berechnung der Konzentration der Originalprobe (Konz.2) erforderlich.
Name (2)	Weiterer Probenname aus der Probeninformationstabelle

Spalte	Beschreibung
AS-VF	Verdünnungsfaktor des Probengebers
BW-Korr.	Blindwertkorrektur aus: Es wurde keine Blindwertkorrektur durchgeführt. ein: Für die Berechnung der Konzentration der Originalprobe (Konz.2) wurde die zuletzt in der Sequenz ermittelte Blindwertkonzentration subtrahiert. Hinweis: Im Fenster Optionen Kalibration wählen Sie, ob bei der Blindwertkorrektur Konz.2 oder Konz.1 des Blindwerts verwendet wird.

Tabelle Energie Einst.

Nicht für novAA 800

Die Tabelle enthält eine Übersicht über die eingestellten Geräteparameter.

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer in der Analysenfolge
Name	Probenname
Linie	Elementlinie
PMT	Spannung des Photomultipliers in V
HC-Verstärkerstufe	Verstärkung des Hohlkathodenlampen-Signals
BC-Verstärkerstufe	Verstärkerstufe des Hintergrundsignals
D2Strom	Strom der Deuteriumlampe

Tabelle Benutzerdefiniert

In dieser Tabelle können Sie die Parameter für die Ergebnisausgabe und deren Reihenfolge selbst auswählen.

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

Hinweis:

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

Tabelle Feststoff

Diese Tabelle wird bei der Feststoffanalytik mit Graphitofentechnik angezeigt.

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer in der Analysenfolge
Name	Probenname
Linie	Elementlinie
Norm.Ext.	Mittelwert der normierte Extinktion (Extinktion / Einwaage)
SD	Standardabweichung der Konz. 1 (Mittelwertstatistik)
RSD%	Relative Standardabweichung der Konz. 1 (Mittelwertstatistik)

Spalte	Beschreibung
Masse	Mittlere absolute Analytmasse
Einh.	Absoluteinheit des Analyten
Feuchte[%]	Relative Feuchte der Probe
Einw.	Einwaagen für alle Einzelmengen
Datum/Zeit	Datum und Zeitpunkt des Sequenzstarts
Einzelwerte(Ext./Ems)	Einzelwerte der Extinktionsmessungen (Emissionsmessung)

Sehen Sie dazu auch

 Übersicht über Markierungen in der Werteanzeige [[▶ 193](#)]

6.7.4 Karte Übersicht

Auf der Karte **Übersicht** werden die Analysenergebnisse zusammengefasst. Dabei können Sie folgenden Ausgaben wählen:

Spalte	Beschreibung
Konz.1	Analysierte Konzentration der Probe
Konz.2	Konzentration der Originalprobe unter Berücksichtigung der Probeninformationsdaten
Ext(RSD/R)	Standardabweichung oder Median der Einzel-Extinktionen
Ext./Ems	Mittelwert oder Median der gemessenen Einzel-Extinktionen/-Emissionen
SD	Standardabweichung der Konz.1 (Mittelwertstatistik)
RSD	Relative Standardabweichung der Konz.1 (Mittelwertstatistik)
NWG	Nachweisgrenze
BG	Bestimmungsgrenze
WfR(Sollw.)	Wiederfindungsrate (Sollwert)
R ² (adj.)	Korrigiertes Bestimmtheitsmaß R ²

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

- **Proben**
- **QC-Proben**
- **Kal.-Std.**
- **Sonstige**

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

Sehen Sie dazu auch

 Druckfunktionen [[▶ 161](#)]

6.7.5 Karte Feststoff

Nicht verfügbar für novAA 800 und ZEE nit 700 Q

Auf der Karte **Feststoff** wird die Folge der Einzelmessungen der Feststoffanalyse aufgelistet.

Die in der Sequenz eingestellte Folge von Kalibrier- und Probenmessungen wird in Einzelmessungen aufgesplittet und deren Einwaage, Tara, Dosier- und Vorbehandlungszustand angezeigt und editiert.

Sehen Sie dazu auch

📖 Feststoffanalytik mit Graphitofentechnik [▶ 95]

6.8 Details der Probeneinzelwerte anzeigen

Zu jeder Messung im Hauptfenster können die Einzelwerte der Statistikmessung im Fenster **Probeneinzelwerte** angezeigt werden.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Probeneinzelwerte** durch einen Doppelklick auf die entsprechende Probenzeile in der Ergebnistabelle.
- ▶ Alternativ führen Sie einen Rechtsklick auf die Probenzeile aus und klicken im Kontextmenü auf **Detaillerggebnisse** oder Sie markieren die Probenzeile und wählen den Menübefehl **Ansicht | Detaillerggebnisse**.

Probeneinzelwerte - [Kal.-Std.4]

Pb283 Nr.: Ext.: Datum:
 Typ: SD: Zeit:
 Name: RSD:

Nr.	Bem.	Ext.	Konz.1 µg/L	Ext. UG
1		0.18576		0.02141
2		0.18916		0.02274
3		0.18919		0.02357

Extinction vs. Zeit [s] graph showing a peak at approximately 1.5 seconds.

Buttons: Löschen, Überlappend, 🔍, 🖨️, T, Ersetzen durch Eintrag Nr.: 0, OK, Abbrechen

Angabe zur Probe

Im oberen Teil des Fensters werden folgende Probendaten angezeigt:

Feld	Beschreibung
Pb 283 (Beispiel)	Analysierte Elementlinie
Nr.	Nummer der Messung in der Ergebnistabelle
Typ	Probentyp
Name	Probenname
Ext.(Ems)	Extinktionswert (Emissionswert) (gemittelt über alle Einzelwerte)
SD	Standardabweichung (Mittelwertstatistik). Die Anzeige erfolgt unabhängig von der für die Messung gewählten Statistikmethode (Mittelwert/Median).
RSD	Relative Standardabweichung (Mittelwertstatistik). Die Anzeige erfolgt unabhängig von der für die Messung gewählten Statistikmethode (Mittelwert/Median).

Feld	Beschreibung
Datum/Zeit	Datum und Zeit der in der Tabelle markierten Messung

Anzeige der Einzelwerte

Die ermittelten Probeneinzelwerte (Statistikruns) werden in der Tabelle angezeigt.

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer des Einzelwertes innerhalb der Probenmessung
Einw.	Bei Feststoffanalytik Einwaagen der Einzelproben
Ext.	Berechnete Extinktion des Einzelwertes Bei Feststoffanalytik: normierte Extinktion
Konz.1	Analysierte Konzentration der Probe, wie sie dem AAS zugeführt wurde. Vorverdünnungen und Einwaagen wurden noch nicht berücksichtigt.
Ext. UG	Extinktion des Untergrundes
Bem.	Leer: Der Einzelwert geht in die Berechnung des Probenmittelwerts ein. MAN Der Wert wurde manuell aus der Berechnung des Probenwerts herausgenommen. KOR Der Wert wurde auf Grund des Grubbs-Ausreißertests automatisch aus der Berechnung des Probenwerts ausgeschlossen.

Probeneinzelwerte löschen/reaktivieren

Ein Einzelwert kann aus der Berechnung des Probenmittelwerts manuell ausgeschlossen werden. Nach dem Löschen oder Reaktivieren eines Einzelwertes ist eine Nachberechnung notwendig, um die Änderung wirksam werden zu lassen.




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

Hinweis: Mit dem Grubbs-Ausreißertest können Ausreißer unter den Einzelwerten während der Analyse automatisch gesucht und eliminiert werden.

Grafik



In der Grafik rechts neben der Tabelle wird der Signalverlauf des jeweils markierten Einzelwerts über die Zeit dargestellt. Wenn Sie die Option **Überlappend** aktivieren, werden alle Kurven überlagert angezeigt.

Für die Grafik stehen folgende Funktionen zur Verfügung:

Symbol	Beschreibung
	Graphikausschnitt vergrößern / Zoom
	Graphik auf Originalgröße zurücksetzen
	Notiz in die Graphik einfügen Klicken Sie auf die Schaltfläche und ziehen Sie mit der Maus einen Rahmen in der Grafik auf. In diesen Rahmen können Sie eine Notiz schreiben.

Signalwerte in die Zwischenablage kopieren Sie können die Signalwerte der im Fenster **Probeneinzelwerte** angezeigten Probe mit der Tastenkombination **Strg+C** in die Zwischenablage kopieren. Die Daten können Sie in ein Tabellenprogramm (z.B. Excel oder Origen) einfügen und Grafiken für Publikationen erzeugen.

Probenzeile wechseln Sie können zwischen den Zeilen der Probentabelle des Hauptfensters mit den Pfeil-Schaltflächen wechseln:

Symbol	Beschreibung
	Werte der vorherige Probe in der Probentabelle anzeigen
	Werte der nächste Probe in der Probentabelle anzeigen

Standard ersetzen

Nur für Kalibrierstandards und Proben mit Additionskalibration

Ein Ausreißer in der Kalibration kann durch einen erneut gemessenen Standardwert durch Aktivierung der Option **Ersetzen durch Eintrag Nr.** und Angabe der Zeilennummer des erneut gemessenen Standards ersetzt werden. Um die Änderung wirksam werden zu lassen ist eine Nachberechnung erforderlich.

Sehen Sie dazu auch

 Kalibrierstandards durch Nachmessen ersetzen [► 105]

6.9 Feststoffanalytik mit Graphitofentechnik

Die Feststoffanalytik im Graphitrohr ist für folgende Geräte verfügbar:

- ZEEit 700 P
- ZEEit 650 P
- novAA 400 P

In der Feststoffanalytik werden die festen Proben auf einer Graphitplattform in das Graphitrohr eingebracht und atomisiert. Der Probenaufschluss kann entfallen. Im Vergleich zu den Einstellungen für die Lösungsanalytik sind für die Feststoffanalytik weitere Vorbereitungen oder Probenspezifikationen nötig:

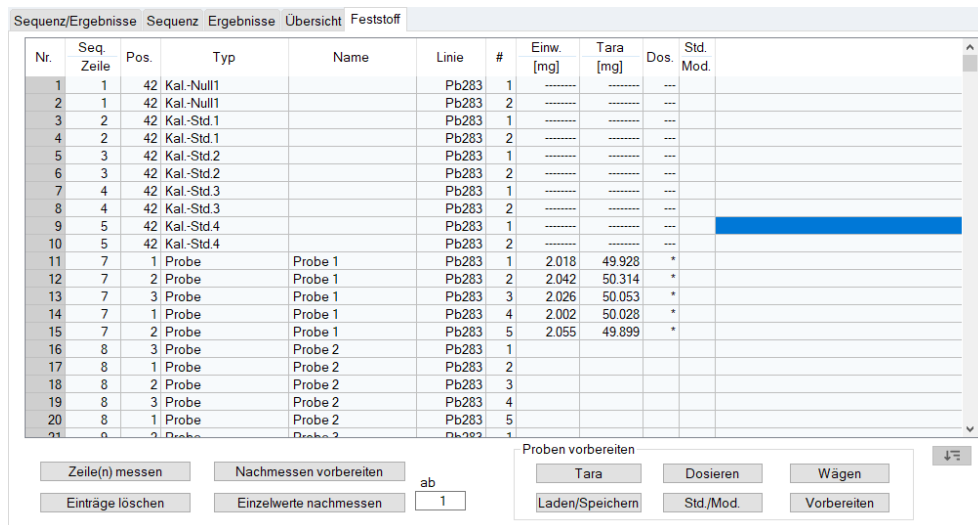
- Dosieren der Proben auf die Plattformen
- Pipettieren von flüssigen Komponenten auf die Probenplattformen
- Ermitteln der Einwaage
- Reinigen der Probenplattformen mittels Ausbrennen
- Ggf. Ermitteln der Tara der Plattformen

Diese Vorbereitungen des Bestimmens der Einwaage und Beladen der Probenplattformen können manuell ausgeführt oder bei Verwendung des SSA 600 automatisiert abgearbeitet werden. Bei Einsatz des SSA 600 mit Flüssigkeitsdosierung übernimmt der Probengeber ebenfalls die Dosierung von Modifikatoren und Standards.

Wenn die obengenannten Aktionen vor Start einer Sequenz ausgeführt wurden, erfolgt das Abarbeiten der Sequenz automatisch und ohne Unterbrechung.

Die Probenvorbereitung für die Feststoffanalytik erfolgt auf der Karte **Feststoff** im Hauptfenster. Die Karte **Feststoff** zeigt eine Liste mit allen auszuführenden Messungen. Die in der Sequenz eingestellten Proben- und Standardmessungen werden hier in Einzelmessungen (Statistikruns) zerlegt und die Verteilung der Proben auf den Plattformen festgelegt.

6.9.1 Funktionen auf der Karte Feststoff



Tabellenelemente

Die Tabelle enthält folgende Einträge:

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer der Einzelmessung
Seq Zeile	Zeilennummer in der Sequenz
Pos	Positionen der Probenplattform auf dem SSA 600-Tellers. Bei Ein-Teller-Betrieb von 1 bis 42, bei Zwei-Teller-Betrieb von 1 bis 84. Hinweis: Die Positionen werden programmintern festgelegt! Die Plattformen sind mit den Proben entsprechend den vorgegebenen Positionen zu beladen.
Typ	Probentyp der Probe, die auf diese Plattform aufzubringen bzw. schon aufgebracht ist
Name	Name der Probe
Linie	Analysenlinie
#	Nummer innerhalb der Statistikmessung
Einw.	Masse der Probe im mg Wenn sich in dieser Spalte der Eintrag "-----" befindet, ist die Probe nicht zu wägen und enthält nur Flüssig-Anteile (z.B. flüssiger Standard). Hinweis: Vor Bestimmung der Einwaage muss die Tara der Probeplattform bestimmt werden.
Tara	Masse der leeren Plattform in mg Für nicht zu wägende Proben steht hier ebenfalls der Eintrag "-----".
Dos.	Wenn mit "*" gekennzeichnet, wurde auf die Plattform Probe dosiert
Std. Mod.	Wenn mit "*" gekennzeichnet, erfolgte die Dosierung flüssiger Komponenten (Standards oder Modifikatoren) auf die Plattform
Vorbeh.	Nur wenn in der Methode eine thermische Vorbehandlung vereinbart ist Wenn mit "*" gekennzeichnet erfolgt für die Plattform eine thermische Vorbehandlung.

Folgende Werte können, falls bekannt, direkt in die Probentabelle eingetragen werden:

- Einwaage, wenn die Probenvorbereitung auf einer externen Waage erfolgte
- Tara

- Markierung für fertig dosierte Probenplattform
- Markierung für pipettierte Modifikatoren
- Markierung zur thermischen Vorbehandlung

Schaltflächen zur Probenvorbereitung

Schaltfläche	Beschreibung
Tara	<p>Das Gewicht der leeren Plattformen für markierte Teller-Positionen bestimmen</p> <p>Dazu werden die Plattformen in die Waage und nach der Wägung auf ihre Positionen transportiert. Das ermittelte Gewicht wird in der Spalte Tara eingetragen.</p>
Dosieren	<p>Die Plattformen der markierten Positionen nacheinander in die Dosierposition bringen</p> <p>Es erscheint das Dosierfenster mit den Angaben, welche Probe zu dosieren ist. Je nach eingestellten Optionen können davor und danach weitere Vorbereitungen für die markierten Positionen erfolgen. Sind in der Tabelle bereits Einträge vorhanden, werden die entsprechenden Vorbereitungen ausgelassen. Die Reihenfolge Tara – Dosieren – Wägen – (Dosieren) – (Wägen) – Mod./Std-Pipettierung ist unbedingt einzuhalten.</p> <p>mit Tara Vorher erfolgt die Bestimmung des Gewichtes der leeren Plattform.</p> <p>mit Wägen Nach der Dosierung erfolgt die Wägung der dosierten Probe.</p> <p>mit Mod./Std.-Pipettierung Nach der Wägung wird die Plattform zur Flüssig-Dosierung gebracht. Wenn im Fenster Methode Probenzufuhr die Option Wägen mit Bestätigung aktiviert ist, können die Schritte Dosieren und Wägen beliebig oft wiederholt werden. Wenn alle drei Optionen aktiviert sind, kann mit diesem Ablauf eine vollständige Probenvorbereitung erfolgen. Die am Schluss auf dem Teller liegenden bestückten Plattformen sind für eine Analyse komplett vorbereitet. Wenn eine der Vorbereitungen nicht erfolgt, wird der entsprechende Schritt im Analysenablauf angefordert.</p>
Wägen	Dosierte Plattformen wägen
Laden/Speichern	<p>Wäge- und Dosierdaten markierter Zeilen speichern und erneut laden</p> <p>Bei Änderungen in der Sequenz oder der Methode wird die Proben-tabelle auf der Karte Feststoff neu erstellt. Dabei gehen vorhandene Einträge verloren. Mit der Funktion Laden/Speichern können Sie die Daten retten und wiederherstellen.</p>
Std./Mod.	<p>Nur für SSA 600 ohne Flüssigdosierung</p> <p>Die Plattformen der markierten Positionen nacheinander zum Dosieren der flüssigen Analysenbestandteile (flüssige Standards, Modifikatoren) in die Dosierposition bringen</p> <p>Es erscheint das Dosierbild für Flüssig-Dosierung. Dort werden die zu dosierenden Flüssigkeiten und Volumen angezeigt.</p>
Vorbereiten	<p>Die Plattformen der markierten Position ausbrennen</p> <p>Die Plattformen werden in den Ofen gebracht, das Ausheiz-Programm abgefahren und die Plattformen nach dem Abkühlen des Ofens zurück auf den Teller transportiert.</p> <p>Beim thermischen Vorbehandeln werden zunächst die entsprechenden Modifikatoren auf die Plattformen pipettiert. Danach wird das Ofenprogramm bis zum Schritt E/P abgefahren. Nach Abkühlen des Ofens werden die Plattformen zurück auf den Teller transportiert.</p>

Schaltfläche	Beschreibung
	Wenn die Option mit Tara markiert, werden anschließend die Plattformen gewogen und das Gewicht in der Spalte Tara eingetragen.

Proben nachmessen und Wägeeinträge korrigieren

Spalte	Beschreibung
Zeile(n) messen	Ein Element in einer Probe neu bestimmen oder in der Methodenentwicklung eine Sequenz zeilenweise einzeln messen. Hinweis: Beim zeilenweisen Messen der Probenfolge muss der Beginn immer mit Statistikrun 1 oder dem folgenden Run des zuletzt gemessenen Statistikruns erfolgen.
Nachmessen vorbereiten	Erstellt aus den in der Ergebnistabelle zum Nachmessen markierten Einträgen die aktuelle Karte Feststoff der nachzumessenden Statistikruns. Danach können diese Probenplattformen entsprechend dosiert und gewogen werden.
Einzelwerte nachmessen	Messung der mit Nachmessen vorbereiten ausgewählten Proben starten
Einträge löschen	In markierten Tabellenzeilen alle Einträge der markierten Positionen in den Spalten ab Einw. und rechts davon löschen

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Proben einer Feststoffanalyse nachmessen [▶ 100]
- 📖 Methodenparameter für Probengeber für Graphitofentechnik (Feststoffanalytik) [▶ 52]

6.9.2 Feststoffproben messen

Manuelle Feststoffanalyse

Wenn Sie die Proben mit Hilfe des manuellen Probengebers SSA 6(z) in den Graphitrohröfen platzieren, müssen Sie die Einwaage auf einer separaten Waage bestimmen. Tragen Sie die Einwaagen auf der Karte **Feststoff** ein.

Automatische Feststoffanalyse bei zeitunkritischen Proben

Bei zeitunkritischen Proben können viele Präparationsschritte zusammengefasst werden. Die Verarbeitung von zeitunkritischen Proben wird durch Deaktivierung der Option **Ablauf für zeitkritische Proben** im Fenster **Methode | Probenzufuhr** spezifiziert.



Bei Verwendung des SSA 600 mit automatischer Flüssigdosierung kann die Dosierung von Modifikatoren und Standards während der Abarbeitung der Sequenz erfolgen und muss nicht von Hand vorbereitet werden. Dabei können bis zu vier Standards und drei Modifikatoren auf dem SSA 600 platziert werden. Wenn mehr Standards oder Modifikatoren benötigt werden, müssen diese manuell pipettiert werden. Bei der thermischen Vorbehandlung werden die Modifikatoren unter Verwendung der Flüssigdosiereinheit automatisch auf die Plattformen aufgebracht und anschließend für die Analyse im Graphitrohröfen vorbereitet.

Eine automatische Analyse ohne Eingriff des Anwenders erfordert für jede Einzelmessung eine Probenplattform:

Gesamtanzahl Probenplattformen = Anzahl Analysenproben x Anzahl Analysenlinien x Anzahl Probenmessung in einer Statistik-Serie


Wenn die Probenanzahl die in der Methode eingestellte Anzahl Plattformen überschreitet, werden die Plattformen nach Abarbeitung neu dosiert.

- ▶ Erstellen Sie eine Methode und eine Sequenz.
- ▶ Wechseln Sie auf die Karte **Feststoff** im Hauptfenster.

- ✓ In der Spalte **Pos** wird die Probenbelegung auf den Probengebertellern angezeigt. Diese Belegung wird programmintern ermittelt und kann nicht geändert werden.
- ▶ Starten Sie die Abarbeitung der Sequenz mit einem Klick auf .
- ▶ Präparieren Sie entsprechend den Programmanweisungen die Probenplattformen. Legen Sie Proben auf und pipettieren Sie gegebenenfalls flüssige Komponenten.
 - ✓ Wenn alle Proben vorbereitet bzw. die in der Methode eingestellte Anzahl Probenplattformen belegt sind, startet die Messung.
- ▶ Wenn nach dem ersten Messdurchlauf noch Proben übrig sind, markieren Sie die entsprechenden Probenzeilen in der Sequenz mit der Maus. Mehrfachmarkierungen nehmen Sie mit gedrückter Umschalt- bzw. Strg-Taste vor.
- ▶ Setzen Sie die Messung mit  fort und hängen Sie die Ergebnisse an die vorhandenen an, indem Sie im Fenster **Messung starten** die Option **an Datei anhängen** aktivieren.
- ▶ Präparieren Sie die Probenplattformen erneut entsprechend den Programmanweisungen. Danach startet automatisch die Messung.
- ▶ Fahren Sie fort, bis alle Proben abgearbeitet sind.


Automatische Feststoffanalyse bei zeitkritischen Proben

Proben, die sich leicht verflüchtigen oder wegen hoher Adhäsion aus der Plattform "kriechen" und Rand und Griff der Plattform benetzen, erfordern ein zügiges Abarbeiten der Plattform nach dem Probenauftrag. Wenn Sie solche Proben analysieren möchten, aktivieren Sie die Option **Ablauf für zeitkritische Proben** im Fenster **Methode | Probenzufuhr**.

- ▶ Erstellen Sie eine Methode und eine Sequenz.
- ▶ Starten Sie die Abarbeitung der Sequenz mit einem Klick auf .
- ▶ Folgen Sie den Anweisungen zur Probenvorbereitung auf dem Bildschirm. Es wird eine Probe präpariert und gemessen. Danach erfolgt die Aufforderung für die Vorbereitung der nächsten Probenplattform, bis alle Proben abgearbeitet sind.

Der Messablauf für zeitkritische Proben erfordert die ständige Anwesenheit des Anwenders.

Sehen Sie dazu auch

-  Methodenparameter für Probengeber für Graphitofentechnik (Feststoffanalytik) [▶ 52]

6.9.3 Daten bereits vorbereiteter Proben speichern

Bei einer Änderung in der Sequenz oder Methode, wird die Feststofftabelle neu konfiguriert und die Probenverteilung auf den Plattformen neu vorgenommen. Dabei gehen vorhandene Wägedaten verloren. Um das zu verhindern, können diese Daten zwischengespeichert werden. Es stehen dafür zwei Speicherplätze für zusammenhängende Blöcke zur Verfügung.

- ▶ Markieren Sie die bereits vorbereiteten Proben. Die Proben müssen in einem zusammenhängenden Block stehen.
- ▶ Klicken Sie auf **Laden/Speichern**, um das Fenster **Laden/Speichern SSA600-Teller** zu öffnen.

- ▶ Wählen Sie einen der beiden **Speicher** aus.
- ▶ Klicken Sie auf **Speichern markierte Einträge**.
- ▶ Verlassen Sie das Fenster mit Klick auf **Schließen**.
- ▶ Nach dem Neuaufbau der Tabelle **Feststoff** im Hauptfenster öffnen Sie das Fenster **Laden/Speichern SSA600-Teller** erneut.
- ▶ Wählen Sie den Speicher.
- ▶ Geben Sie im Listenfeld die Zeilennummer der Tabelle ein, ab welcher der Datenblock eingefügt werden soll.
- ▶ Klicken Sie **Laden Einträge ab Zeile**.
- ▶ Verlassen Sie das Fenster mit Klick auf **Schließen**.
 - ✓ Der Datenblock wird ab der vorgegebenen Zeile in die **Feststoff**-Tabelle eingefügt. Prüfen Sie, ob Sie die Plattformen umsortieren müssen.

6.9.4 Proben einer Feststoffanalyse nachmessen

Bei einer Feststoffanalyse können sowohl Einzelmessungen als auch die Messungen für ein Element in einer Probe wiederholt werden.

Wiederholung von Einzelmessungen

Im Hauptfenster auf die Karte **Ergebnisse** wechseln.

- ▶ Mit einem Doppelklick auf die Probe mit dem Ausreißer das Fenster **Probeneinzelwerte** öffnen.
- ▶ In der Tabelle den Ausreißer markieren.
- ▶ Auf **Markieren zum Nachmessen** klicken.
- ▶ Das Fenster **Probeneinzelwerte** schließen.
- ▶ Auf die gleiche Weise alle weiteren Ausreißer anderer Proben markieren.
- ▶ Auf die Karte **Feststoff** zurückkehren.
- ▶ Auf **Nachmessen vorbereiten** klicken.
 - ✓ Die abzuarbeitende Tabelle wird erstellt. Dabei werden ggf. vorhandene Einzelwerte und andere Einträge gelöscht, da die Tabelle neu strukturiert wird. Wenn nötig, sollten die Daten vorher gespeichert werden.
- ▶ Die Proben entsprechend der Plattformbelegung für die Analyse vorbereiten.
- ▶ Die Messung mit Klick auf **Einzelwerte nachmessen** starten.
 - ✓ Auf der Karte **Ergebnisse** werden die auf der Grundlage der nachgemessenen Ausreißer Neuberechneten Probenergebnisse an das Ende der Tabelle angehängt.

Neubestimmung eines Elements in einer Probe

- ▶ In der Feststofftabelle alle Einzelmessungen des Probenelements markieren.
- ▶ Auf **Zeile(n) messen** klicken.
- ▶ Im Fenster **Messung starten** einen neuen Dateinamen eingeben oder das Anhängen der Daten an die vorhandene Datei vereinbaren.
- ▶ Messung mit **OK** starten.

Feststofftabelle zeilenweise messen (Methodenerarbeitung)

In der Methodenerarbeitung kann die Feststofftabelle zeilenweise abgearbeitet werden. Die Messung eines Elementes einer Probe muss jeweils mit dem Run #1 oder dem, auf den zuletzt gemessenen Statistikrun, folgenden Run begonnen werden.

- ▶ In der Feststofftabelle die Einzelmessungen des Probenelements markieren.
- ▶ Auf **Zeile(n) messen** klicken.
- ▶ Im Fenster **Messung starten** einen neuen Dateinamen eingeben oder das Anhängen der Daten an die vorhandene Datei vereinbaren.
- ▶ Messung mit **OK** starten.

Sehen Sie dazu auch

- 📄 Daten bereits vorbereiteter Proben speichern [▶ 99]

6.10 System spülen

Spülschritte werden für die verschiedenen Systeme über den Menüpunkt **Routine | Spülen** gestartet. Darüber hinaus gibt es in den jeweiligen Zubehör- und Technik-Fenstern wie Probengeber und Hydridsystem ebenfalls Spülbefehle.

Flammentechnik


Der Probengeber taucht in die Spülposition und spült die Kanüle. Ist als Zubehör ein Injektionsschalter angeschlossen, wird dieser geöffnet. Damit ist auch das Spülen des Probenweges gewährleistet. Durch die Spülpumpe wird stets frische Spüllösung nachgeliefert.

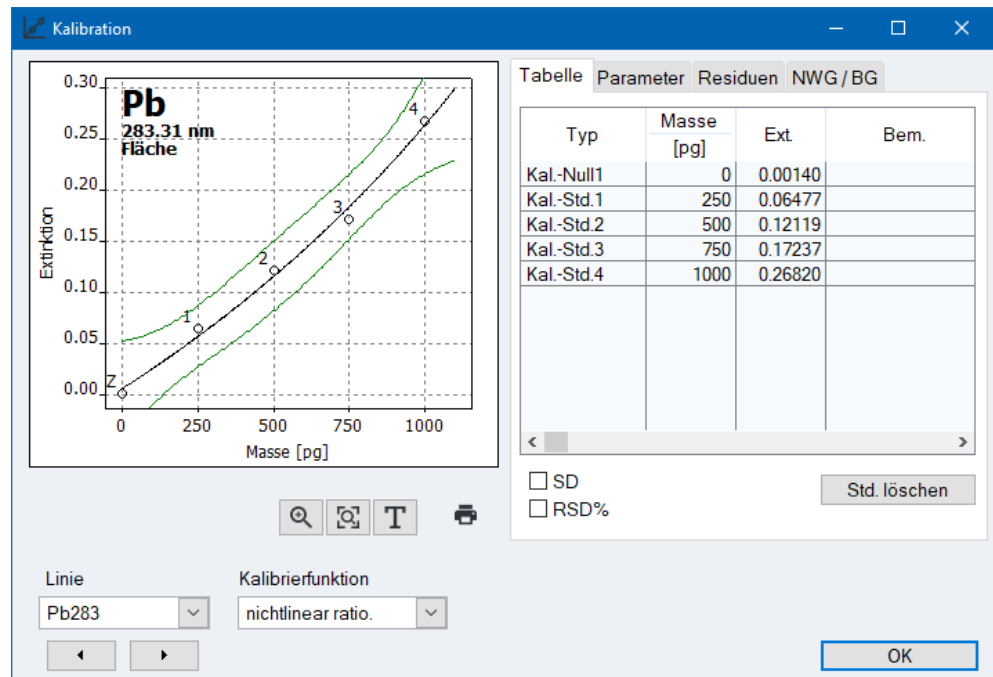
Hydridtechnik/HydrEA-Technik

Das Hydridsystem mit Säure (ggf. auch mit Reduktionsmittel) spülen. Die Spülparameter für das Hydridsystem werden im Fenster **Methode | Hydrid** festgelegt.

7 Kalibration

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

Das Fenster **Kalibration** öffnen Sie mit Klick auf  in der Symbolleiste oder mit dem Menübefehl **Methodenentwicklung | Kalibration**.



Das Fenster **Kalibration** enthält folgende Informationen:

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

Auswahlfelder im Fenster Kalibration

Option	Beschreibung
Linie	Elementlinie auswählen, deren Kalibration angezeigt wird
Kalibrierfunktion	Anzeige der verwendete Kalibrierfunktion (im Fenster Methode Kalib. eingestellt) Die Kalibrierfunktion ist spezifisch für jede Elementlinie. Die Funktion kann im Listenfeld neu gewählt werden. Dementsprechend wird die Kalibration Neuberechnet.

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Kalibrierparameter spezifizieren (Fenster Methode | Kalib.) [▶ 54]

7.1 Kalibrierkurve anzeigen

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

Farbige Kennzeichnungen

Messpunkte sind auf folgende Weise gekennzeichnet:

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



Die Kurven sind ebenfalls farbig markiert:

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

Hinweise zum Prognose- bzw. Konfidenzband


Die Lage des Prognosebandes ist abhängig von der gewählten statistischen Sicherheit und ein Maß für die Güte der Kalibration, von der letztlich auch die statistische Sicherheit der Analysenproben-Messungen abhängt. Außerdem dient das Prognoseband zur Feststellung von ausreißerverdächtigen Kalibrierpunkten. Die statistische Sicherheit wird im Fenster **Methode | Statistik** gewählt. Die Auswahl der Anzeige von Prognose- oder Konfidenzband erfolgt im Fenster **Optionen | Kalibration**.

Kalibrierkurve vergrößern

Nach einem Klick auf  kann mit gedrückter linker Maustaste ein Ausschnitt der Kalibrierkurve vergrößert werden. Ein Klick auf  macht die Vergrößerung wieder rückgängig.

Notiz einfügen

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


- ▶ Klicken Sie auf  und ziehen Sie mit gedrückter Maustaste den Rahmen für das Textfeld in der Grafik auf.
- ▶ Geben Sie den Text im Eingabefenster ein.
 - ✓ Der Text wird auf der Grafik angezeigt.

Nach einem Doppelklick auf ein vorhandenes Textfeld, kann der Text editiert werden.

Kalibrierkurve drucken

Klicken Sie zum Druck der Kalibrierkurve und der Kalibrierdaten auf .

Sehen Sie dazu auch

-  Statistikparameter spezifizieren (Fenster Methode | Statistik) [▶ 61]
-  Allgemeine Einstellungen für die Kalibration und Blindwertkorrektur [▶ 180]

7.2 Kalibrierergebnisse anzeigen

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

Ausgabe der Messwerte der Kalibrierstandards – Karte Tabelle

Auf der Karte **Tabelle** werden die Wertepaare der Standards (eingegebene Konzentration/Messwert) ausgegeben.

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

Um einzelne Kalibrierstandards aus der Berechnung auszuschließen, markieren Sie den Standard mit Mausclick in der Tabelle und klicken dann auf Std. löschen. Der Messwert wird dabei nicht endgültig gelöscht und kann jederzeit reaktiviert werden.

Anzeige der Kalibrierdaten – Karte Parameter

Kalibrierdaten werden angegeben, soweit sie sinnvoll berechenbar sind.

Parameter	Beschreibung
R ² (adj.)	Bestimmtheitsmaß
Anstieg	Anstieg der Kalibrierfunktion
Verf.-SD	Verfahrensstandardabweichung
Char.Konz. / Char.Masse	Charakteristische Konzentration bzw. Masse (Konzentration bzw. Masse, die nötig ist, um 1% der vorhandenen Lichtenergie im Atomisator zu absorbieren – entspricht einem Extinktionswert von ca. 0,0044)

Karte Residuen

In der Grafik auf der Karte **Residuen** werden die Abweichungen der Kalibrierpunkte von der berechneten Kalibrierkurve sowie den Grenzen des Prognosebandes dargestellt.

Nachweis- und Bestimmungsgrenzen der aktuellen Kalibration – Karte NWG/BG

Die Nachweis- und Bestimmungsgrenzen des AAS können auf Basis der aktuellen Kalibrierergebnisse bestimmt werden.

Werte für das Leerwertverfahren und Kalibrierkurvenverfahren werden in diesem Bereich nur angezeigt, wenn das AAS bereits kalibriert worden ist.

Parameter	Beschreibung
Nachweisgrenze	Die Masse (Konzentration) des zu analysierenden Elements, die mit einer vorgegebenen statistischen Sicherheit noch nachgewiesen werden kann
Bestimmungsgrenze	Die kleinste Masse (Konzentration) des zu analysierenden Elements, die noch mit einer vorgegebenen statistischen Sicherheit bestimmt werden kann
SD Leerwert-NWG	Nur bei Leerwert-Verfahren Gemessene Standardabweichung des Leerwerts (IDL-Probe)
Berechnen	Berechnung der Nachweis- und Bestimmungsgrenzen starten, z. B. nach einer Änderung der Kalibrierkurve

Kalibrierkurven-Verfahren

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

- Anzahl und Lage der Kalibrierpunkte
- Anzahl der Wiederholungsmessungen pro Standard

- Qualität der Ausgleichung
- Anstieg der Kalibrierkurve
- Relative statistische Sicherheit (Wahrscheinlichkeits-Niveau)

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

Leerwert-Verfahren

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

Berechnungsvorschrift für das Leerwert-Verfahren:

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

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

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

Die Faktoren und Messwiederholungen können Sie bei Bedarf im Fenster **Optionen | Kalibration** variieren.

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Messungen und Aktionen in einer Sequenz spezifizieren [▶ 73]
- 📖 Allgemeine Einstellungen für die Kalibration und Blindwertkorrektur [▶ 180]

7.3 Kalibrierkurve modifizieren


Eine vorhandene Kalibrierkurve können Sie im Fenster **Kalibration** modifizieren durch:

- Wechsel der verwendeten Kalibrierfunktion
- Deaktivieren/Aktivieren von Standards

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

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

Das Programm berechnet die Kalibrierkurve neu und stellt die geänderte Kurve dar.

Die geänderten Kalibrierparameter werden auf die Ergebnisse angewendet, wenn Sie den Menübefehl **Routine | Neuberechnen** aufrufen oder in der Werkzeugleiste auf  klicken.



Sehen Sie dazu auch

- 📖 Analysenergebnisse Neuberechnen [▶ 85]

7.4 Kalibrierstandards durch Nachmessen ersetzen

Sie können Ausreißer in der Kalibration ersetzen, indem Sie die Sequenzzeilen erneut messen, die betreffende Zeile ersetzen und die Ergebnisse nachberechnen lassen:

- ▶ Stellen Sie den neu zu messenden Standard bereit. Bei Verwendung eines Probengebers stellen Sie den Standard auf die Position, die in der Sequenz angegeben ist.

- ▶ Markieren Sie den betroffenen Standard in der Sequenz und starten Sie die Messung der Sequenzzeile mit einem Klick auf .
- ✓ Der Werte des neu gemessene Standard erscheint am Ende der Proben-tabelle.
- ▶ Führen Sie auf den zu ersetzenden Standard einen Doppelklick aus.
- ✓ Das Fenster **Probeneinzelwerte** erscheint.
- ▶ Aktivieren Sie die Option **Ersetzen durch Eintrag Nr.** und geben Sie im Eingabefeld die Zeilennummer des nachgemessenen Werts ein.
- ▶ Starten Sie die Nachberechnung mit einem Klick auf  und geben Sie die Zeilen ein, die Neuberechnet werden müssen.
- ✓ Bei der Berechnung der Kalibration wird der betroffene Standard durch den neuen Wert ersetzt. Für alle Berechnungen, die auf die Neuberechnete Kalibration folgen, wird die neue Kalibration angewendet.

Sehen Sie dazu auch

-  Analysenergebnisse Neuberechnen [▶ 85]


8 Qualitätskontrolle

Die Qualitätskontrolle dient der Überwachung der Messergebnisse einer Methode über einen längeren Zeitraum. Zu diesem Zweck werden in einer Methode spezielle QC-Proben unterschiedlichen Typs vereinbart, die in einer Messreihe mitgeführt werden. Bei der Auswertung der QC-Proben werden die Ergebnisse mit vorhergehenden QC-Proben verglichen.



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

Im Fenster **Methode | QCS** definieren Sie den Typ der QC-Proben und deren Parameter und in der **Sequenz** das Mitführen der QC-Probe innerhalb der Messreihe.

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

Das Fenster **QC** öffnen Sie mit Klick auf  in der Symbolleiste oder mit dem Menübefehl **Methodenentwicklung | QC**.


Sehen Sie dazu auch

-  Messungen und Aktionen in einer Sequenz spezifizieren [▶ 73]
-  Qualitätskontrollproben spezifizieren (Fenster Methode | QCS) [▶ 63]

8.1 QC-Karten anzeigen

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

Optionen/Anzeigen

Feld / Option	Beschreibung
Kontrollprobe	QC-Probentyp für die Anzeige auswählen
Linie	Elementlinie für die Anzeige auswählen
Angezeigte Werte	Anzahl der angezeigten Werte und Datum des ersten und letzten angezeigten Wertes
Einträge	Gesamtanzahl der Einträge auf der aktuellen QC-Karte und Datum des ersten und letzten Wertes
x(max)	Diese Anzahl wird in der in der Grafik dargestellt
	QC-Grafik einschließlich der alphanumerischen Daten und Messwerte drucken

Grafikbereich

Farbe	Beschreibung
Gelber Bereich	Vorperiode
Hellgraue waagerechte Linie	Mittelwert, berechnet aus der Vorperiode
Rote waagerechte Linien	Obere und untere Kontrollgrenze (K), berechnet aus der Vorperiode (3 Sigma)
Grüne waagerechte Linien	Berechnete Warngrenzen (W; 2 Sigma)

Farbe	Beschreibung
Schwarze kleine Kreise	Messpunkte

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

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

8.2 Parameter der QC-Karten

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

Kartentyp

QC-Probentyp	Art der QC-Auswertung
QC-Probe	Mittelwerte
QC-Std.	Wiederfindungsraten
QC-Stock	Wiederfindungsraten
QC-Trend	Trends
QC-Matrix	Spannweiten Präzisionen
QC-Blindwert	Keine Auswahl vorgesehen. Es wird die Extinktion der Blindwerte angezeigt.

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

Grafikeinstellung

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

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

Sehen Sie dazu auch

 Qualitätskontrollproben spezifizieren (Fenster Methode | QCS) [▶ 63]

8.3 Einträge und Grenzen der QC-Karten

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

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

Karten erneuern

Wenn eine angezeigte Karte (fast) voll ist, das heißt die maximale Anzahl Einträge erreicht ist, kann sie erneuert werden. Es gibt verschiedene Möglichkeiten die Vorperiode bei Kontrollkarten zu erneuern.


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

9 Gerät und Zubehör steuern und kontrollieren

9.1 Spektrometer

Das Fenster **Spektrometer** dient zur Überprüfung der Spektrometerfunktionen und Methodenerarbeitung. Folgende Daten können eingestellt bzw. abgefragt werden:

- Kontrolle der Lampen
- Bestückung des Lampenwechslers
- Einlaufverhalten von Lampen und D2HKL (Deutierumhohlkatodenlampe)
- Lampenspektrum
- Optimierung des Zeeman-Magnetfelds

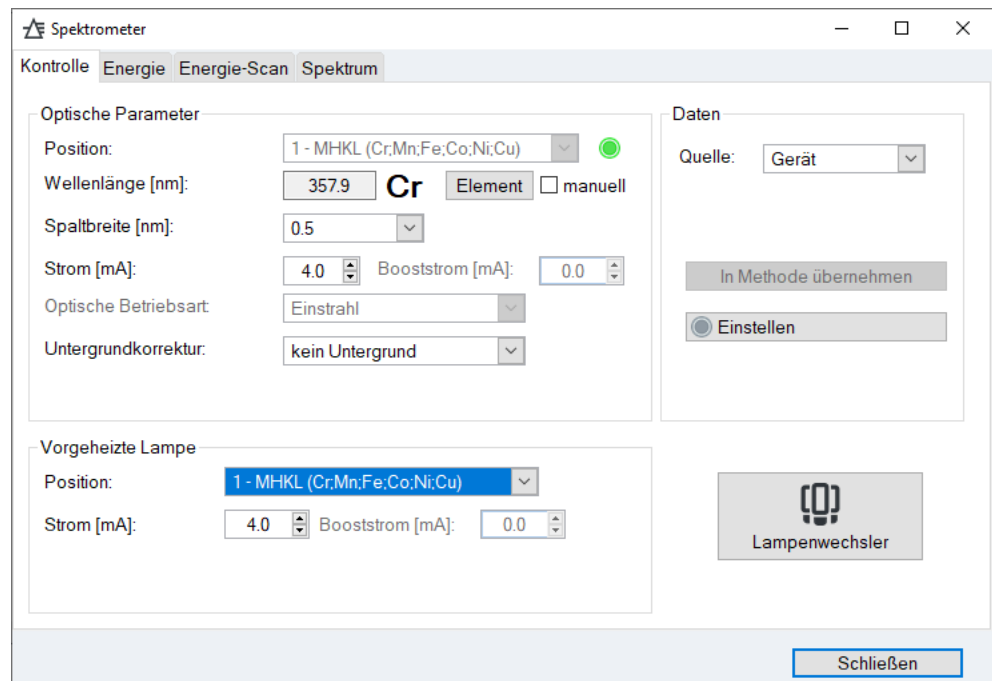
Das Fenster **Spektrometer** öffnen Sie mit dem Menübefehl **Methodenentwicklung | Spektrometer** oder mit Klick auf .

Alle Spezifikationen und Optimierungen in diesem Fenster erfolgen für auf der Karte **Kontrolle** eingestellten optischen Parameter und die dort ausgewählte Elementlinie.

9.1.1 Optische Parameter am Spektrometer einstellen

Im Fenster **Spektrometer | Kontrolle** stellen Sie optische Parameter des Spektrometers ein:

- Wellenlänge (Elementlinie)
- Spaltbreite
- Lampenstrom
- Art der Untergrundkorrektur
- Optische Betriebsart
- Vorheizen einer Lampe



Daten auswählen

In der Liste **Quelle** werden die anzuzeigenden bzw. zu bearbeitenden Daten ausgewählt:

Option	Beschreibung
Elementlinie	Elementlinie aus der aktuellen Methode auswählen

Option	Beschreibung
Gerät	Daten der letzten Analyseneinstellung anzeigen Die Daten müssen nicht mit den in der Methode eingestellten Elementlinien übereinstimmen.

Die optischen Parameter werden entsprechend der gewählten Daten aktualisiert. Andere Elemente und deren Linien, die nicht in der Methode enthalten sind, können mit einem Klick auf **Element** aus dem Periodensystem mit den im Lampenwechsler verfügbaren Elementen ausgewählt werden.

Optische Parameter einstellen

In der Gruppe **Optische Parameter** werden die Parameter der gewählten Elementlinie angezeigt und editiert.

Option	Beschreibung
Position	Anzeige der Position der eingestellten Lampe und des Lampentyps Wenn das Element in mehreren Lampen des Wechslers vorhanden ist, wird nach Klick auf Einstellen jeweils die erste im Wechsler verfügbare Lampe angefahren. Wenn eine andere Lampe gewünscht ist, kann diese in der Liste Position ausgewählt werden.
Wellenlänge	Anzeige der ausgewählten Linie Nach Aktivieren der Option manuell kann die Wellenlängenangabe editiert werden, um bspw. ein beim Spektren-Scan ermittelte Peakablage zu berücksichtigen.
Spaltbreite	Spektrale Spaltbreite des Monochromators auswählen
Strom	Anzeige des verwendeten Lampenstrom
Booststrom	Anzeige des Boost-Strom bei Superhohlkathodenlampen
Optische Betriebsart	Auswahl der Betriebsmodi: Einstrahl-, Zweistrahl- oder Emissionsmodus
Untergrundkorrektur	Auswahl der Untergrundkorrektur Die Auswahl der Zeeman-Modi steht nur für Zeeman-AAS zur Verfügung.

Mit einem Klick auf **Einstellen** werden die ausgewählte Linie sowie die optischen Parameter eingestellt. Der Lampenwechsler wird auf die nötige Position gefahren und das Spektrometer auf die Wellenlänge eingestellt. Dabei werden gleichfalls eine Peaksuche und ein Nullabgleich vorgenommen. Konnte beides korrekt ausgeführt werden, leuchtet das Kontroll-Lämpchen grün, anderenfalls rot.

Mit Klick auf **In Methode übernehmen** übertragen Sie die editierten Daten in die Methode. Es wird empfohlen, die geänderte Methode zu speichern.

Vorgeheizte Lampe

Für die Methodenerarbeitung kann eine weitere Lampe vorgeheizt werden, um die Wartezeiten, die mit dem Einlaufverhalten der Lampen verbunden sind, zu verkürzen.

Option	Beschreibung
Position	Lampenposition der vorzuheizenden Lampe einstellen
Strom	Lampenstrom der Lampe
Booststrom	Boost-Strom, wenn eine Superhohlkathodenlampe vorgeheizt wird

Auch diese Einstellung wird mit einem Klick auf **Einstellen** realisiert.

Schaltfläche Lampe/Element auswählen

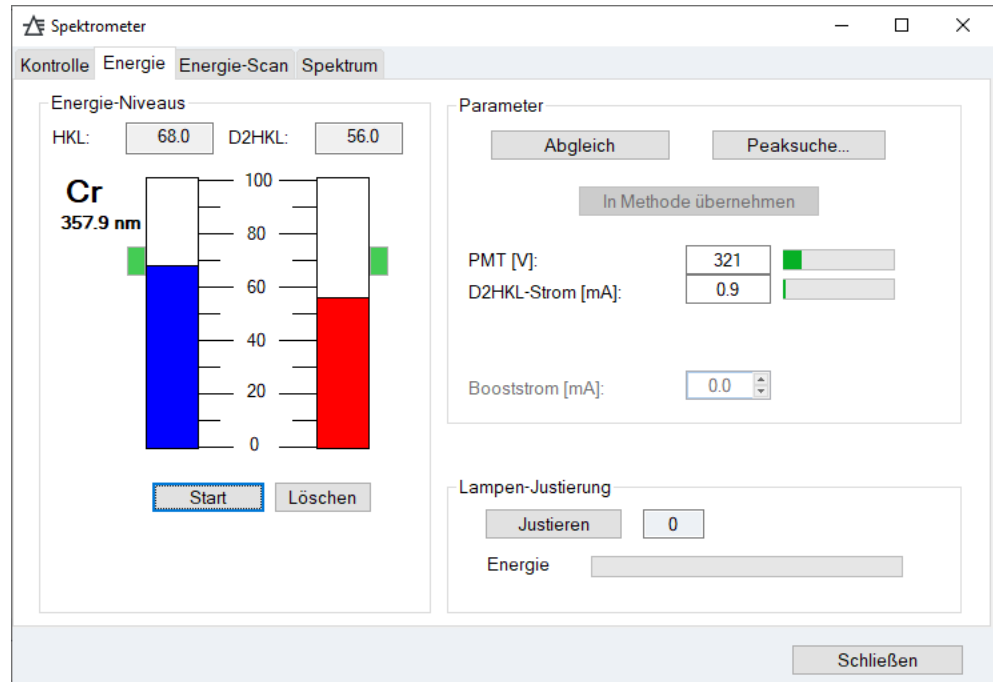
Mit Klick auf **Lampe/Element auswählen** öffnen Sie das Fenster zum Bestücken des Lampenwechslers.

Sehen Sie dazu auch

- 📄 Lampenwechsler bestücken [▶ 11]
- 📄 Untergrundkorrekturen für Zeeman-AAS ZEEmit 700/650 P [▶ 119]
- 📄 Untergrundkorrektur für ZEEman-AAS ZEEmit 700 Q [▶ 122]

9.1.2 Lampenenergie kontrollieren (novAA 400 P/ZEEmit)

Im Fenster **Spektrometer | Energie** erfolgt die Kontrolle und Steuerung der Lampenenergie, für die auf der Karte **Kontrolle** eingestellten optischen Parameter.



Energie-Niveaus

Option/Schaltfläche	Beschreibung
HKL	Aktueller Energiepegel des Linienstrahlers am Photomultiplier in % numerisch und grafisch In der Grafik gibt es zusätzlich zum blauen aktuellen Pegel noch den grauen gemessenen Maximalpegel (d.h. den durch Justierung erreichten Höchstwert). Die Anzeige erfolgt für HKL, S-HKL und Emissionssignal.
D2HKL	Aktueller Energiepegel des Untergrundstrahlers D2HKL Grafisch wird das der aktuelle Pegel mit einem roten Balken angezeigt.
Start	Messung starten (z. B. für Lampenjustierung)
Löschen	Messwerte löschen
Stopp	Messung stoppen

Parameter

Option	Beschreibung
PMT	Aktuelle Spannung des Empfängers (Photomultipliers) in Volt Wertebereich: max. 600 V
D2HKL-Strom	Mittlerer Lampenstrom der Deuterium-Hohlkatodenlampe Wertebereich: 5 ... 35 mA

Die Energieanpassung zwischen der HKL-Lampe und des Untergrundstrahlers D2HKL erfolgt über zwei getrennte Verstärker-Einstellungen.

Option	Beschreibung
Abgleich	Spannung des Photomultipliers und D2HKL-Strom auf 65 bis 75 % Energie-Niveau abgleichen
Peaksuche	Tatsächliches Linienmaximum der eingestellten Spektrallinie und seine Abweichung vom Tabellenwert (Ablage) bestimmen Es erscheint das Fenster Peaksuche in dem die Ablage grafisch und numerisch angezeigt wird. Die Gerätewellenlänge wird entsprechend dem gefundenen optischen Linienmaximum korrigiert und ein automatischer Geräteabgleich ausgeführt.
In Methode übernehmen	Parameter in die Methode übernehmen

Brennereinstellung für Flammtechnik

Die Brennerhöhe kann mit Hilfe der Pfeiltasten am Eingabefeld **Brennerhöhenverstellung** variiert werden. Die Zunahme und Abnahme des Signals wird mit dem daneben befindlichen Balken symbolisiert.

Justierung der HKL

Die Justierung der HKL erfolgt automatisch nach Klick auf die Schaltfläche **Justierung** in der Gruppe **Lampen-Justierung**.

Die Justierung läuft nach dem gleichen Algorithmus wie die Justierung im Fenster **Lampenwechsler** ab.

Option	Beschreibung
Optische Betriebsart	Verwendete optische Betriebsart
Untergrundkorrektur	Art der Untergrundkorrektur
PMT	Spannung des Photomultipliers
D2Strom	Strom der Deuterium-HKL (falls für Untergrundkorrektur verwendet)
D2-Verstärkung	Verstärkung des Signals der Deuterium-HKL (falls für Untergrundkorrektur verwendet)
Brennerhöhenverstellung	Brennerhöhe in der Flammtechnik

Energie am Empfänger (Photomultiplier) abgleichen

Verfahren Sie wie folgt, um die gemessene Energie abzugleichen:

- ▶ Nur im Emissionsbetrieb: Eine Lösung mit der höchsten zu erwartenden Konzentration des zu messenden Elements vom AAS ansaugen und zerstäuben lassen.
- ▶ Auf **Abgleich** klicken.
 - ✓ Die Spannung des Photomultipliers wird automatisch so eingestellt, dass das Signal des Linienstrahlers zwischen 65 und 75 % liegt. Wenn mit Untergrundkorrektur gearbeitet wird, wird anschließend der Strom der D2HKL so eingestellt, dass auch ihr Signal zwischen 65 und 75 % liegt. Wenn die Intensitäten beider Strahler aufeinander abgestimmt sind, werden alle Anzeigen aktualisiert.

D2HKL justieren

Die Justierung der D2HKL (Deuteriumhohlkatodenlampe) erfolgt im Fenster **Spektrometer | Energie**.

- ▶ Wählen Sie im Fenster **Spektrometer | Kontrolle** in der Liste **Untergrundkorrektur** die Option **nur D2HKL-Untergrund** und stellen Sie die Spektrometerparameter mit Klick auf **Einstellen** ein.
- ▶ Wechseln Sie auf die Karte **Energie**.

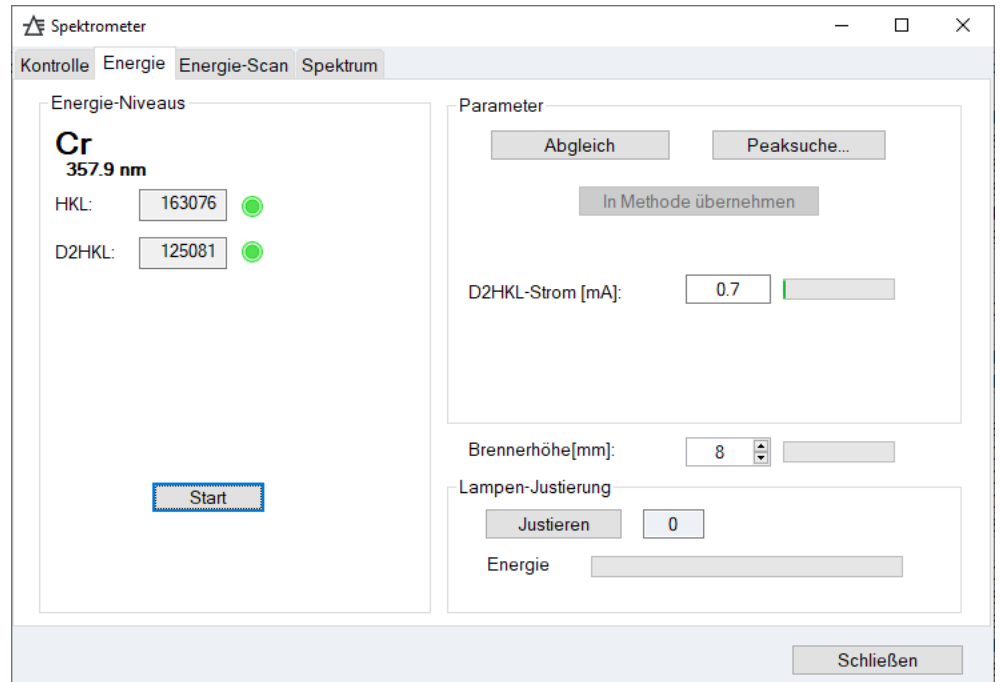
- ▶ Starten Sie mit Klick auf **Abgleich** den Abgleich der Spannung des Photomultiplier PMT und des D2HKL-Stroms mit dem Ziel, das Energieniveau auf 65 bis 75 % einzustellen.
- ▶ Beginnen Sie mit Klick auf **Start** die Energiemessung.
- ▶ Stellen Sie das Energie-Niveau (roter Balken) auf einen maximalen Wert ein.
Hinweis: Die grau hinterlegten Balken kennzeichnen das zuletzt erreichte Maximum und können mit der Schaltfläche **Löschen** gelöscht werden.
 - Durch Fokusverstellung: Verschieben Sie manuell den Lampenhalter in Achsrichtung leicht und ziehen Sie dann die Feststellschrauben an.
 - Durch Achsenjustierung: Verstellen Sie die Feinjustierschrauben an der D2HKL (siehe Hardware-Teil der Betriebsanleitung).
- ▶ Fahren Sie abhängig von eventuellen Fehleranzeigen bzw. dem D2-Strom fort:
 - Klicken Sie auf **Manuelle Verstärkungseinstellung**.
 - Wenn eine Fehleranzeige zu wenig Energie für die D2HKL ausweist, kontrollieren Sie zuerst den D2HKL-Strom. Steht er nach der Regelung nicht auf 35 mA, geben Sie den Wert 35 mA ein und wiederholen Sie mit Klick auf **Abgleich** die Regelung.
 - Wenn der D2HKL-Strom schon auf 35 mA steht, erhöhen Sie die BC-Verstärkung um eine Stufe (Stufen von 0 bis 4) und wiederholen Sie mit Klick auf **Abgleich** die Regelung.
 - Wenn eine Fehleranzeige zu viel Energie für die D2HKL ausweist (zu wenig Energie für die HKL), erhöhen Sie die HC-Verstärkung um eine Stufe (Stufen von 0 bis 4) und wiederholen Sie mit Klick auf **Abgleich** die Regelung.

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Lampenwechsler bestücken [▶ 11]
- 📖 Optische Parameter am Spektrometer einstellen [▶ 110]

9.1.3 Lampenenergie kontrollieren (novAA 800)

Im Fenster **Spektrometer | Energie** erfolgt die Kontrolle und Steuerung der Lampenenergie, für die auf der Karte **Kontrolle** eingestellten optischen Parameter.



Energie-Niveaus

Option	Beschreibung
HKL	Aktueller Energiepegel des Linienstrahlers (HKL oder Emissionssignal)
D2HKL	Aktueller Energiepegel des Untergrundstrahlers D2HKL
Start/Stop	Ermittlung des Energiepegels starten/stoppen Leuchten die Lampen grün, ist der Energiepegel in Ordnung. Wenn die Lampen rot leuchten, muss die Lampe nachjustiert werden.

Parameter

Option	Beschreibung
Abgleich	Nullabgleich Das Dunkelsignal der HKL wird ermittelt.
Peaksuche	Tatsächliches Linienmaximum der eingestellten Spektrallinie und seine Abweichung vom Tabellenwert (Ablage) bestimmen Es erscheint das Fenster Peaksuche in dem die Ablage grafisch und numerisch angezeigt wird. Die Gerätewellenlänge wird entsprechend dem gefundenen optischen Linienmaximum korrigiert und ein automatischer Geräteabgleich ausgeführt.
In Methode übernehmen	Parameter in die Methode übernehmen
D2HKL-Strom	Lampenstrom der D2HKL Der Wert kann nicht verändert werden.

Brennereinstellung für Flammenteknik

Die Brennereinstellung kann mit Hilfe der Pfeiltasten am Eingabefeld **Brennerhöhe** variiert werden. Die Signaländerung wird mit dem daneben befindlichen Balken symbolisiert.

Justierung der HKL

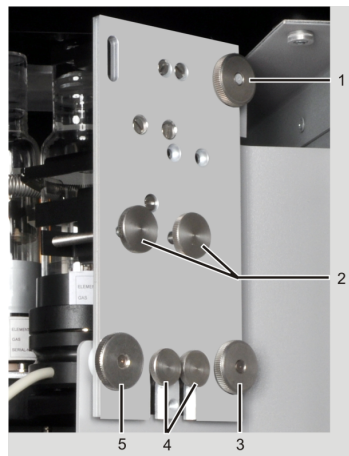
Die Justierung der HKL erfolgt automatisch nach Klick auf die Schaltfläche **Justierung** in der Gruppe **Lampen-Justierung**.

Die Justierung läuft nach dem gleichen Algorithmus wie die Justierung im Fenster **Lampenwechsler** ab.

D2HKL justieren

Die Justierung der Deuteriumhohlkatodelampe (D2HKL) nehmen Sie manuell vor. Beachten Sie auch die Hinweise zur Justierung in der Bedienungsanleitung novAA 800.

- ▶ Im Fenster **Spektrometer | Kontrolle** mit der Schaltfläche **Element** das Fenster **Element/Linie auswählen** öffnen.
- ▶ Eine Elementlinie im Wellenlängenbereich 190 ... 350 nm auswählen. Fenster mit **OK** schließen.
- ▶ In der Liste **Untergrundkorrektur** die Option **nur D2HKL-Untergrund** wählen.
- ▶ Spektrometerparameter mit **Einstellen** anfahren.
- ▶ Auf die Registerkarte **Energie** wechseln.
- ▶ Mit Schaltfläche **Start** die Energiemessung beginnen. Das Einlaufen der D2HKL abwarten.
- ▶ Das Energie-Niveau auf einen maximalen Wert einstellen:
 - Durch Fokusverstellung: Lampenhalter von Hand leicht nach oben bzw. unten verschieben, dann die Befestigungsmuttern (1, 3, 5 im Bild) festziehen.
 - Durch Achsenjustierung: Justierschrauben (2 im Bild) verstellen.
- ▶ Justiervorgang mit **Stopp** beenden und Fenster mit **Schließen** verlassen.
 - ✓ Die D2HKL ist justiert.



- 1, 3, 5 Befestigungsmuttern des Lampenhalters 2 Justierschrauben
 4 Befestigungsschrauben für Sicherungswinkel der Lampenfassung

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Lampenwechsler bestücken [▶ 11]

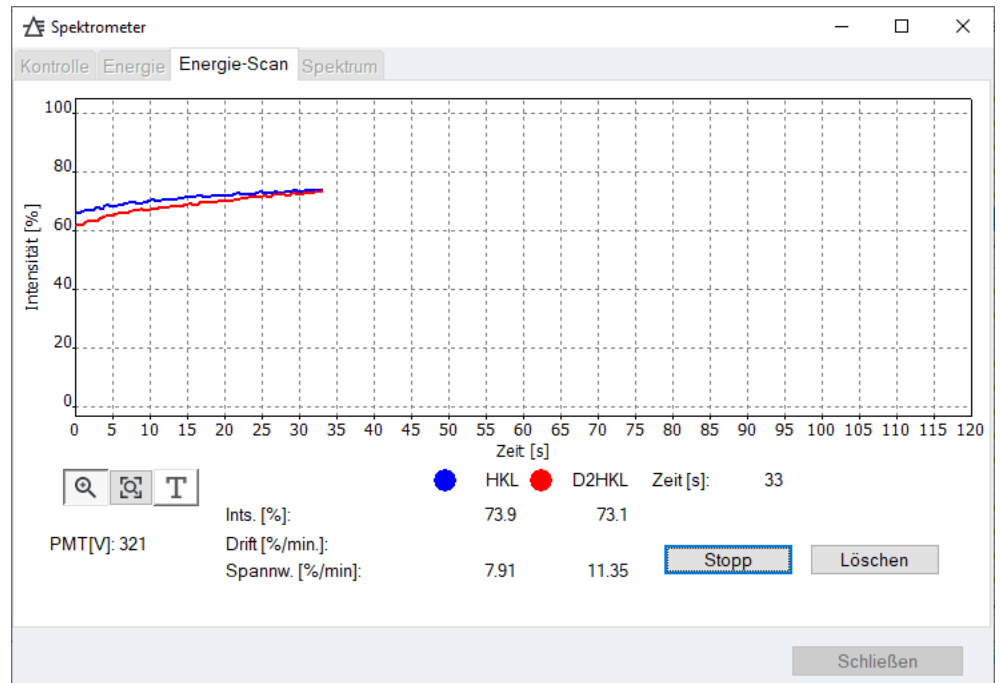
9.1.4 Lampendrift untersuchen

Im Fenster **Spektrometer | Energie-Scan** wird das Driftverhalten der aktiven Lampe und der Deuteriumlampe, wenn sie für die Untergrundkorrektur spezifiziert wurde, grafisch angezeigt und ausgewertet.

Die rote Linie markiert den Energieverlauf der D2HKL und die blaue Linie den Energieverlauf der aktiven Lampe. Die Signalfarben können im Fenster **Optionen | Ansicht** frei gewählt werden.

Für die Beurteilung des Driftverhaltens werden folgende Parameter angezeigt:

Option	Beschreibung
Ints.	Intensität der Lampenstrahlung für HKL und D2HKL
Drift [%/min.]	Verhältnis des Mittelwerts von 10 Werten vor einer Minute und des Mittelwerts von 10 Werten zum aktuellen Zeitpunkt
Spannweite	Differenz des größten und kleinsten Messwertes in der letzten Minute



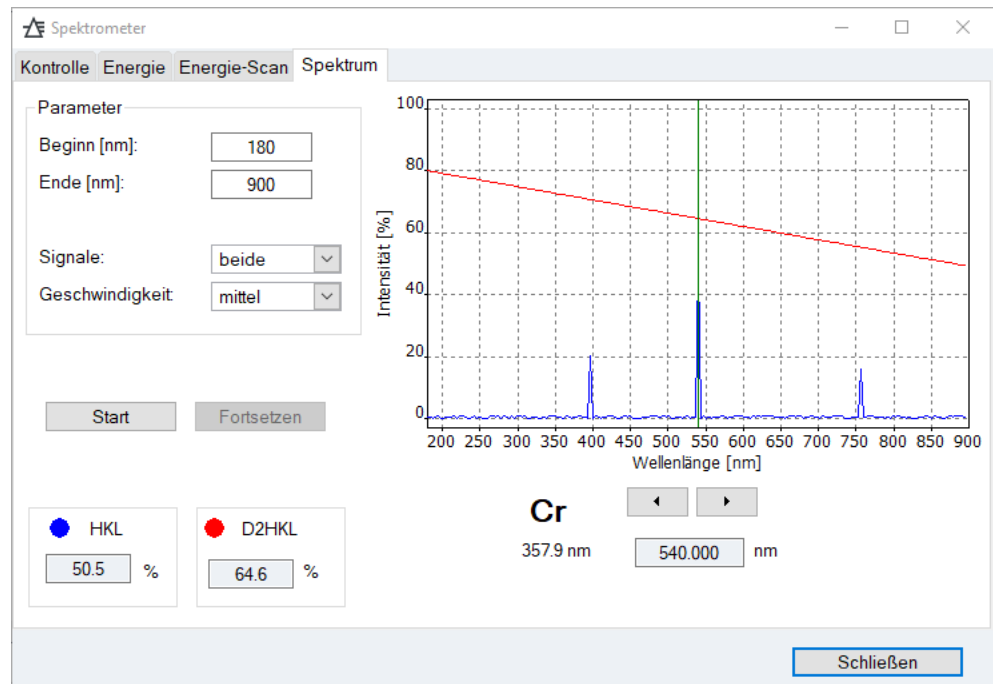
Sehen Sie dazu auch

Ansichtsoptionen [▶ 175]

9.1.5 Lampenspektrum aufnehmen und Peaks ermitteln

Im Fenster **Spektrometer** | **Spektrum** können Sie ein Lampenspektrum aufnehmen. Die Peaks werden im ausgewählten Wellenlängenbereich für die auf der Karte **Kontrolle** eingestellten optischen Parameter aufgenommen.

Gefundene Peakablagen für die aktive Hohlkathodenlampe können Sie auf der Karte **Kontrolle** korrigieren und in die Methode übernehmen.



Scaneinstellungen festlegen

Im Bereich **Parameter** legen Sie die Einstellungen für den Spektren-Scan fest:

Option	Beschreibung
Beginn	Anfangswellenlänge des aufzunehmenden Spektralbereichs
Ende	Endwellenlänge des Spektralbereichs
Geschwindigkeit	Scan-Geschwindigkeit des Monochromators: langsam , mittel (nicht novAA 800) oder schnell . Bei der Geschwindigkeit langsam wird durch die längeren Integrationszeiten das beste Signal-Rausch-Verhältnis erreicht.
Signale	Auswahl der angezeigte Lampenspektren (Nur bei D2HKL-Untergrund-Korrektur wählbar, wenn die D2HKL eingeschaltet ist) HKL Nur Signal der aktiven HKL D2HKL Nur Signal der D2HKL beide Signale der aktiven HKL und der D2HKL

Starten Sie mit den Schaltflächen den Spektren-Scan:

Schaltfläche	Beschreibung
Start/Stop	Start löscht die aktuelle Anzeige und startet die Messung. Die Schaltfläche wandelt sich in Stopp , mit der die Messung unterbrochen werden kann.
Fortsetzen	Unterbrochene Messung fortsetzen.

Das Ergebnis wird grafisch und numerisch dargestellt. Die Signalfarben können im Fenster **Optionen | Ansicht** frei gewählt werden.

Linie/Option	Beschreibung
Rote Linie	Signal der D2HKL
Blaue Linie	Signal der aktiven HKL

Linie/Option	Beschreibung
Grüne Senkrechte	Cursor für die numerische Anzeige von Wellenlänge und Intensitätswert Der Cursor kann mit den Tasten < und > unter der Grafik bewegt werden.
HKL	Numerische Werte von Wellenlänge und Intensität an der Cursorposition für die HKL
D2HKL	Numerischer Werte für D2HKL

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Ansichtsoptionen [▶ 175]
- 📖 Optische Parameter am Spektrometer einstellen [▶ 110]

9.1.6 Untergrundkorrekturen für Zeeman-AAS ZEE nit 700/650 P

Für die **Zeeman-AAS-Geräte** kann im Fenster **Methode | Auswertung** die Untergrundkorrektur mittels des Zeeman-Magnetfeldes festgelegt werden. Dabei sind folgende Betriebsarten für das Zeeman-Magnetfeld wählbar:

- Zeeman 2-Feld-Mode
- Zeeman 3-Feld-Mode
- Zeeman Dyn.-Mode

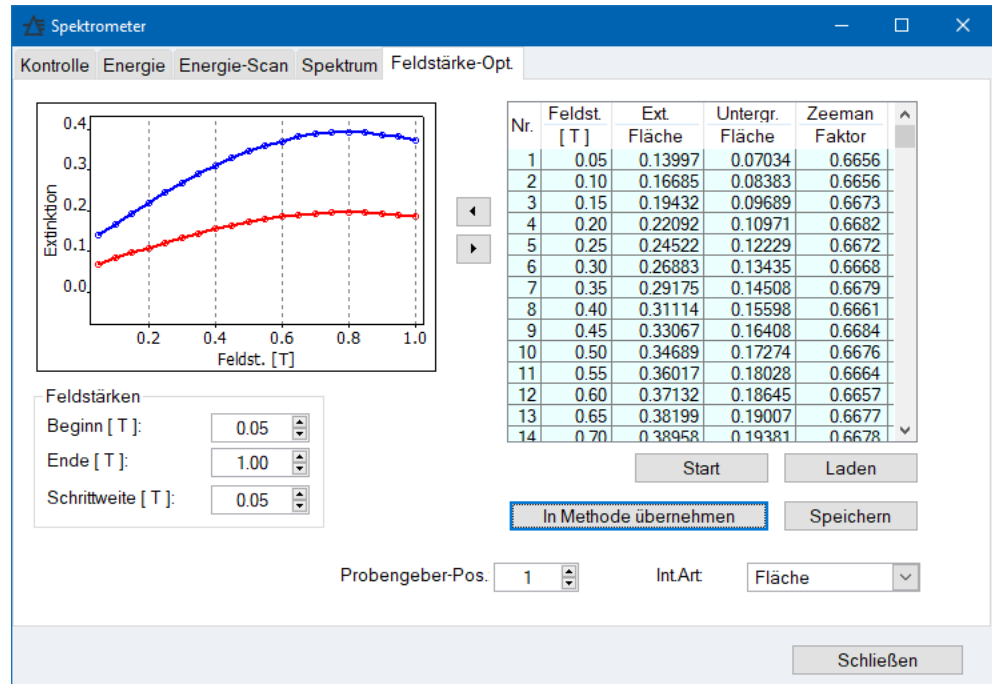
Die optimalen Feldstärken für die Zeeman-2-Feld- und Zeeman-3-Feld-Modi können mit einem Optimierungsprogramm gefunden werden.

Zeeman-Magnetfeld optimieren

Für die Messung in Graphitrohrtechnik mit Untergrundkorrektur in den statischen 2-Feld oder 3-Feld-Modi mit einem Spektrometer der ZEE nit-Serie gibt es Optimierungsprogramme, welche für ein gegebenes Analysenproblem automatisch eine Messreihe mit unterschiedlichen Feldstärken, von einem vorgegebenen Anfangs- bis zu einem vorgegebenen Endwert, durchfahren. Die dabei gemessenen Werte werden in einer Tabelle ausgegeben, die Signalverläufe können den während der Messung eingeblendeten Grafiken entnommen werden.

Bestimmen Sie mit diesen Informationen die optimale Feldstärke für Ihr Analysenproblem und übernehmen diesen Wert in die Methode. Für die Optimierung sollte eine Probe verwendet werden, die möglichst repräsentativ für die zu analysierenden Proben ist.

Die automatische Optimierung der Feldstärken erfolgt im Fenster **Spektrometer | Feldstärke-Opt.**



Parameter für Optimierung des 2-Feld-Modus

Im 2-Feld-Modus wird während der Messreihe die maximale Feldstärke variiert.

Parameter	Beschreibung
Beginn	Startwert für die Variation der maximalen Feldstärke (0,01 ... 1,00 T)
Ende	Endwert für die Variation der maximalen Feldstärke (0,01 ... 1,00 T)
Schrittweite	Schrittweite für die Variation der maximalen Feldstärke (0,05 ... 0,25 T)

Parameter für Optimierung des 3-Feld-Modus

Im 3-Feld-Modus wird während der Messreihe die mittlere Feldstärke variiert. Die maximale Feldstärke wird dabei fest eingestellt.

Parameter	Beschreibung
Beginn	Startwert für die Variation der mittleren Feldstärke (0,05 T)
Ende	Endwert für die Variation der mittleren Feldstärke (0,01 – (Max-0,05 T))
Schrittweite	Schrittweite für die Variation der maximalen Feldstärke (0,05 – 0,25 T)
Max.Feldstärke	Maximalfeldstärke (0,05 ... 1,00 T)

Parameter	Beschreibung
Probengeber-Pos.	Auf dieser Position des Probengebers befindet sich die Probe für die Optimierung.

Schaltflächen für die Optimierung

Schaltflächen	Beschreibung
Start	Messreihe starten
In Methode übernehmen	Gefundene Parameter in die Methode übertragen
Speichern	Ergebnisse der Optimierung speichern
Laden	Gespeicherte Optimierungsergebnisse laden

Anzeige der Optimierungsparameter Die Grafik zeigt die beiden Extinktionsverläufe für das Messsignal (blaue Kurve) und für den Untergrund (rote Kurve). In der Auswahlliste kann zwischen **Höhe** und **Fläche** der Signalauswertung gewählt werden.

Im Tabellenbereich werden folgende Werte angezeigt:

Parameter	Beschreibung
Nr.	Nr. des Optimierungsschritts
Feldst.	Wert für die Feldstärke
Ext. Höhe/Fläche	Extinktionswert für Auswertung der Signalthöhe oder –fläche
Untergr. Höhe/Fläche	Untergrund-Extinktionswert für Auswertung der Signalthöhe oder –fläche
Zeeman Faktor	Zeeman-Faktor (Ext/(Ext. + Untergr.))

Der Zeeman-Dynamik-Mode ASpect LS unterstützt bei den Spektrometern der ZEEnit-Reihe beim Standard-Kalibrierverfahren einen speziellen Dynamic-Mode. Dieser vereint die Vorzüge der stationären 2-Feld- und 3-Feld-Zeeman-Modi:

- Im unteren Konzentrationsbereich können die bessere Empfindlichkeit der Zwei-Feld-Betriebsart genutzt werden.
- Im oberen Konzentrationsbereich können auf Kosten der Empfindlichkeit im 3-Feld-Modus höhere Konzentrationen gemessen werden, wobei der bekannte Zeeman-Überroll-Effekt zu höheren Konzentrationen verschoben wird.

Dazu wird das Magnetfeld wie im stationären 3-Feld-Modus in 3 Zuständen betrieben. Erfasst werden aber zwei Extinktionswerte:

- Extinktionsdifferenz zwischen dem ausgeschalteten Magnetfeld und dem Magnetfeld mit maximaler Feldstärke (H-Wert / hohe Empfindlichkeit (high))
- Extinktionsdifferenz zwischen dem Magnetfeld mittlerer Feldstärke und dem Magnetfeld mit maximaler Feldstärke (L-Wert / niedrige Empfindlichkeit (low))

Beide Werte (L-Wert und H-Wert) werden in der aktiven Integrationsart (Fläche oder Höhe) bei jeder Messung erfasst und gespeichert. Die Werte der alternativen Integrationsart werden nicht gespeichert, das heißt, Sie müssen sich vor der Messung für eine der beiden Integrationsarten entscheiden.

Darstellung der H- und L-Werte in den Tabellen und Grafiken Die beiden Werte werden in den Tabellen in der gleichen Art dargestellt wie bei anderen Zeeman-Betriebsarten der Flächen und Höhenwert.

In den Ergebnis-Grafiken werden der L-Wert-Peak und der H-Wert-Peak dargestellt. Der Untergrund bei maximaler Feldstärke ist eingezeichnet.

Die Einzelpeakgrafik wird in zwei untereinander stehende Grafiken mit unterschiedlicher Extinktions-Skalierung aufgeteilt, während alle anderen Grafiken ein gemeinsames Koordinatensystem für L-Werte und H-Werte benutzen.

Kalibration der H- und L-Werte Bei der Kalibration werden sowohl für die L-Werte als auch für die H-Werte Kalibrierkurven berechnet (H-Kurve und L-Kurve).

Dabei ist es möglich Kalibrierpunkte mit höheren Konzentrationen nur für die L-Kurve zu berücksichtigen. Hierfür gibt es in der Kalibriertabelle die Schaltfläche H-Wert löschen. Sind beide Kalibrierkurven berechnet, kann der Anwender eine Grenzkonzentration festlegen.

Liegt bei der Probenmessung der H-Wert der Probe unterhalb der Extinktion, die dem H-Kurvenwert der Grenzkonzentration entspricht, werden zur Konzentrationsberechnung der H-Wert und die H-Kurve herangezogen. Liegt er oberhalb dieses Wertes werden der L-Wert und die L-Kurve zur Konzentrationsberechnung benutzt.

Die Kurvenform (linear, nicht linear) ist für die H-Kurve wählbar, während für die L-Kurve immer eine nichtlineare Kalibrierkurve berechnet wird.

Rekalibration der H- und L-Werte

Der Rekalibrierstandard ist so zu wählen, dass er in der Nähe der Grenzkonzentration liegt. Bei der Rekalibration wird für beide Kurven ein gemeinsamer Rekalibrierfaktor berechnet und für die Konzentrationsberechnung genutzt.

Sehen Sie dazu auch

Untergrundkorrektur für ZEEman-AAS ZEEnit 700 Q [▶ 122]

9.1.7 Untergrundkorrektur für ZEEman-AAS ZEEnit 700 Q

Für das ZEEnit 700 Q kann im Fenster **Methode | Auswertung** die Untergrundkorrektur mittels des Zeeman-Magnetfeldes festgelegt werden.

Die optimalen Feldstärken für das Zeeman-Feld können mit einem Optimierungsprogramm ermittelt werden. Das Optimierungsprogramm durchfährt für eine ausgewählte Probe automatisch eine Messreihe mit unterschiedlichen Feldstärken, von einem vorgegebenen Anfangs- bis zu einem vorgegebenen Endwert. Die dabei gemessenen Werte werden in einer Tabelle ausgegeben.

Bestimmen Sie mit diesen Informationen die optimale Feldstärke für Ihre Analysenaufgabe und übernehmen diesen Wert in die Methode. Für die Optimierung sollte eine Probe verwendet werden, die möglichst repräsentativ für die zu analysierenden Matrixzusammensetzung ist.

Die automatische Optimierung der Feldstärken erfolgt im Fenster **Spektrometer | Feldstärke-Opt..**

Nr.	Feldst. [T]	Ext. Fläche	Untergr. Fläche	Zeeman Faktor
1	0.05	0.17554	0.08615	0.6708
2	0.10	0.20824	0.10349	0.6680
3	0.15	0.24099	0.12060	0.6665
4	0.20	0.27419	0.13634	0.6679
5	0.25	0.30371	0.15295	0.6651
6	0.30	0.33424	0.16686	0.6670
7	0.35	0.36301	0.18008	0.6684
8	0.40	0.38773	0.19323	0.6674
9	0.45	0.41016	0.20558	0.6661
10	0.50	0.43102	0.21530	0.6669
11	0.55	0.44823	0.22404	0.6667
12	0.60	0.46186	0.23156	0.6661
13	0.65	0.47431	0.23676	0.6670
14	0.70	0.48331	0.24085	0.6674

Parameter für Optimierung

Für die Optimierung wird während der Messreihe die maximale Feldstärke variiert.

Parameter	Beschreibung
Beginn	Startwert für die Variation der maximalen Feldstärke (0,01 ... 1,00 T)
Ende	Endwert für die Variation der maximalen Feldstärke (0,01 ... 1,00 T)
Schrittweite	Schrittweite für die Variation der maximalen Feldstärke (0,05 ... 0,25 T)

Parameter	Beschreibung
Probengeber-Pos.	Auf dieser Position des Probengebers befindet sich die Probe für die Optimierung.

Schaltflächen für die Optimierung

Schaltfläche	Beschreibung
Start	Messreihe starten
In Methode übernehmen	Gefundene Parameter in die Methode übertragen
Speichern	Ergebnisse der Optimierung speichern
Laden	Gespeicherte Optimierungsergebnisse laden

Anzeige der Optimierungsparameter

Die Grafik zeigt die beiden Extinktionsverläufe für das Messsignal (blaue Kurve) und für den Untergrund (rote Kurve). In der Auswahlliste kann zwischen Höhe und Fläche der Signalauswertung gewählt werden.

Im Tabellenbereich werden folgende Werte angezeigt:

Parameter	Beschreibung
Nr.	Nr. des Optimierungsschritts
Feldst.	Wert für die Feldstärke
Ext. Höhe/Fläche	Extinktionswert für Auswertung der Peakhöhe oder -fläche
Untergr. Höhe/Fläche	Untergrund-Extinktionswert für Auswertung der Peakhöhe oder -fläche
Zeeman Faktor	Zeeman-Faktor (Ext/(Ext. + Untergr.))

Optimierung durchführen

Voraussetzung für die Optimierung für eine bestimmte Elementlinie ist, dass die geladene Methode diese Elementlinie enthält.

- ▶ Stellen Sie im Fenster **Spektrometer | Kontrolle** im Listenfeld **Quelle** die Linie aus der Methode ein und wählen Sie im Listenfeld **Untergrundkorrektur** die Option **Zeeman**.
- ▶ Wechseln Sie auf die Karte **Feldstärke-Opt.**.
- ▶ Stellen Sie eine repräsentative Probe auf den Probengeber und geben Sie im Feld **Probengeber-Pos.** die Position ein.
- ▶ Sie können die Einstellungen in der Gruppe **Feldstärken** variieren.
- ▶ Starten Sie anschließend die Optimierung mit **Start** .
 - ✓ Die Optimierung läuft automatisch ab.

Sie können nach Ende der Optimierung die Parameter direkt in die Methode übernehmen (Schaltfläche **In Methode übernehmen**). Sie haben dabei die Auswahl, ob Sie die Parameter der markierten Tabellenzeile oder das gefundene Optimum übertragen. Sie können die während der Optimierung erzeugten Ergebnisse mit der Schaltfläche **Speichern** speichern.

9.1.8 Spektrometer justieren

Das Spektrometer kann softwaregesteuert justiert werden. Für die Justierung wird eine vorgeheizte Blei-Hohlkathodenlampe benötigt, mit deren Linien die Justierung des Spektrometers erfolgt.

- ▶ Starten Sie die Justage mit dem Menübefehl **Aktionen | Spektrometerjustage**.

- ▶ Starten Sie im Fenster **Spektrometerjustage** die automatische Justierung mit Klick auf **Start**. Ein Fortschrittsbalken signalisiert den Ablauf der Justierung.
- ▶ Nach Ende der Justierung speichern Sie die gefundenen Korrekturwerte mit Klick auf **Speichern**.
 - ✓ Bei jeder weiteren Messung werden die neuen Korrekturwerte für das Spektrometer verwendet.

9.2 Flamme

Im Fenster **Flamme** können Sie einzelne Funktionen des Brenner-Zerstäuber-Systems überprüfen und die Parameter für die Analyse der einzelnen Elemente individuell einstellen.

- ▶ Rufen Sie das Fenster **Flamme** mit dem Menübefehl **Methodenentwicklung | Flamme** oder mit dem Symbol  auf.



HINWEIS

Wenn ein speziell ausgerüstetes AAS-Gerät während der Installation für die Verwendung von LPG konfiguriert wurde, zeigt die Software LPG als Brenngas an. Es ist nicht möglich, LPG mit Lachgas als Oxidans zu verwenden.

9.2.1 Kontrolle der Flammenfunktionen

Im Fenster **Flamme | Kontrolle** finden Sie folgende Funktionen:

- Flamme zünden/löschen
- Oxidans Luft oder Lachgas umschalten
- Anzeige der Gasdrücke und Gasflüsse
- Scraper aktivieren
- Gasflüsse einstellen

Status

Option	Beschreibung
Flamme	Statusanzeige der Flamme: aus: Die Flamme brennt nicht. C2H2/Luft: Die Acetylen-Luft-Flamme brennt. C2H2/N2O: Die Acetylen-Lachgas-Flamme brennt.
Brenner	Aufgesetzter Brennerkopf: 100 mm: 100-mm-Einschlitzbrenner 50 mm: 50-mm-Einschlitzbrenner Fehler: Kein Brennerkopf vorhanden bzw. wird nicht erkannt.
Siphon	Der Füllstand des Mischkammersiphons, über den nichtzerstäubte Flüssigkeit abgeführt wird, wird überwacht. Der Siphon muss immer ausreichend gefüllt sein, um das Rückschlagen der Flamme, insbesondere der Lachgasflamme, zu verhindern. OK: Der Siphon ist bis zum Überlauf mit Flüssigkeit gefüllt. Fehler: Der Füllstand des Siphons ist unzureichend.

Drücke

Option	Beschreibung
Brenngas	Zustand des Brenngasdrucks am Geräteeingang "-" – Kein Brenngasdruck vorhanden
Zerstäuber	Arbeitsdruck am Probenzerstäuber in bar
Luft	Zustand des Luft-Vordrucks Der Zustand wird nur angezeigt, wenn die Luftversorgung geöffnet ist.
Lachgas	Zustand des N ₂ O-Vordrucks Der Zustand wird nur angezeigt, wenn die Lachgasversorgung geöffnet ist.

Aktuelle Gasflüsse

Option	Beschreibung
Brenngas	Brenngasfluss
Oxidans	Oxidansfluss durch den Zerstäuber
Oxidans (Zusatz)	Zusatzoxidans Wird nur angezeigt, wenn das Zusatzoxidans in der Methode aktiviert ist. Luft: 75 / 150 / 225 NL/h Lachgas: 60 / 120 / 180 NL/h
Gas/Oxidans	Verhältnis von Brenngas- zu Oxidansfluss

Testfunktionen

Die Testfunktionen sind nur zugänglich, wenn die Flamme gelöscht ist. Die Verfügbarkeit der Testfunktionen ist vom Kontext abhängig.

Option	Beschreibung
Test Luft	Magnetventil im Luftweg öffnen Voraussetzung: Eingangsdruck Luft und Brenngas liegen an. Angezeigt werden Zerstäuberdruck, Oxidansfluss und, Gesamtoxidans (nur das Zusatzoxidans aktiviert ist).
Test N2O	Nur bei Acetylen-Lachgas-Flamme mit 50-mm-Einschlitzbrenner aktiv Magnetventil im Lachgasweg öffnen

Option	Beschreibung
	Voraussetzung: Eingangsdruck Lachgas und Brenngas liegen an. Angezeigt werden Zerstäuberdruck, Oxidansfluss und, Gesamtoxidans (nur das Zusatzoxidans aktiviert ist).
Test Brenngas	Soll-Gasfluss (Proportionalventil) einstellen Angezeigt werden Brenngasfluss für die Acetylen-Luft-Flamme (bei Test Luft bzw. die Acetylen-Lachgas-Flamme (bei Test N2O). Vor diesem Test muss Test Luft oder Test N2O aktiviert werden.
Test Ende	Testfunktion beenden

Flamme/Scraper

Schaltflächen	Beschreibung
Flamme zünden	Acetylen-Luft-Flamme zünden <ul style="list-style-type: none"> ▪ Zündarm schwenkt aus; Glühwendel leuchtet. ▪ Acetylen-Sollgasflusses (Proportionalventil) wird eingestellt, wenn Zerstäuberdruck und Oxidansfluss die Sollwerte erreicht haben. ▪ Wenn die Flamme nicht innerhalb von 10 s zündet, erfolgt ein Abbruch des Zündversuchs. ▪ Wenn die Flamme brennt, wird die Schaltfläche Flamme löschen aktiv.
Luft --> N2O	Von Acetylen-Luft- auf Acetylen-Lachgas-Flamme umschalten <ul style="list-style-type: none"> ▪ Oxidansventil (3/2-Magnetventil) schaltet von Luft auf Lachgas um. ▪ Brenngasfluss für Acetylen-Lachgasflamme-Flamme (Proportionalventil) wird eingestellt. ▪ Die Schaltfläche wechselt zu N2O --> Luft.
N2O --> Luft	Von Acetylen-Lachgas- auf Acetylen-Luft-Flamme umschalten <ul style="list-style-type: none"> ▪ Oxidansventil (3/2-Magnetventil) schaltet von Lachgas auf Luft um. ▪ Brenngasfluss für Acetylen-Luft-Flamme (Proportionalventil) wird eingestellt. ▪ Die Schaltfläche wechselt zu Luft --> N2O.
Flamme löschen	Flamme löschen <ul style="list-style-type: none"> ▪ Wenn die Acetylen-Lachgasflamme brennt, wird auf die Acetylen-Luft-Flamme umgeschaltet und einige Sekunden gewartet. ▪ Der Brenngasfluss (Proportionalventil) wird gesperrt. ▪ Nach einigen Sekunden Wartezeit (Austreiben des Brenngases aus der Mischkammer und Brenner) wird Luft (Magnetventil) gesperrt.
Scraper	Nur bei 50-mm-Brenner mit montiertem Scraper und Acetylen-Lachgas-Flamme Scraper zur Reinigung des Brennerkopfs aktivieren

Einstellungen

Im Bereich **Einstellungen** können Sie die Gasflüsse editieren:

Option	Beschreibung
Gas C2H2/Luft	Acetylen-Luft-Flamme (Brenngasfluss: 40 ...120 NL/h)
Gas C2H2/N2O	Acetylen-Lachgas-Flamme (Brenngasfluss: 120 ...315 NL/h)
Oxidans (Zusatz)	Einstellung des Zusatzoxidansflusses
Brennerhöhe	Höhe des Brenners bezogen auf die optische Achse

Sehen Sie dazu auch

 [Flammenparameter spezifizieren \(Fenster Methode | Flamme\) \[▶ 33\]](#)

9.2.2 Flamme optimieren

Für eine Analyse können Sie die Flamme für jede Elementlinie optimieren hinsichtlich:

- Brenngasfluss
- Brennerhöhe
- Gesamtoxidansfluss, wenn in der Methode Verwendung von Zusatzoxidans vereinbart ist

Die Optimierung können Sie manuell ausführen, in dem Sie die Parameter verändern und den Signalverlauf beobachten, oder Sie lassen die Parameter automatisch durch das Programm suchen. In beiden Fällen können Sie per Tastendruck die ermittelten Parameter in die Methode übertragen.

Flamme manuell optimieren

Die manuelle Flammenoptimierung führen Sie im Fenster **Flamme | Manuelle Optimierung** durch.

Option	Beschreibung
Linie	Elementlinie auswählen, für die die Flamme optimiert werden soll Zur Auswahl stehen die in der Methode eingestellten Analysenlinien.
Einstellen	Monochromator auf die gewählte Analysenlinie fahren
Brenngas	Brenngasfluss einstellen
Brennerhöhe	Brennerhöhe zur optischen Achse des Strahlengangs einstellen
Oxidans (Zusatz)	Zusatzoxidansfluss einstellen: Luft: 75 / 150 / 225 NL/h Lachgas: 60 / 120 / 180 NL/h
Oxidans	Oxidansfluss in L/h
Gas/Oxidans	Verhältnis von Brenngasfluss
Start	Messung starten und Signal kontinuierlich registrieren Schaltfläche wandelt sich in Stopp .
AZ	Auto-Zero-Messung starten
Stopp	Messung beenden

Option	Beschreibung
Werte übernehmen	Die ermittelten Flammenparameter für die eingestellte Elementlinie in die Methode übernehmen
Grafik	Anzeige des Signalverlaufs Die Ordinatenendehnung können Sie in den Eingabefeldern an der Y-Achse einstellen.
Extinktion	Aktueller Extinktionswert
Maximum	Maximaler Extinktionswert während der laufenden Messung

Manuelle Optimierung durchführen

Hinweis: Bei Veränderung der Parameter kann die Signalintensität mit einer geringen Verzögerung reagieren.

- ▶ Testlösung bereitstellen.
Hinweise zur geeigneten Testlösung finden Sie im Kochbuch. Die dort angegebene Testkonzentration bewirkt eine Extinktion von ca. 0,1. Verwenden Sie für die Optimierung eine 2- bis 3-fache Konzentration.
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Linie** eine Elementlinie aus.
- ▶ Fahren Sie mit **Einstellen** den Monochromator auf die Wellenlänge der Linie.
- ▶ Tauchen Sie den Probenansaugschlauch des Zerstäubers in die Null-Lösung.
- ▶ Starten Sie die AZ-Messung mit **AZ**.
- ▶ Tauchen Sie den Probenansaugschlauch des Zerstäubers in die Probenlösung.
- ▶ Starten Sie die Messung mit **Start**.
- ▶ Verändern Sie mit den Pfeiltasten die Einstellung **Brenngas** und beobachten Sie den Signalverlauf in der Grafik und im Feld **Extinktion**. Stellen Sie das Maximum der Extinktion ein.
- ▶ Verändern Sie die Einstellung **Brennerhöhe**, bis Sie das Extinktionsmaximum gefunden haben.
- ▶ Bei Verwendung der Flamme mit Zusatzoxidans variieren Sie den Parameter **Oxidans (Zusatz)**, bis Sie auch hier das Signalmaximum eingestellt haben.
- ▶ Wiederholen Sie Schritte beginnend mit der Einstellung **Brenngas**, bis keine relevante Erhöhung des Signals mehr erfolgt.
- ▶ Beenden Sie die Messung mit **Stopp**.
- ▶ Übertragen Sie mit **Werte übernehmen** die Parameter für die gewählte Elementlinie in die Methode.

Finden Sie auf diese Weise für alle Elementlinien in der Methode die geeigneten Parameter.

Flamme automatisch optimieren

Die automatische Flammen-Optimierung erfolgt im Fenster **Flamme | Automatische Optimierung**.

Der verwendete Optimierungs-Algorithmus verändert die Einstellungen für Brenngasfluss und Brennerhöhe mit dem Ziel eines Zugewinns an Nutzsignal. Hierbei werden die Wechselwirkungen zwischen den Größen (Gasfluss und Brennerhöhe) berücksichtigt. Wird in drei aufeinanderfolgenden Schritten kein Zugewinn erzielt, wird der Algorithmus beendet. Dies bedeutet, dass entweder das Maximum erreicht wurde oder eine Änderung der Parameter keinen Einfluss auf das Nutzsignal hat.

The screenshot shows the 'Flamme' software interface with the 'Manuelle Optimierung' tab selected. The 'Linie' dropdown is set to 'Cu 324' and 'Position' is set to '1'. A table displays optimization parameters for 15 steps, with the 15th step highlighted. A bar chart on the right shows 'Extraktion' values for steps 1 through 16, peaking at step 15. Control buttons include 'Start', 'AZ', 'Löschen', 'Laden', 'Werte übernehmen', 'Speichern', and 'Schließen'.

Linie	Schritt	Parameter		Gas/Oxidans	Signal
		Gasfluss	Br.Höhe		
Cu 324	4	75	8	0.000	0.7100
Cu 324	5	85	8	0.000	0.8100
Cu 324	6	95	8	0.000	0.9100
Cu 324	7	105	8	0.000	0.9100
Cu 324	8	95	7	0.000	0.8600
Cu 324	9	95	9	0.000	0.9400
Cu 324	10	95	10	0.000	0.9500
Cu 324	11	95	11	0.000	0.9400
Cu 324	12	90	10	0.000	0.9000
Cu 324	13	100	10	0.000	1.0000
Cu 324	14	105	10	0.000	0.9500
Cu 324	15	100	10	0.000	1.0000

Option	Beschreibung
Linie	Elementlinie auswählen, für die die Flamme optimiert werden soll Zur Auswahl stehen die in der Methode eingestellten Wellenlängen.
Position	Position der Testprobe im Probenwechsler einstellen
Alle Linien	Für alle Elementlinien in der Methode die Flammenparameter automatisch ermitteln
Start	Messung starten und Signal kontinuierlich registrieren Schaltfläche wandelt sich in Stopp .
Stopp	Messung beenden
AZ	Autozero ermitteln
Löschen	Ermittelte Werte löschen
Laden	Optimierte Flammenparameter laden
Speichern	Optimierte Flammenparameter speichern
Werte übernehmen	Die ermittelten Flammenparameter für die eingestellte Elementlinie in die Methode übernehmen
Tabelle	Anzeige der ermittelte Parameter
Grafik	Anzeige des Signalverlaufs

Automatischen Optimierung durchführen

- ▶ Wählen Sie in der Liste **Linie** eine Elementlinie aus.
- ▶ Tauchen Sie den Probenansaugschlauch des Zerstäubers in die Probenlösung.
- ▶ Starten Sie die Optimierung mit **Start**.
 - ✓ Es öffnet sich das Dialogfenster **Automatische Optimierung**.
- ▶ Aktivieren Sie bei Bedarf die Optionen:

Option	Beschreibung
Optimierte Werte automatisch in die Methode übernehmen	Bei automatischer Optimierung aller Linien der Methode muss diese Option aktiviert werden, da nach Abschluss der Optimierung nur die Daten der letzten Linie im Zwischenspeicher vorhanden sind.

Option	Beschreibung
Optimierdaten automatisch speichern	Wenn aktiviert, dann im Feld Dateiname den gewünschten Dateinamen eingeben.

- ▶ Bei Einzellinien-Optimierung: Wenn nicht vor der Optimierung vereinbart, übertragen Sie nach erfolgreicher Optimierung mit **Werte übernehmen** die Parameter für die Elementlinie in die Methode.


9.2.3 Flamme löschen

- Klicken Sie im Fenster **Flamme | Kontrolle** auf **Flamme löschen**.
- Während einer laufenden Sequenz klicken Sie in der Symbolleiste der linken Seite des Hauptfensters auf **Flamme löschen**.

9.3 Ofen

Im Fenster **Ofen** werden folgende Parameter eingestellt und Ofenfunktionen überwacht:

- Parameter der in der Methode verwendeten Ofenprogramme
- Auswahl der Modifikatoren
- Optimierung der Atomisierungs- und Pyrolysetemperaturen bei der Methodenerarbeitung
- Beschichten des Graphitrohrs für die HydrEA-Technik
- Grafische Darstellung des Ofenprogramms
- Kontrolle der Ofenfunktionen
- Position des Ofens (nur novAA 800)

Öffnen Sie das Fenster **Ofen** mit dem Menübefehl **Methodenentwicklung | Ofen** oder mit dem Symbol .

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Atomisierungstemperatur optimieren [▶ 132]

9.3.1 Ofenprogramm ansehen

Im Fenster **Ofen | Ofenprogramm** wird das linienenspezifische Ofenprogramm angezeigt. Das Ofenprogramm wird in der Methode erstellt. Wenn das Fenster **Ofen** über die Symbolleiste geöffnet wird, sind die Eingaben deaktiviert und die Parameter können nur angesehen werden.

Schritt	*	Name	Temp. [°C]	Rampe [°C/s]	Halten s	Zeit s	Gas		Inj.	E/P
							int	Zus.		
1		Trocknen	80	6	20	28.3	Max	Stopp		
2		Trocknen	90	3	20	23.3	Max	Stopp		
3		Trocknen	110	5	10	14.0	Max	Stopp		
4		Pyrolyse	350	50	20	24.8	Max	Stopp		
5		Pyrolyse	800	300	10	11.5	Max	Stopp		
6		AZ*	800	0	6	6.0	Stopp	Stopp		
7		Atomisieren	1500	1400	4	4.5	Stopp	Stopp		
8		Ausheizen	2450	500	4	5.9	Max	Stopp		

Gesamtdauer: 170 s

Programm prüfen

Messstart-Verzögerung [s]:

Linie:

Folgende Parameter werden angezeigt:

Spalte	Beschreibung
Schritt	Schrittnummer
*	Diesem Feld wurde bisher keine Funktion zugewiesen.
Name	Name des Ofenprogrammschritts
Temp.	Zieltemperatur im Programmschritt
Rampe	Heizrate im Programmschritt
Halten	Haltezeit der Zieltemperatur im Programmschritt
Zeit	Gesamtdauer des Schritts
Gas	Internes Gas (Int.Art) und Zusatzgas (Zus.) zuführen. Mögliche Zustände: Stopp Keine Zufuhr Min Minimale Zufuhr rate (nur interner Gasfluss) Max Maximale Zufuhr rate
Inj.	Injektionsschritt Probe wird nach diesem Schritt in den Ofen injiziert.
E/P	Anreicherungs-schritt bzw. Schritt für thermische Vorbehandlung der einzelnen Komponenten.

Sehen Sie dazu auch

Ofenprogramm editieren [▶ 36]

9.3.2 Matrixmodifikatoren, Anreicherung und Vorbehandlung ansehen

Im Fenster **Ofen | Modif.+Extras** können Sie folgende linienspezifischen Parameter folgende Parameter ansehen:

- Verwendung und Volumen von Matrixmodifikatoren
- Anreicherung im Graphitrohr durch wiederholtes Pipettieren und Trocknen

- Thermischen Vorbehandlung der Probe

Die Einstellungen erfolgen in der Methode. Wenn das Fenster **Ofen** über die Symbolleiste geöffnet wird, sind die Eingaben deaktiviert und die Parameter können nur angesehen werden.

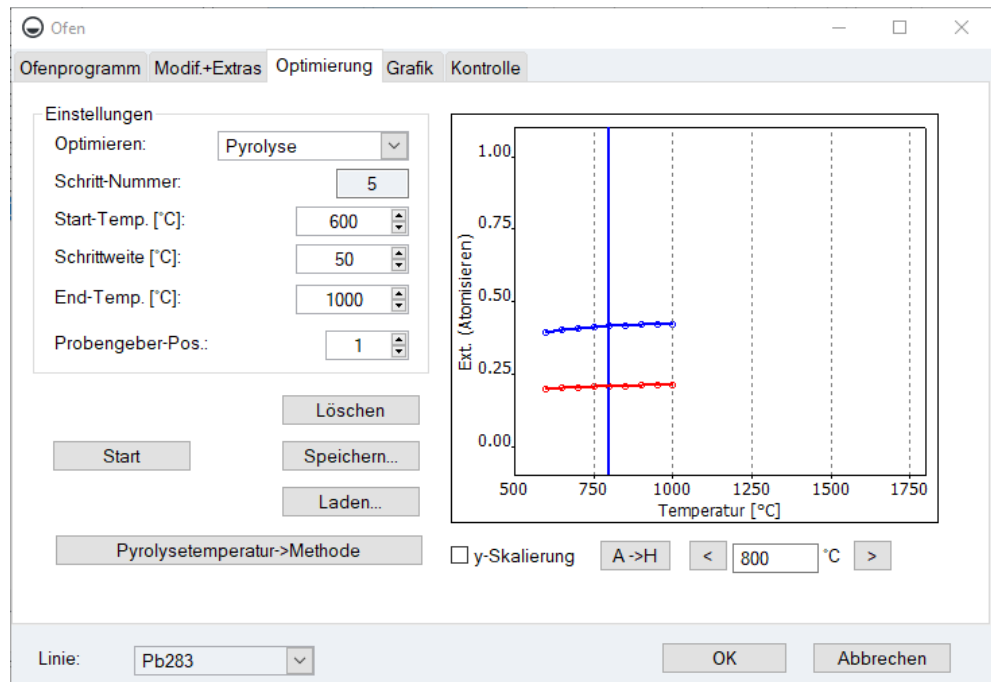
Sehen Sie dazu auch

Matrixmodifikatoren, Anreicherung und Vorbehandlung spezifizieren [▶ 40]

9.3.3 Atomisierungstemperatur optimieren

Im Fenster **Ofen | Optimierung** wird durch Ausführen einer Messserie mit zunehmenden Schritt-Endtemperaturen die optimale Pyrolyse- und Atomisierungstemperatur für eine Elementlinie ermittelt und eingestellt.

Optimierte Ofenparameter für die Atomisierung und die Pyrolyse können gespeichert und in andere Methoden geladen werden.



Parameter und Schaltflächen

Option	Beschreibung
Optimieren	Parameter für die Optimierung auswählen: Pyrolyse oder Atomisieren
Schritt-Nummer	Nummer des gewählten Schritts im Ofenprogramm
Start-Temp.	Niedrigste Endtemperatur des zu optimierenden Ofenprogrammschritts innerhalb der Messserie
Schrittweite	Um diese Schrittweite wird die Temperatur des zu Programmschritts von Messdurchlauf zu Messdurchlauf erhöht
End-Temp.	Höchste Endtemperatur des zu optimierenden Ofenprogrammschritts innerhalb der Mess-Serie Hinweis: Es können nur Parameter gewählt werden, die entsprechend dem aktuellen Ofenprogramm sinnvoll sind.
Probengeber-Pos.	Position der Probe im Probengeber, mit der die Optimierung (Pyrolyse/Atomisierung) durchgeführt wird
Start/Stopp	Automatisch eine Sequenz für die Optimierungsmessung erstellen

Option	Beschreibung
	Optimierung starten/beenden
Löschen	Ermittelte Werte löschen
Speichern	Optimierte Ofenparameter speichern
Laden	Optimierte Ofenparameter laden
Atomisierungstemperatur->Methode / Pyrolysetemperatur->Methode	Ermittelte Werte in das aktuelle Ofenprogramm übernehmen

Ergebnisanzeige

Die Ergebnisse der Optimierung werden im Ergebnisfenster angezeigt.

Die grafische Darstellung erfolgt im Fenster **Ofen | Optimierung**. Angezeigt werden jeweils der Autozero-Wert und die gemessene Extinktion:

Option	Beschreibung
Rote Linie	Untergrundsignal in Abhängigkeit von Pyrolyse- bzw. Atomisierungstemperatur
Blaue Linie	Spezifische Absorption in Abhängigkeit von der Pyrolyse- bzw. Atomisierungstemperatur
Vertikaler Cursor	Vom Anwender ausgewählte optimale Pyrolyse- bzw. Atomisierungstemperatur
y-Skalierung	Ist das Kontrollkästchen markiert, wird die Skalierung der y-Achse so gewählt, dass das Untergrundsignal optimal dargestellt werden kann. Die Optimierung kann für Pyrolyse und Atomisierung unabhängig voneinander gewählt werden.
A->H/H->A	Grafik zwischen Signalfläche (A) und Signalhöhe (H) umschalten.
< / >	Vertikale Linien für die Pyrolyse- bzw. Atomisierungstemperatur (entsprechend dem für die Optimierung gewählten Schritt) nach links bzw. rechts verschieben und damit die gewünschte optimale Ofentemperatur festlegen.

Optimierung ausführen

Parameter	Optimierungsziel
Pyrolysetemperatur	Keine spezifischen Absorptionsverluste und minimales Untergrundsignal
Atomisierungstemperatur	Eine konstante spezifische Extinktion

- ▶ Erstellen Sie für die aktuelle Analyselinie eine Methode und speichern Sie diese.
- ▶ Öffnen Sie in der Methode das Fenster **Ofen** und passen Sie gegebenenfalls das Ofenprogramm an.
- ▶ Tragen Sie im Fenster **Ofen | Optimierung** die Optimierungsparameter ein (optimierte Temperatur, Start-Temp., Schrittweite, End-Temp., Position der Probe auf dem Probengeber).
- ▶ Bereiten Sie die Probe auf dem Probengeber vor.
- ▶ Starten Sie die Optimierung mit **Start**.
 - ✓ Die Optimierung läuft automatisch ab.
 - Die Messergebnisse werden im Hauptfenster angezeigt und im Fenster **Ofen | Optimierung** grafisch dargestellt.
 - Die Anzeige der Probeneinzelwerte öffnen Sie mit einem Klick auf den Messpunkt in der Grafik oder mit einem Doppelklick auf die Probenzeile im Hauptfenster.

- ▶ Bewegen Sie in der Grafik den vertikalen Cursor mit den Schaltflächen < / > oder den Pfeiltasten auf die optimale Temperatur. Übertragen Sie den Wert mit **Atomisierungstemperatur->Methode** / **Pyrolysetemperatur->Methode** in das Ofenprogramm.
- ▶ Verfahren Sie auf diese Weise mit allen weiteren Analyselinien der aktuellen Methode.

9.3.4 Ofenprogramm graphisch darstellen oder Graphitrohr beschichten

Das Fenster **Ofen | Grafik** beinhaltet folgende Funktionen:

- Grafische Darstellung des Ofenprogramms
- Ausführung des aktuellen Ofenprogramms prüfen
- Graphitrohr für die HydrEA-Technik mit Iridium beschichten.

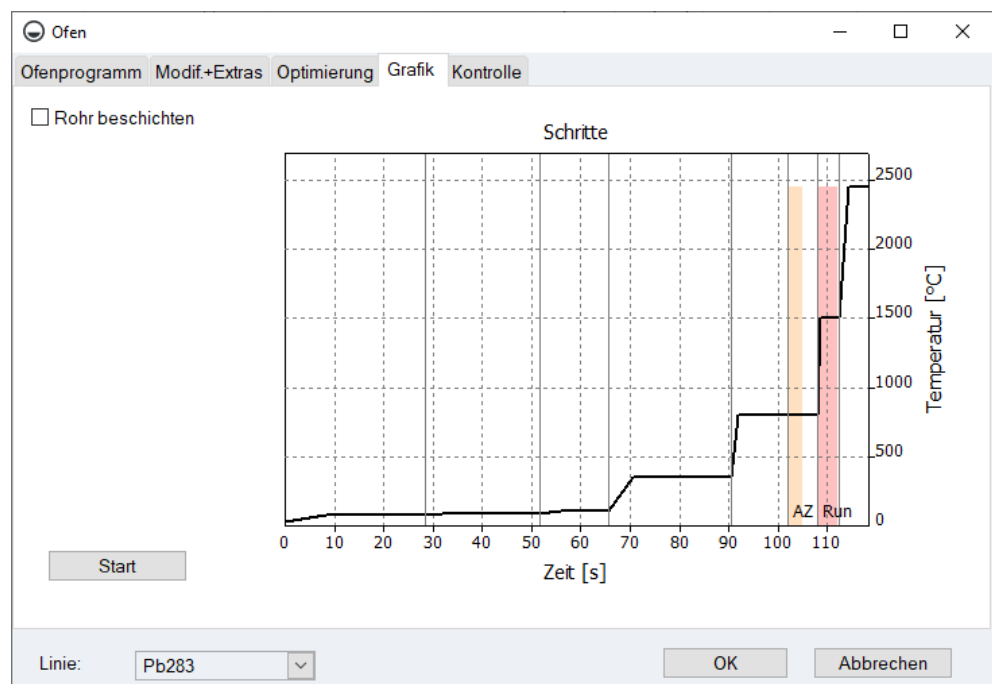
Grafische Darstellung des Ofenprogramms

Das Ofenprogramm wird als Graph im Temperatur-Zeit-Koordinatensystem dargestellt.

Option	Beschreibung
Schwarze Linie	Programmierter Temperatur-Zeit-Verlauf
Rote Linie	Während eines Tests wird die schwarze Linie im abgearbeiteten Teil des Ofenprogramms von einer roten Linie, dem realisierten Temperatur-Zeit-Verlauf überlagert.
Inj.	Der Injektionsschritt ist mit der Kennung "Inj." über dem Diagramm markiert.
Grüner Balken	Die Anreicherungsphase ist durch einen grünen waagerechten Balken gekennzeichnet.
Gelbbrauner Balken	Der Nullabgleich (AZ*) ist durch einen gelbbraunen vertikalen Balken gekennzeichnet.
Hellrosa Balken	Der Integrationsschritt (Messwertaufnahme) ist durch einen hellrosa vertikalen Balken gekennzeichnet.

Ofenprogramm im Testlauf prüfen

Die Ausführung des aktuellen Ofenprogramms wird in einem Testlauf geprüft. Während dieses Testlaufs werden Temperaturen und Zeiten in der Grafik angezeigt. Es wird keine Probe injiziert, Nullabgleich und Integration werden nicht ausgeführt.



In der Grafik sind die Schritte des Ofenprogramms dargestellt. Die rote Linie zeigt während der Ausführung die tatsächliche Ofentemperatur an.

Folgende Werte werden während der Ausführung digital angezeigt:

Option	Beschreibung
Schritt	Ausgeführter Schritt des Ofenprogramms
Temp.	Aktuelle Ofentemperatur
Zeit	Abgelaufene Zeit seit Programmstart
Rampe	Aktuelle Heizrate
Gas	Aktueller Gasfluss

Graphitrohr beschichten

Für die HydrEA-Technik wird ein mit Iridium oder Gold beschichtetes Graphitrohr benötigt. Die Beschichtung wird im Fenster **Ofen | Grafik** gesteuert.

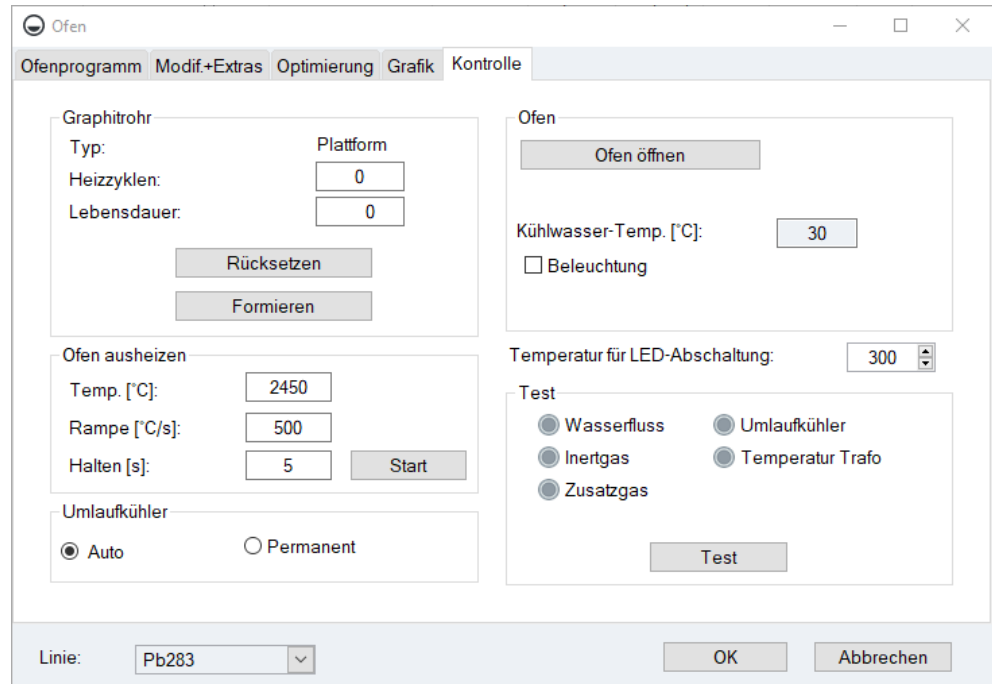
Bei Aktivierung des Kontrollkästchens **Rohr beschichten** werden die Eingabeparameter für diese Prozedur freigeschaltet.

Option	Beschreibung
Zyklen	Anzahl der Anreicherungszyklen für die Beschichtung
Position	Probentellerposition mit der Beschichtungslösung
Vol.	Volumen der Beschichtungslösung, das bei jedem Anreicherungs-schritt ins Rohr zu pipettieren ist
Element	Auswahl des Beschichtungsmaterials Verwenden Sie Iridium (Ir) für die Analyse von Hydridbildnern und Gold (Au) für die Quecksilberanalyse.
Start	Beschichtung starten

9.3.5 Weitere Ofenfunktionen

Das Fenster **Ofen | Kontrolle** enthält folgende Funktionen:

- Informationen zum Graphitrohr
- Graphitrohr formieren
- Graphitofen ausheizen
- Graphitofen öffnen/schließen
- Anzeige der aktuellen Kühlwassertemperatur
- Umlaufkühler konfigurieren



Graphitrohrdaten

Der Bereich **Graphitrohr** enthält Informationen zum Graphitrohr, die bei Wechsel des Rohres eingegeben und dann automatisch fortgeschrieben werden. Wenn Sie ein neues Rohr verwenden, setzen Sie die Werte auf 0.

Option	Beschreibung
Typ	Rohrtyp gemäß Einstellung im Fenster Quickstart
Heizzyklen	Zahl der Heizzyklen dieses Rohrs
Lebensdauer	Maßzahl für die thermische Beanspruchung des Graphitrohres als Produkt aus Steuerparametern und Schrittzeiten des aktuellen Ofenprogramms Die Bewertung der Zahl ist nur aufgabenorientiert möglich. Hinweis: Wir empfehlen vor dem Entfernen eines noch nutzbaren Graphitrohres, die Daten im Bereich Graphitrohr an geeigneter Stelle zu notieren, so dass diese Werte beim Wiedereinsetzen wieder eingetragen und anschließend automatisch fortgeschrieben werden können.

Graphitrohr formieren

Mit dem Formieren des Graphitrohrs werden folgende Funktionen ausgeführt:

- Luftsauerstoff aus dem Ofen treiben und die Anpresskraft des beweglichen Ofenteils anpassen
- Rohrtemperatur rekalisieren
- Ein neu eingesetztes Graphitrohr formieren
- Den Ofen nach Pausen reinigen

Die Formierung muss jeweils erfolgen:

- Nach Einschalten des Spektrometers
- Nach Schließen des geöffneten Ofens

Option	Beschreibung
FF%	Während des Formierens bestimmter Formierfaktor
Formieren	Formieren starten Es erscheint das Fenster Formieren , das die aktuell gemessenen Ofendaten anzeigt. Es werden 9 Temperaturstufen (300 – 1500 – 300 – 1500 – 300 – 1000 – 1600 – 2000 – 2400 °C) angefahren

Option	Beschreibung
	und die Prüftemperaturen im Rohr gemessen. Nach dem letzten Schritt erscheint der Formierfaktor, die ermittelten Daten für die Rohrtemperatur-Rekalibration werden gespeichert.

Umlaufkühler

Konfiguration des Umlaufkühlers vornehmen.

Option	Beschreibung
Auto	Der Umlaufkühler schaltet automatisch, um die Kühlwassertemperatur im Funktionsbereich zu halten.
Permanent	Der Umlaufkühler ist ständig eingeschaltet, um die maximale Kühlleistung zu gewährleisten.

Ofen ausheizen

Ausheizen ist ein 1-Schritt- Reinigungsprogramm. Der Gasfluss ist fest auf maximalen Fluss eingestellt. Die aktuellen, hier änderbaren Parameter werden mit der Methode gespeichert.

Option	Beschreibung
Temp.	Ausheiztemperatur
Rampe	Heizrate
Halten	Ausheizzeit
Start	Ausheizprozess starten, es erscheint das Fenster Ausheizen , das die aktuell gemessenen Ofendaten anzeigt.

Weitere Ofenfunktionen

Option	Beschreibung
Kühlwasser-Temp.	Aktuelle Kühlwassertemperatur
Beleuchtung	Wenn aktiviert, wird die Ofenkamera eingeschaltet. Ein Fenster mit einem Bild der Graphitrohrs wird auf dem Bildschirm eingeblendet. Die Probeninjektion kann kontrolliert werden. In der Voreinstellung ist die Ofenkamera ständig eingeschaltet. Die Option dafür befindet sich im Fenster Optionen Analysenablauf . Hinweis: Die Ofenkamera ist nicht für alle AAS-Gerätetypen verfügbar.
Ofen öffnen	Graphitofen öffnen Das Graphitrohr kann entnommen bzw. eingesetzt werden.
Ofen schließen	Graphitofen schließen
Temperatur für LED-Abschaltung	Ofentemperatur, ab welcher die LED der Beleuchtungseinheit abgeschaltet wird. Gleichzeitig wird die Ofenkamera abgeschaltet und die Messwertaufnahme vorbereitet.

Ofentest

Der Ofen wird auf Sensorfehler überprüft. Jede Messung wird beim Auftreten einer der hier aufgelisteten Fehlerzustände abgebrochen (auf dem Bildschirm wird eine entsprechende Fehleranzeige ausgegeben).

Den Fehlertest starten Sie mit **Test**. Das Prüfergebnis wird bei erfolgreichem Test mit einem grünen, bei negativem Testergebnis mit einem roten Kontrolllämpchen angezeigt.

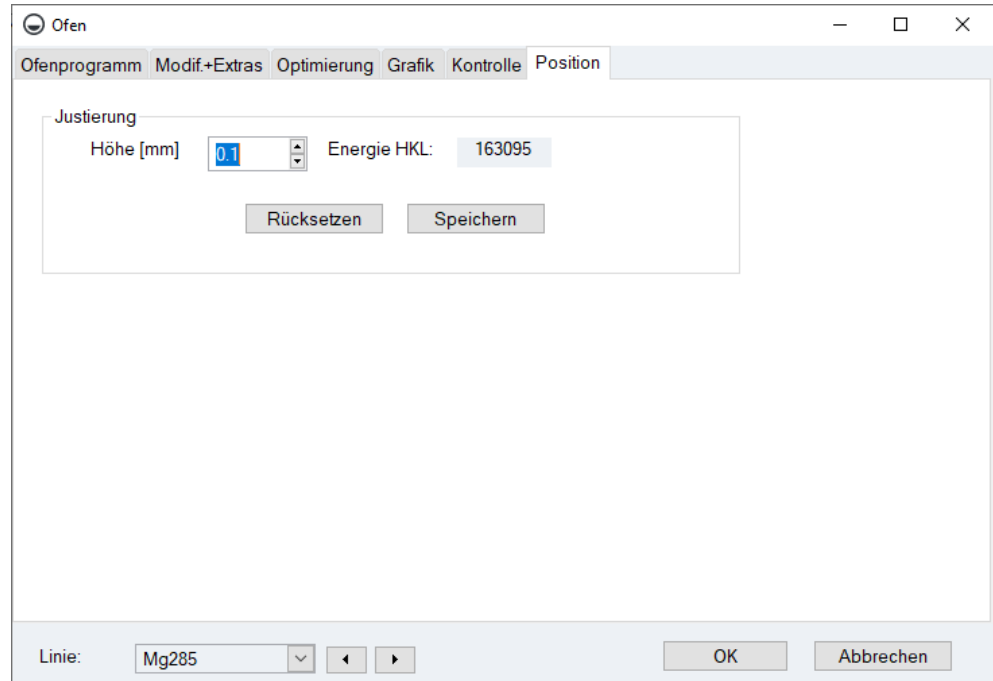
Sehen Sie dazu auch

 Optionen zum Analysenablauf [▶ 178]

9.3.6 Ofenposition einstellen (novAA 800)

Nur für novAA 800

Im Fenster **Ofen | Position** kann die Höhe des Graphitofens relativ zum Strahlengang angepasst werden, wenn der Ofen den Strahlengang beschneiden sollte.



- ▶ Verändern Sie mit den Pfeiltasten im Eingabefeld **Höhe** die Position des Ofens im Strahlengang und beobachten Sie die Änderungen der Energie der HKL.
- ▶ Verwenden Sie die Schaltfläche **Speichern**, um die neu eingestellte Ofenhöhe permanent zu speichern.
- ▶ Klicken Sie auf **Rücksetzen**, wenn Sie die Ofenhöhe wieder auf die voreingestellte Höhe zurücksetzen möchten.

9.4 Hydridsystem

Im Fenster **Hydridsystem** können Sie folgende Funktionen ausführen:

- Den Zustand des Hydridsystems kontrollieren
- Verschiedene Funktionen des Systems auf Fehler testen
- Das Hydridsystem erneut initialisieren
- Die Systemschläuche vor Analysenstart mit Reagenzien laden
- Das System spülen, z.B. nach Ende der Analyse zur Reinigung

Öffnen Sie das Fenster **Hydridsystem** mit dem Menübefehl **Methodenentwicklung | Hydrid** oder dem Symbol **Hy**.

Hydridsystem initialisieren

Das Hydridsystem wird grundsätzlich zu Beginn der Arbeit mit dem AAS initialisiert. Eine Neuinitialisierung kann notwendig sein, wenn die Verbindung zum AAS unterbrochen wurde.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Hydridsystem** auf **Initialisieren**.
 - ✓ Die Verbindung zwischen Hydridsystem, AAS und PC wird hergestellt.

Hydridsystem laden

Das Laden von Reagenzien ist vor Beginn der Analysen, nach einer Neuinstallation oder nach Reinigen des Hydridsystems nötig.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Hydridsystem** auf **System laden**.
 - ✓ Die Schläuche des Hydridsystems werden mit Reagenzien geladen.

Hydridsystem spülen

Das Hydridsystem kann mit Säure oder Reduktionsmittel gespült werden, um Rückstände aus dem System zu beseitigen. Die dazugehörigen Parameter werden im Fenster **Methode | Hydrid** spezifiziert.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Hydridsystem** auf **System spülen**.
 - ✓ Das Hydridsystem wird gespült.

Sehen Sie dazu auch

📖 Hydrid- und HydrEA-Systeme spezifizieren (Fenster Methode | Hydrid) [▶ 42]

9.4.1 Funktionen des Hydridsystems kontrollieren

Das Fenster **Hydridsystem | Kontrolle** zeigt den Zustand der einzelnen steuerbaren Module des Hydridsystems an.

Kontrolle der Pumpen

Diese Funktion schaltet die Pumpen ein und aus.

Option	Beschreibung
Komponenten-Pumpe	Die Komponenten-Pumpe transportiert die Reagenzien des Hydridsystems.
Proben-Pumpe	Die Proben-Pumpe transportiert die flüssige Analysenprobe.

Hinweis: Wenn beim Anschalten einer der beiden Pumpen keines der beiden Ventile 3 bzw. 4 aktiviert ist, wird automatisch Ventil 3 eingeschaltet, um einen Rückfluss der Flüssigkeit zu vermeiden. Wenn die Proben-Pumpe läuft, wird die Komponenten-Pumpe ebenfalls aktiviert, um einen Flüssigkeitsstau im Gas-Flüssig-Separator zu vermeiden.

Kontrolle der Gaswege
 Im Bereich **Gasweg** können alle für den Analysenablauf sinnvollen Wege des Argon-Gasstromes mittels Magnetventilen (Magnetventil-Gruppen) geschaltet werden.
 Mit der Option **Gas -> Ventil 2 -> Küvette** kann bei Gaswegen, die nicht zur Küvette gehen, zusätzlich ein großer Gasstrom direkt zur Küvette geschaltet werden. Dabei öffnet sich das Ventil 2.

Ventile im Gasfluss
 Mit diesen Funktionen können die Ventile im Gasweg geschaltet werden.
Ventil2 schaltet den Gasstrom durch die Spitze des Batch-Moduls ein und aus.
Ventil3 schaltet 6 l/h Argon auf den eingestellten Weg.
Ventil4 schaltet 25 l/h Argon auf den eingestellten Weg.

Kontrolle der Küvette

Option	Beschreibung
Küvettenhöhe	Küvettenhöhe im Strahlengang einstellen
Heizung ein	Küvettenheizung einschalten Die Funktion kann zum Vorheizen der Küvette genutzt werden. Die Küvette wird auf die Temperatur im Eingabefeld Soll aufgeheizt. Nach Ein- und Ausschalten der Küvettenheizung wird der Temperaturwert im Feld Ist angezeigt.

Probenventile schalten
 Im Bereich **Probenventile** kann durch das Magnetventil-Paar (V6, V7) der Probenweg entweder zum Abfall oder zum Reaktor geschaltet werden.

Goldkollektor heizen

Nur für Hg-/Hydridsysteme mit Anreicherung
 Im Bereich **Kollektor** kann die Einstellung des Goldkollektors angezeigt und geändert werden.

Option	Beschreibung
aus	Heizung und Kühlung des Goldkollektors ausschalten
Heizung ein	Die Heizung des Goldkollektors einschalten
Kühlung ein	Den Lüfter des Goldkollektors einschalten Der Goldkollektor wird abgekühlt.
Heizwert	Parameter zur Ausheiztemperatur des Goldkollektors Wert ist ab Werk eingestellt und sollte nur verändert werden, wenn sich das thermische Verhalten der Goldkollektorheizung geändert hat. Ein höherer Wert entspricht einer höheren Ausheiztemperatur.
Einstellen	Angezeigten Heizwert als neuen Wert im Hydridsystem speichern

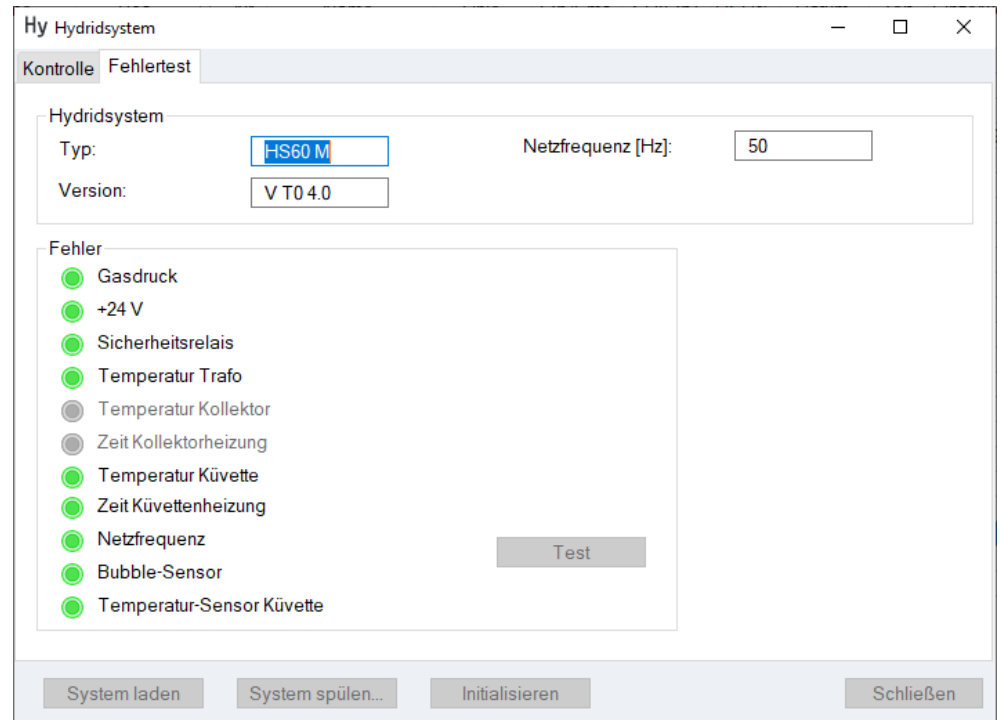
Bubble-Sensor reinigen

Nur für HS 60 und HS 60 modular
 Der Bubble-Sensor gibt ein Signal, wenn Flüssigkeit in den Gasweg nach dem Gas-Flüssigkeits-Separator eingetreten ist. Wird diese Störungen beim Fehlertest des Hydridsystems oder während der Messung durch den Bubble-Sensor gemeldet, so ist der Gasweg am Bubble-Sensor mit einem zusätzlichen Gasstrom zu reinigen. Der Reinigungsvorgang ist erfolgreich abgeschlossen, wenn 30 s keine Blasen im Gasweg detektiert werden.

Option	Beschreibung
Kontroll-Lämpchen Bubble-Sensor	Nur aktiv während des Reinigungsvorgangs Rot: Im Gasweg werden Blasen (Flüssigkeit) detektiert. Grün: Der Gasweg ist blasenfrei.
Start	Reinigungsvorgang starten

9.4.2 Hydridsystem auf Fehler testen

Im Fenster **Hydridsystem | Fehlertest** kann der aktuelle Zustand des Hydridsystems geprüft werden. Jeder Analysenablauf wird beim Auftreten eines der hier aufgelisteten Fehlerzustände sofort abgebrochen und die entsprechende Fehlermeldung auf dem Bildschirm ausgegeben.



Angeschlossenes Hydridsystem

Option	Beschreibung
Typ	Angeschlossenes und initialisiertes Hydridsystem
Version	Version der Hydridsystem-Firmware
Netzfrequenz	Die gemessene Netzfrequenz 50 oder 60 Hz wird angezeigt. Abweichungen von 2 Hz nach oben und unten werden toleriert, anderenfalls die Fehlermeldung "Netzfrequenz" ausgegeben.

Fehlerprüfung

Das Ergebnis der Prüfung wird mit grünen (für erfolgreichen Test) und roten (negatives Prüfergebnis) Kontroll-Lämpchen angezeigt. Die Fehlerprüfung starten Sie mit der Schaltfläche **Test**.

Ein negatives Testergebnis kann folgende Ursachen haben:

Option	Beschreibung
Gasdruck	Gasdruck Argon liegt nicht an
+24 V	Betriebsspannung +24 V liegt nicht an
Sicherheitsrelais	Sicherheitsrelais hat nicht geschaltet
Temperatur Trafo	Trafo zu heiß oder Sensor defekt
Temperatur Kollektor	Goldkollektor zu heiß oder Sensor defekt
Zeit Kollektorheizung	Temperatur Goldkollektor nicht erreichbar
Temperatur Küvette	Küvette zu heiß oder Thermoelement defekt
Zeit Küvettenheizung	Soll-Temperatur Küvette nicht erreichbar
Netzfrequenz	Netzfrequenz weder 50 noch 60 Hz

Option	Beschreibung
Reinigung Bubble-Sensor	Im Gasweg nach dem Gas-Flüssigkeit-Separator befindet sich Flüssigkeit
Temperatur-Sensor Küvette	Der Temperatursensor in der Küvette ist defekt

9.5 Probengeber für Flammentechnik

Die Software unterstützt folgende Probengeber für die Flammentechnik:

- AS-F und AS-FD
- AS 51s
- AS 52s

Der Probengeber für die Flammentechnik ist ein optionales Zubehör. Der Typ des Probengebers wird bei der Geräteinitialisierung identifiziert.

Im Fenster **Probengeber** stehen folgende Funktionen zur Verfügung:

- Angeschlossene Probengeber-Typ anzeigen
- Probengeber justieren
- Probengeber zusätzlich spülen
- Probengeber neu initialisieren
- Selbsttest durchführen

Die für die Analyse unmittelbaren Parameter (Belegungen auf dem Probenteller, Verdünnung, Mischung und Spülschritte) spezifizieren Sie in der Methode, der Sequenz und der Probenidentifikation.

Das Fenster **Probengeber** öffnen Sie mit dem Menübefehl **Methodenentwicklung | Probengeber** oder dem Symbol .

Probengeber initialisieren

Der Probengeber wird grundsätzlich zu Beginn der Arbeit mit dem AAS im Fenster **Quickstart** initialisiert. Eine erneute Initialisierung könnte notwendig sein, wenn der Probengeber seine Orientierung verloren hat, z. B. durch einen mechanischen Stoß.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Probengeber** auf **Initialisieren**.
 - ✓ Die Verbindung zwischen Probengeber, AAS und PC wird hergestellt.

Probenweg spülen

Der Probenweg von Probengeber bis zur Flamme kann mit der Spülflüssigkeit des Probengebers gespült werden. Dabei taucht die Kanüle in das Spülgefäß, während die Spülpumpe frische Spüllösung nachliefert. Bei angeschlossenem Injektionsmodul SFS 6 wird der Probenweg geöffnet und damit auch der gesamte Probenweg gespült.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Probengeber** auf **Spülen** oder wählen Sie den Menüpunkt **Routine | Spülen**.
 - ✓ Der Probenweg wird gespült.



HINWEIS

Kurzschluss am Gerät durch falsches Anschließen des Probengebers

Schalten Sie vor der Installation des Probengebers das AAS-Gerät aus und ziehen Sie den Netzstecker aus der Steckdose. Sonst kann ein Kurzschluss Kommunikationsfehler verursachen oder die Schnittstelle beschädigen.

9.5.1 Probengeber für Flammentechnik spezifizieren

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

- Probengebertyp
- Spülparameter
- Einstellungen für die Reinigungskontrolle
- Funktion zum Spülen des Mischgefäßes

Die Parameter **Spülen** und **Reinigungskontrolle** werden aus der aktuellen Methode übernommen. Änderungen im Fenster **Probengeber | Parameter** aktualisieren umgekehrt die Einträge in der Methode.

Probengeber

Option	Beschreibung
Typ	Auswahl / Anzeige des angeschlossenen Probengebers "-": Kein Probengeber ausgewählt AS 51s / AS-F : Probengeber für Flammen-, Hybrid-, und HydrEA-Technik ohne Verdünnungsfunktion AS 52s / AS-FD : Probengeber für Flammen-, Hybrid-, und HydrEA-Technik mit Verdünnungsfunktion
Probenteller (AS-F / AS-FD)	"-": Kein Teller aufgesetzt 139 Pos. Probenteller mit 129 Positionen für 15-mL-Sarstedt Probegefäße auf den Außenspur und 10 Positionen für 30-mL-Sarstedt Probegefäße auf der Innenspur 54 Pos. Probenteller mit 54 Positionen für 50-mL-Sarstedt Probegefäße
Probenteller (AS 51s / AS 52s)	"-" Kein Teller aufgesetzt 87 Pos. Probenteller mit 77 Positionen für 15-mL-Sarstedt Probegefäße auf den Außenspur und 10 Positionen für 30-mL-Sarstedt Probegefäße auf der Innenspur

Option	Beschreibung
	49 Pos. Probenteller mit 49 Positionen für 30-mL-Sarstedt
	30 Pos. Probenteller mit 30 Positionen für 50-mL-Sarstedt Probengefäße
Version	Versionsnummer der Probengebersoftware

Spülen

Option	Beschreibung
Spülmodus	aus Die Spülung ist ausgeschaltet. Es wird nicht automatisch gespült. nach jeder Probe Spülung nach jeder Probe, aber nicht innerhalb einer Statistikserie
Spülzeit	In dieser Zeit wird Spüllösung aus dem Spülgefäß angesaugt.
Zyklen Mischgefäß	Anzahl der Spülzyklen für das Mischgefäß In einem Spülzyklus wird das Mischgefäß mit Spülflüssigkeit/Verdünnungslösung gefüllt und wieder geleert.

Reinigungskontrolle

Option	Beschreibung
Reinigungskontrolle	Reinigungskontrolle bei Konzentrationsüberschreitung Der Reinigungsfortschritt wird durch wiederholte Messung geprüft.
Kontrollgrenze (Ext.)	Auf diesen Wert muss der Signalpegel während der Spülung zurückgegangen sein, bevor die verdünnten Proben oder Proben mit geringerer Konzentration gemessen werden.

Sonderfunktionen

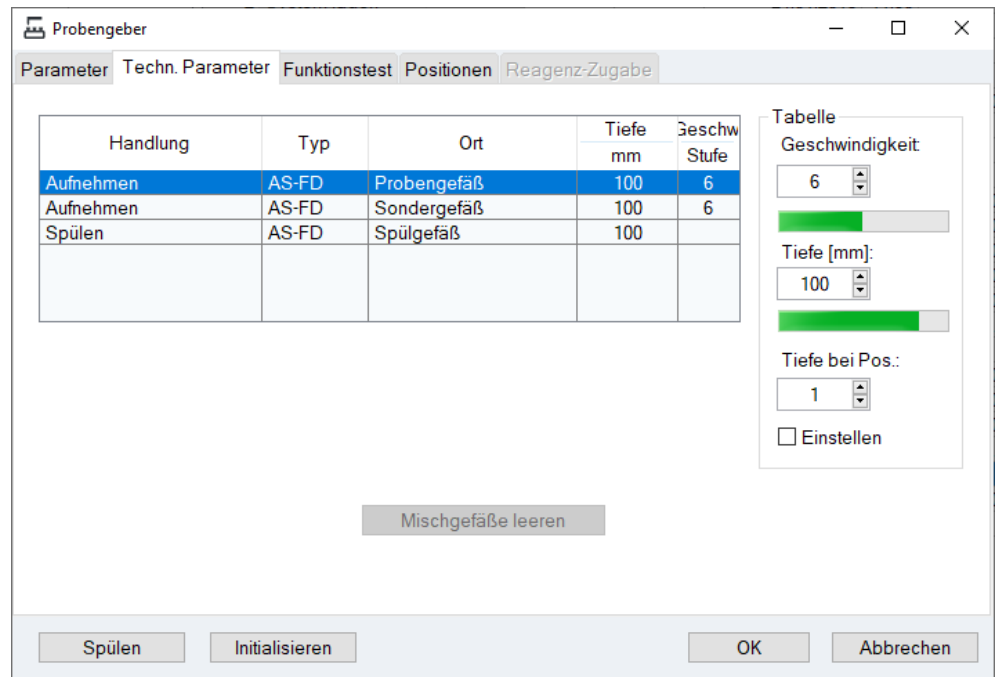
Das Mischgefäß wird während einer ablaufenden Sequenz automatisch gespült. Sie können den Spülvorgang des Mischgefäßes manuell starten, um z. B. das Gefäß nach Ende der Messung zu reinigen.

Option	Beschreibung
Spülen Mischgefäß	Mischgefäß separat außerhalb einer Sequenzmessung spülen Volumen Spülvolumen eingeben Start Spülvorgang starten

9.5.2 Technische Parameter der Probengeber für Flammentechnik

Im Fenster **Probengeber | Techn. Parameter** spezifizieren Sie folgende Parameter:

- Eintauchtiefe der Kanüle in die verschiedenen Gefäße
- Arbeitsgeschwindigkeit des Dosierers
- Ausrichtung des Probengeberarms zu den Probengefäßen



Für die einzelnen Gefäßtypen werden folgende Handlungen berücksichtigt:

Gefäß	Handlung
Probengefäß	Proben durch Dosierer aufnehmen bzw. durch Zerstäuber (Flammtechnik) oder Schlauchpumpe (Hybrid-Technik) ansaugen
Sondergefäß	Sonderproben aufnehmen oder ansaugen
Mischgefäß	Analyt- und Verdünnungslösung abgeben, sowie Proben nach der Verdünnung aufnehmen
Spülgefäß	Kanüle und Ansaugweg spülen
Reagenz-Zugabe	Programmierte Reagenzienzugabe zur Probe

Elemente der Handlungstabelle

Spalte	Beschreibung
Handlung	Mögliche Handlungen: Aufnehmen Probe aus dem Gefäß zur Abgabe ins Mischgefäß oder Abgabe in die Flamme aufnehmen Abgeben Probe in das Mischgefäß abgeben Spülen Spüllösung aufnehmen
Typ	Angeschlossener Probengebertyp
Ort	Gefäß, auf das sich die Handlung bezieht
Tiefe	Eintauchtiefe der Kanüle in mm
Geschw.Stufe	Arbeitsgeschwindigkeit des Dosierers Höhere Werte lassen den Dosierer schneller, kleinere Werte langsamer arbeiten. Empfohlene Werte: Aufnahme von Proben: Mittlere Geschwindigkeitsstufen Abgabe ins Mischgefäß: Eine der beiden höchsten Stufen, damit das schnelle Einspritzen zur vollständigen Durchmischung führt. Die vollständige Durchmischung wird außerdem durch eine feste Wartezeit vor der Aufnahme aus dem Mischgefäß (oder Probengefäß) unterstützt.

Spalte	Beschreibung
	Die Aufnahme von Verdünnungslösung und des trennenden Luftsegments erfolgen mit fester Geschwindigkeit.

Bereich Tabelle

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


Option	Beschreibung
Geschwindigkeit	Geschwindigkeit des Dosierers
Tiefe	Eintauchtiefe der Kanüle Die Tauchtiefe wird von der höchsten Position des Probengeberarms aus gemessen.
Tiefe bei Pos.	An dieser Position wird das Sonder- oder Probengefäß überprüft.
Einstellen	Den Probengeberarm zum Gefäß bewegen Wenn die Option nicht aktiviert ist, wird die Eintauchtiefe und Geschwindigkeit geändert, ohne dass sich der Probengeberarm über ein Gefäß bewegt.

Sehen Sie dazu auch

 Tauchtiefe und Dosiergeschwindigkeit der Probengeber einstellen [▶ 146]

9.5.3 Tauchtiefe und Dosiergeschwindigkeit der Probengeber einstellen

Für die Probengeber für Flammentechnik und Graphitofentechnik können Sie die Tauchtiefe der Kanüle/des Dosierschlauchs und die Dosiergeschwindigkeiten der Lösungen in den verschiedenen Gefäßen optimieren.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Probengeber | Techn. Parameter** mit Klick auf .
- ▶ Markieren Sie die Tabellenzeile, deren Parameter Sie ändern wollen.
- ▶ Bei der Spezifikation von Proben- oder Mischgefäßen stellen Sie im Feld **Tiefe bei Pos.** die Position auf dem Probensteller ein, an welcher Sie die Eintauchtiefe überprüfen wollen.
- ▶ Nur AS-GF und MPE 60/2: Wenn die Verdünnung in Probengefäßen im Fenster **Methode | Probenezufuhr** aktiviert ist, stellen Sie die Position der Mischgefäße ein.
- ▶ Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Einstellen**, um den Probenarm auf die Gefäßposition zu bewegen.
- ▶ Beobachten Sie die Bewegung des Probengeberarms und ändern Sie die Parameter **Geschwindigkeit** und **Tiefe** bis zum gewünschten Resultat.

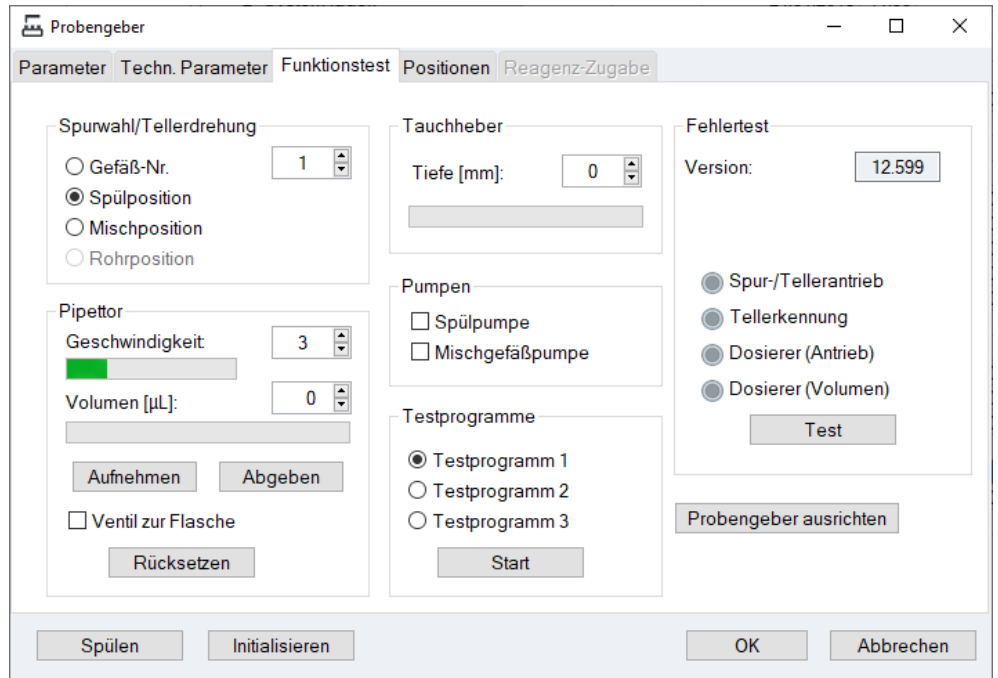
Sehen Sie dazu auch

 Technische Parameter der Probengeber für Flammentechnik [▶ 144]

 Technische Parameter des Probengebers für Graphitofentechnik [▶ 152]

9.5.4 Funktionsprüfung des Probengebers für Flammentechnik

Im Fenster **Probengeber | Funktionstest** können die Funktionen des Probengebers überprüft werden.



Spurwahl/Tellerdrehung

Der Probengeberarm wird über verschiedene Positionen des Probengebers bewegt.

Option	Beschreibung
Gefäß-Nr.	Das im danebenstehenden Listenfeld ausgewählten Probengefäß anfahren
Spülposition	Spülgefäß anfahren
Mischpositionen	Nur für Probengeber mit Verdünnungsfunktion Mischgefäß anfahren

Pipettor

Nur für Probengeber mit Verdünnungsfunktion

In diesen Tests werden die Funktionen der Verdünnungseinheit (Fluidik-Modul) geprüft.

Option	Beschreibung
Geschwindigkeit	Dosiergeschwindigkeit Stufe 1 – minimale Dosiergeschwindigkeit Stufe 12 – höchste Dosiergeschwindigkeit
Volumen	Aufzunehmendes Pipettivolumen
Ventil zur Flasche	Ventil zur Flasche schalten Das Ventil schaltet den Fluss zwischen der Flasche mit Verdünnungsmittel und der Probe. Beim Schalten muss das Ventil hörbar klicken.
Aufnehmen	Das eingestellte Volumen mit der eingestellten Dosiergeschwindigkeit aufnehmen
Abgeben	Das eingestellte Volumen mit der eingestellten Dosiergeschwindigkeit abgeben
Rücksetzen	Volumeneinstellungen zurücksetzen

Tauchheber

Der Probengeberarm wird an der bei **Spurwahl/Tellerdrehung** ausgewählten Position um den Wert **Tiefe** abgesenkt.

Pumpen

Durch Aktivieren und Deaktivieren der Optionen schalten Sie die Pumpen des Probengebers.

Option	Beschreibung
Spülpumpe	Pumpe für Zuführung zum Spülgefäß
Mischgefäßpumpe	Pumpe zum Abpumpen des Mischgefäßes

Testprogramme

Diese Tests erfolgen mit vorkonfigurierten, trocken ablaufenden Prüfprogrammen. Die im Test angefahrenen Gefäße müssen **leer** sein! Nach Ablauf der Testprogramme erfolgt ein Hinweis über den Testenerfolg. Der Start des ausgewählten Testprogramms erfolgt mit der Schaltfläche Start .

Programm	Beschreibung
Testprogramm 1	Position 1 anfahren und eintauchen Kanüle spülen Position 33 anfahren und eintauchen Kanüle spülen Position 42 anfahren und eintauchen Kanüle spülen
Testprogramm 2	Testprogramm 1 abarbeiten 5 mL Verdünnungslösung ins Mischgefäß abgeben Kanüle spülen Mischgefäß entleeren 5 mL Verdünnungslösung ins Mischgefäß abgeben Kanüle spülen Mischgefäß entleeren
Testprogramm 3	In jede Position eintauchen


Fehlertest

Sie können den Probengeber auf Sensorfehler überprüfen. Jede Messung wird beim Auftreten einer der hier aufgelisteten Fehlerzustände abgebrochen (auf dem Bildschirm wird eine entsprechende Fehleranzeige ausgegeben). Den Fehlertest starten Sie mit Klick auf **Test** . Das Prüfergebnis wird bei erfolgreichem Test mit einem grünen, bei negativem Testergebnis mit einem roten Kontrollkreis angezeigt.

Wird ein Test nicht bestanden, so können folgende Fehlerursachen vorliegen:

Fehler	Beschreibung
Füllstand Spüllösung	Füllstand des Vorratsgefäßes zu niedrig (Gefäß leer)
Füllst. Vorratsflasche	Füllstand des Vorratsgefäßes zu niedrig (Gefäß leer)
Spur-/Tellerantrieb	Schwenkbewegung des Probengeberarms und Drehung des Tellerantriebs defekt
Tellerkennung	Probenteller wurde nicht erkannt
Dosierer (Antrieb)	Fehler des Dosierers
Dosierer (Volumen)	Vom Dosierer wurde ein zu großes Volumen aufgenommen

Sehen Sie dazu auch

 Probengeber justieren [▶ 149]

9.5.5 Probengeber justieren

Die Probengeber sind ab Werk justiert. Eine Nachjustierung müssen Sie nur in seltenen Fällen (z. B. nach einem unsachgemäßen Transport) ausführen, wenn der Probengeberarm nicht mehr mittig in die Gefäße eintaucht. Die Nachjustierung erfolgt rechnergesteuert im Fenster **Probengeber ausrichten**.

Zu justierende Position

Der Probengeberarm kann auf folgende Positionen justiert werden:


Option	Beschreibung
Mischpositionen	Nur Probengeber mit Verdünnungsfunktion Mischgefäß
Teller	Position 1 auf dem Probensteller
Spülposition	Spülgefäß

Justierung der Positionen



Für die Justierung der Positionen werden angepasste Optionen bereitgestellt.

Option	Beschreibung
Tiefe	Mit diesem Feld kann die Kanüle in das jeweilige Gefäß abgesenkt oder herausgefahren werden. Dadurch kann die Position zur Gefäßmitte besser beurteilt werden. Die Tauchtiefe ist hier nur für die Spülposition ein optimierbarer Parameter.
Schwenkarm	Mit Klick auf die Schaltflächen den Probengeberarm schwenken. Alternativ den Arm mit den Pfeiltasten Links/Rechts auf der Tastatur bewegen.
Probensteller	Mit Klick auf die Schaltflächen den Probensteller drehen. Alternativ den Teller mit den Pfeiltasten Oben/Unten auf der Tastatur bewegen.
Schritte	Probensteller drehen
Speichern	Neue Parameter für die ausgewählte Position speichern

Probengeber ausrichten

- ▶ Setzen Sie auf Position 1 des Probenstellers ein Probengefäß.
- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Probengeber | Funktionstest** mit Klick auf . Klicken Sie dort auf **Probengeber ausrichten**.
- ▶ Wählen Sie eine Position zur Justierung.
- ▶ Passen Sie die Tauchtiefe so an, dass die Position zum Gefäß gut bewertet werden kann.
- ▶ Justieren Sie die Position des Probengeberarms mit den Schaltflächen nach.
- ▶ Zusätzlich bei **Teller**: Justieren Sie die Position des Probenstellers.
- ▶ Die neuen Parameter der Position mit Klick auf **Speichern** in die Firmware des Probengebers übernehmen.
- ▶ Die vorangegangenen Schritte für die noch nicht justierten Positionen wiederholen.
 - ✓ Die neuen Positionen sind dauerhaft in der Firmware des Probengebers gespeichert.

Sehen Sie dazu auch

-  Funktionsprüfung des Probengebers für Flammentechnik [▶ 146]
-  Funktionsprüfung des Probengebers für Graphitofentechnik [▶ 156]

9.5.6 Positionsübersicht im Probengeber für Flammentechnik


Im Fenster **Probengeber | Positionen** werden die in der aktuellen Sequenz verwendeten Probenteller-Positionen angezeigt. Für die Anzeige können die Anzeigemodi **Alle Positionen** oder **Nur Sonderpositionen** gewählt werden.

Hinweis:

Für die Anzeige dieses Fensters muss in der aktuellen Methode mindestens eine Linie geladen sein.

9.5.7 Zugabe von Reagenzien zur Probe

Im Fenster **Probengeber | Reagenz-Zugabe** können Sie mit einem Probengeber automatisch ein Reagenz zu den Proben pipettieren. Das Reagenz muss in einem Probengefäß auf dem Probenteller bereitgestellt werden. Die Karte **Reagenz-Zugabe** wird nur angezeigt, wenn eine Methode und eine dazugehörige Sequenz aktiviert sind.

- ▶ Bestücken Sie den Probenteller mit Proben entsprechend der Sequenz. Stellen Sie das Reagenz auf eine freie Tellerposition.
- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Probengeber | Reagenz-Zugabe** mit Klick auf .
- ▶ Klicken Sie auf **Pos. von Sequenz**.
Die Probenpositionen werden aus der Sequenz in die Probentabelle des Fensters übertragen.
- ▶ Geben Sie für das Reagenz eine Bezeichnung im Feld **Name** und die Tellerposition im Feld **Probenposition im Probengeber (falls verwendet)** ein.
- ▶ Aktivieren Sie die Option **Faktor einrechnen**, wenn für den Verdünnungsfaktor der Probe die Zugabe der Reagenz berücksichtigt werden soll.
- ▶ Geben Sie in der Probentabelle die Analytvolumen der Proben ein und das gewünschte Volumen der Reagenz.
- ▶ Markieren Sie in der Probentabelle alle Proben, denen die Reagenz zuzugeben ist. Mehrfachmarkierungen sind mit gedrückter Strg- bzw. Alt-Taste möglich.
- ▶ Starten Sie die Zugabe der Reagenz mit Klick auf **Start Zugabe**.
 - ✓ Die Reagenzzugabe wird abgearbeitet. Alle bearbeiteten Proben werden mit „*“ gekennzeichnet.


9.6 Probengeber für Graphitofentechnik

Die Software unterstützt folgende Probengeber für die Graphitofentechnik:

- AS-GF – Probengeber ohne Mischgefäß
- MPE 60 – Probengeber mit Mischgefäß
- MPE 60/1 – Probengeber ohne Mischgefäß

Der Probengeber ist für die Graphitofentechnik obligatorisch. Der angeschlossene Probengeber wird bei der Geräteinitialisierung erkannt.

Die für die Analyse unmittelbaren Parameter (Belegung auf dem Probenteller oder Verdünnung) spezifizieren Sie in der Methode, der Sequenz und in der Proben-ID.

Das Fenster **Probengeber** öffnen Sie mit dem Symbol  oder dem Menübefehl **Methodenentwicklung | Probengeber**.

Das Fenster **Probengeber** beinhaltet folgende Funktionen:

- Angeschlossene Probengeber-Typ anzeigen
- Probengeber justieren

- Probengeber zusätzlich spülen
- Probengeber erneut initialisieren
- Funktionstest durchführen
- Probenbelegung anzeigen
- Reagenzienzugabe durchführen

Die für die Analyse unmittelbaren Parameter (Belegungen auf dem Probensteller, Verdünnung, Mischung und Spülschritte) spezifizieren Sie in der Methode, der Sequenz und der Probenidentifikation.

Probengeber initialisieren

Der Probengeber wird grundsätzlich zu Beginn der Arbeit mit dem AAS im Fenster **Quickstart** initialisiert. Eine erneute Initialisierung könnte notwendig sein, wenn der Probengeber seine Orientierung verloren hat, z. B. durch einen mechanischen Stoß.

- ▶ Im Fenster **Probengeber** auf **Initialisieren** klicken.
 - ✓ Die Verbindung zwischen Probengeber, AAS und PC wird hergestellt.

Probenschlauch spülen

Spülflüssigkeit wird über den Dosierer durch den Probenschlauch gepumpt und in das Spülgefäß abgegeben.

- ▶ Im Fenster **Probengeber** auf **Spülen** klicken.
 - ✓ Der Probenschlauch wird gespült.



HINWEIS

Kurzschluss am Gerät durch falsches Anschließen des Probengebers

Schalten Sie vor der Installation des Probengebers das AAS-Gerät aus und ziehen Sie den Netzstecker aus der Steckdose. Sonst kann ein Kurzschluss Kommunikationsfehler verursachen oder die Schnittstelle beschädigen.

9.6.1 Probengeber für Graphitofentechnik spezifizieren

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

- Probengebertyp
- Spülparameter
- Einstellungen für die Reinigungskontrolle
- Funktion zum Spülen des Mischgefäßes

Die Parameter **Spülen** und **Reinigungskontrolle** werden aus der aktuellen Methode übernommen. Änderungen im Fenster **Probengeber | Parameter** haben jedoch keinen Einfluss auf die Einträge in der Methode.

Probengeber

Option	Beschreibung
Typ	Auswahl / Anzeige des angeschlossenen Probengebers "-": Kein Probengeber ausgewählt. AS-GF/MPE 60: Probengeber für die Graphitrohrtechnik
Probensteller	"-": Kein Teller aufgesetzt 89 Pos.: Für MPE 60 Probensteller mit 77 Probengefäßen (V = 2 mL), 4 Sonderprobengefäße (V = 5 mL) und 8 Sonderprobengefäße (V = 2 mL)

Option	Beschreibung
	108 Pos.: Für AS-GF Probenteller mit 100 Probengefäßen (V = 1,5 mL) und 8 Zentralgefäßen für Verdünnungsmittel, Sonderproben, Standards, Modifikatoren usw. (V = 5 mL)
Version	Versionsnummer der Probengeber-Firmware

Spülen

Option	Beschreibung
Spülmodus	aus Spülung ist ausgeschaltet. Es wird nicht automatisch gespült. nach jeder Probe Spülung nach jeder Probe, aber nicht innerhalb einer Statistikserie nach jeder Messung Spülung nach jeder Messung, also auch innerhalb einer Statistikserie nach jeder Komponente Nach Überführung jeder Komponente (Modifikator, Standard, Probe, usw.) ins Graphitrohr wird der Probengeber gespült.
Spülzyklen Spülgefäß	Anzahl der Spülzyklen pro Spülung, 1 bis 5

Reinigungskontrolle

Option	Beschreibung
Reinigungskontrolle	Reinigungskontrolle bei Konzentrationsüberschreitung Der Reinigungsfortschritt wird durch wiederholte Messung geprüft.
Kontrollgrenze (Ext.)	Auf diesen Wert muss der Signalpegel zurückgegangen sein, bevor verdünnte Proben oder Proben mit geringerer Konzentration gemessen werden.

MPE 60 Mischgefäß spülen

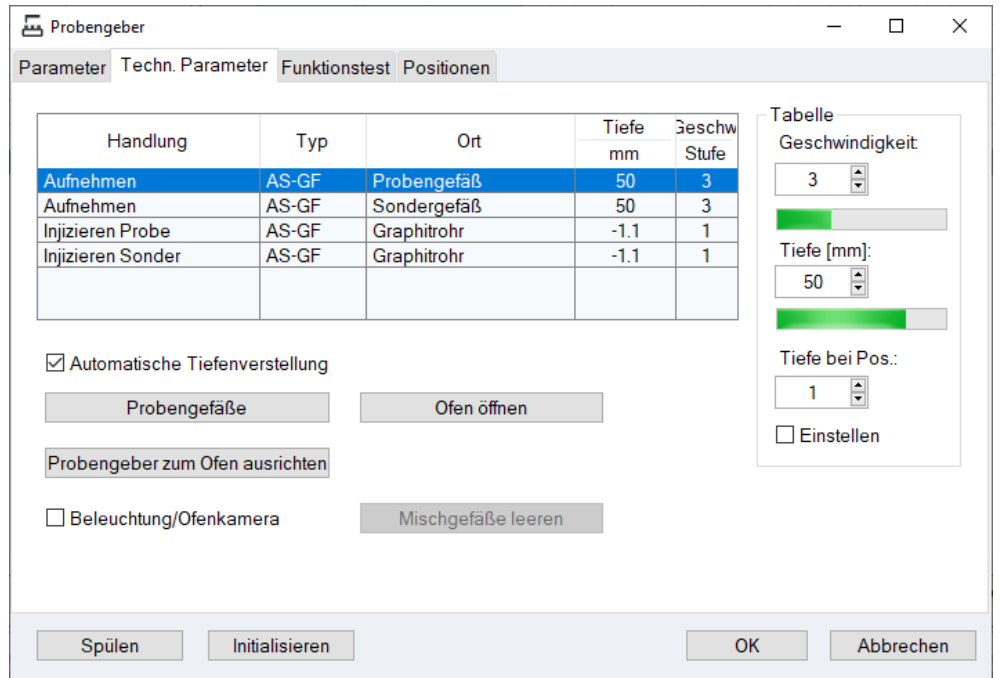
Beim Probengeber MPE 60 mit Verdünnungsfunktion kann das Mischgefäß gespült werden.

Option	Beschreibung
Spülen Mischgefäß	Mischgefäß separat außerhalb der Messung einer Sequenz spülen Volumen Spülvolumen eingeben Start Mischgefäß spülen
Zyklen Mischgefäß	Anzahl der Spülzyklen für das Mischgefäß In einem Spülzyklus wird das Mischgefäß mit Spülflüssigkeit/Verdünnungslösung gefüllt und wieder geleert.

9.6.2 Technische Parameter des Probengebers für Graphitfentechnik

Im Fenster **Probengeber | Techn. Parameter** spezifizieren Sie folgende Parameter:

- Eintauchtiefe der Kanüle/des Dosierschlauchs in die verschiedenen Gefäße
- Arbeitsgeschwindigkeit des Dosierers
- Ausrichtung des Probengeberarms zu den Probengefäßen
- Automatische Tiefenverstellung bei Volumenabnahme während der Analyse
- Ausrichtung des Probengebers zum Graphitrohr



Für die einzelnen Gefäßtypen werden folgende Handlungen berücksichtigt:

Option	Beschreibung
Probengefäße	Proben durch Dosierer aufnehmen
Sondergefäße	Sonderproben aufnehmen
Mischgefäß	Analyt- und Verdünnungslösung abgeben, sowie Proben nach der Verdünnung aufnehmen
Graphitrohr	Proben oder Sonderproben in das Graphitrohr injizieren

Elemente der Handlungstabelle

Option	Beschreibung
Handlung	<p>Aufnehmen Probe aus dem Probengefäß, Sondergefäß oder Mischgefäß aufnehmen</p> <p>Abgeben Probe in das Mischgefäß abgeben</p> <p>Injizieren Probe / Injizieren Sonder Probe oder Sonderprobe in das Graphitrohr injizieren</p>
Typ	Angeschlossener Probengebertyp
Ort	Gefäß, auf das sich die Handlung bezieht
Tiefe	Eintauchtiefe der Kanüle in mm
Geschw.Stufe	<p>Arbeitsgeschwindigkeit des Dosierers</p> <p>Höhere Werte lassen den Dosierer schneller, kleinere Werte langsamer arbeiten. Empfohlene Werte:</p> <p>Aufnahme von Proben: 3</p> <p>Abgabe in das Mischgefäß: 9</p> <p>Injektion in das Graphitrohr: 1</p>

Bereich Tabelle

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

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

Automatisch Tiefenverstellung

Option	Beschreibung
Automatische Tiefenverstellung	Eintauchtiefe des Dosierschlauchs in Proben- und Sondergefäße wird nach Probenentnahme automatisch an das neue Volumen angepasst.
Probengefäße	Nur aktiv, wenn Automatische Tiefenverstellung aktiv ist Öffnet das Fenster Positionen, Volumen und Tiefen Probengeber zur Einstellung abweichender Gefäßgeometrien und Volumina für einzelne Gefäße. Die Einstellungen werden bei der automatischen Tiefenverstellung berücksichtigt.

Weitere Funktionen

Option	Beschreibung
Mischgefäße leeren	Nur MPE 60/2 und AS-GF Die Schaltfläche ist aktiv, wenn im Fenster Methode Probenzufuhr Probengefäße als Mischgefäße definiert wurden. Mit Klick auf die Schaltfläche werden diese Positionen für eine erneute Verwendung freigegeben.
Ofen öffnen / Ofen schließen	Ofen zum Wechsel des Ofenrohrs öffnen und schließen
Probengeber zum Ofen ausrichten	Softwareunterstützte Ausrichtung des Probengebers zum Graphitofen starten

Sehen Sie dazu auch

- ☰ Tauchtiefe und Dosiergeschwindigkeit der Probengeber einstellen [▶ 146]
- ☰ Automatische Tiefenverstellung bei Probengeber für Graphitofentechnik [▶ 154]
- ☰ Probengeber zum Graphitofen ausrichten [▶ 156]

9.6.3 Automatische Tiefenverstellung bei Probengeber für Graphitofentechnik

Mit der automatischen Nachstellung der Eintauchtiefe des Dosierschlauchs in die Proben- und Sondergefäße wird eine unnötige Kontamination des Dosierschlauchs verhindert. Der Dosierschlauch taucht nur so tief wie zur Probenentnahme nötig in das Probengefäß ein. Mit zunehmender Entnahme wird die Eintauchtiefe automatisch nachgeregelt.

Die im Fenster **Probengeber | Techn. Parameter** eingestellten Tauchtiefen für Proben- bzw. Sondergefäße gelten zunächst für alle Gefäße auf dem Probensteller.

Von den Standardgefäßen abweichende Füllvolumina oder Gefäßgrößen können separat spezifiziert und damit bei der automatischen Tiefenverstellung berücksichtigt werden.

- ▶ Aktivieren Sie im Fenster **Probengeber | Techn. Parameter** das Kontrollkästchen **Automatische Tiefenverstellung**.
- ▶ Klicken Sie auf **Probengefäße**.
 - ✓ Es öffnet sich das Fenster **Positionen, Volumen und Tiefen Probengeber**.

Positionen, Volumen und Tiefen Probengeber

	Sondergefäße 101 - 108	Probengefäße 1 - 100
Position:	101	1
Volumen [µL]:	0	0
Tiefe [mm]:	0.0	0.0
Durchmesser [mm]:	18.5	12.0
	Löschen Volumen	Löschen Volumen

Maximale Eintauchtiefen (Auto-Verstellung)

Probengefäße Tiefe [mm]: Position:

Sondergefäße 28 101

Durchmesser

Einstellen Speichern Rücksetzen OK

- ▶ Spezifizieren Sie einzelne Sonder- und Probengefäße folgende Parameter:

Option	Beschreibung
Position	Gefäßposition auf dem Probenteller, für welche die drei angezeigten Werte Volumen, Tiefe und Durchmesser gelten, einstellen. Nehmen Sie für jedes Gefäß, das geändert werden soll, die Einstellungen vor.
Volumen	Zeigt das aus dem Gefäß bereits entnommene Probenvolumen an bzw. ermöglicht bei einem nicht vollgefüllten Gefäß die Eingabe des fehlenden Probenvolumens. Der Wert wird nach jeder Probenentnahme vom Programm aktualisiert.
Tiefe	Zeigt zusätzliche Tiefe entsprechend dem bereits entnommenen Probenvolumen an. Der Wert wird nach jeder Probenentnahme neu berechnet. Die Gesamteintauchtiefe ist die Summe aus der spezifizierten Tauchtiefe (Spalte Tiefe auf Karte Techn. Parameter) und der hier angezeigten zusätzlichen Tiefe.
Durchmesser	Zeigt Gefäßdurchmesser an. Auf dieser Grundlage wird entsprechend des entnommenen Volumens die Tiefe berechnet.
Durchmesser	Für Gefäße mit von den Standardgefäßen abweichenden Dimensionen Wenn markiert, kann der Durchmesser für jedes Gefäß individuell spezifiziert werden.
Löschen Volumen	Volumenwerte für alle Sondergefäße bzw. Probengefäße auf 0 zurücksetzen.
Rücksetzen	Alle Volumina und Tiefen für alle Gefäße auf 0, die Durchmesser auf die zuletzt mit OK gespeicherten Werte zurücksetzen.


Maximale Eintauchtiefe (Auto-Verstellung)

Durch Spezifikation einer maximalen Eintauchtiefe wird verhindert, dass der Dosierschlauch auf den Gefäßboden aufstößt und sich verbiegt.

Option	Beschreibung
Probengefäß	Wenn markiert, gelten die maximalen Tauchtiefen-Einstellungen für Probengefäße.
Sondergefäß	Wenn markiert, gelten die maximalen Tauchtiefen-Einstellungen für Sondergefäße.
Tiefe	Maximale Eintauchtiefe des Probengebers in das Proben- oder Sondergefäß Hinweis: Wenn das Kontrollkästchen Einstellen markiert ist, taucht der Probengeber unmittelbar auf die neue Tiefe ein! Stellen Sie sicher, dass der Probengeber-Weg nicht blockiert ist. Speichern Sie die aktuelle Tauchtiefe anschließend mit Klick auf Speichern .
Position	Probentellerposition, an der die Tauchtiefen-Einstellungen getestet werden
Einstellen	Wenn markiert, taucht der Dosierschlauch entsprechend der unter Tiefe eingestellten Tiefe in das unter Position spezifizierte Gefäß ein. Die Eintauchtiefe kann dann visuell geprüft werden.
Speichern	Die veränderte Tauchtiefe für den Gefäßtyp speichern

9.6.4 Probengeber zum Graphitofen ausrichten

Die Feinausrichtung des Probengebers zum Graphitofen erfolgt softwaregestützt. Dabei wird der Probengeber so ausgerichtet, dass der Dosierschlauch die Proben optimal im Graphitrohr ablegen kann, ohne den Dosiereinsatz zu berühren. Es wird auch die Injektionstiefe für die Probe eingestellt.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Probengeber | Techn. Parameter** mit Klick auf .
- ▶ Klicken Sie dort auf **Probengeber zum Ofen ausrichten**.
 - ✓ Der Wizzard zur Ausrichtung des Probengebers startet. Folgen Sie den weiteren Anweisungen auf dem Bildschirm.

9.6.5 Funktionsprüfung des Probengebers für Graphitofentechnik

Sie können die Funktionen des Probengebers im Fenster **Probengeber | Funktionstest** überprüfen.

Spurwahl/Tellerdrehung

Der Probengeberarm wird über verschiedene Positionen des Probengebers bewegt.

Option	Beschreibung
Gefäß-Nr.	Ausgewähltes Probengefäß anfahren
Spülposition	Spülgefäß anfahren
Mischpositionen	Nur Probengeber mit Verdünnungsfunktion Mischgefäß anfahren
Rohrposition	Graphitrohr anfahren

Pipettor

In diesem Test wird der Dosierer geprüft.

Option	Beschreibung
Geschwindigkeit	Dosiergeschwindigkeit einstellen
Volumen	Aufzunehmendes Pipettiervolumen einstellen
Aufnehmen	Das eingestellte Volumen mit der vorgegebenen Dosiergeschwindigkeit aufnehmen

Option	Beschreibung
Abgeben	Das eingestellte Volumen wird mit der vorgegebenen Geschwindigkeit abgegeben
Ventil zur Flasche	Das Ventil schaltet den Fluss zwischen der Flasche mit Verdünnungsmittel und der Probe. Beim Schalten muss das Ventil hörbar klicken.
Rücksetzen	Volumeneinstellung zurücksetzen

Tauchheber

Der Probengeberarm wird an der bei Spurwahl/Tellerdrehung ausgewählten Position abgesenkt.

- ▶ Geben Sie im Feld **Tiefe** die Tiefe, um die der Probengeberarm abgesenkt wird, ein.

Testprogramme

Testen des Probengebers mit vorkonfigurierten, trocken ablaufenden Prüfprogrammen. Die im Test angefahrenen Gefäße müssen leer sein! Nach Ablauf der Testprogramme erfolgt ein Hinweis über den Testergebnis.

Der Start des ausgewählten Testprogramms erfolgt mit Klick auf **Start**.

Programm	Beschreibung
Testprogramme 1	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Volumen aus Position 1 aufnehmen ▪ Volumen aus Position 41 aufnehmen ▪ Volumen in Graphitrohr abgeben ▪ Dosierschlauch 2 x spülen
Testprogramme 2	<p>Nur für MPE 60</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Verdünnungslösung aus Vorratsflasche aufnehmen ▪ Volumen aus Position 10 aufnehmen ▪ Volumen ins Mischgefäß abgeben ▪ Volumen aus Mischgefäß aufnehmen ▪ Volumen ins Graphitrohr abgeben ▪ Dosierschlauch spülen ▪ Mischgefäß entleeren ▪ Mischgefäß spülen und entleeren
Testprogramme 3	In jede Position eintauchen

Fehlertest

Der Probengeber wird auf Sensorfehler überprüft. Jede Messung wird beim Auftreten einer der hier aufgelisteten Fehlerzustände abgebrochen (auf dem Bildschirm wird eine entsprechende Fehleranzeige ausgegeben). Den Fehlertest starten Sie mit Klick auf **Test**. Das Prüfergebnis wird bei erfolgreichem Test mit einem grünen, bei negativem Testergebnis mit einem roten Kontrollkreis angezeigt.

Wenn der Test nicht bestanden wird, können folgende Fehlerursachen vorliegen:

Option	Beschreibung
Füllstand Spüllösung	Füllstand des Vorratsgefäßes zu niedrig (Gefäß leer)
Füllst. Abfallflasche	Füllstand des Abfallgefäßes ist zu hoch (Gefäß voll)
Spur-/Tellerantrieb	Schwenkbewegung des Probengeberarms und Drehung des Tellerantriebs defekt
Tellerkennung	Probenteller wurde nicht erkannt
Dosierer (Antrieb)	Fehler der Dosierpumpe
Dosierer (Volumen)	Vom Dosierer wurde ein zu großes Volumen aufgenommen

Probengeber justieren

Die Probengeber sind ab Werk justiert. In seltenen Fällen kann eine Nachjustierung nötig sein. Mit Klick auf **Probengeber ausrichten** öffnen Sie das Fenster zum Nachjustieren der Probengeber.

Sehen Sie dazu auch

 Probengeber justieren [▶ 149]

9.6.6 Positionsübersicht für Probengeber für Graphitrohrtechnik

Im Fenster **Probengeber | Positionen** werden die in der aktuellen Sequenz verwendeten Probenteller-Positionen angezeigt. Für die Anzeige können die Anzeigemodi **Alle Positionen** oder **Nur Sonderpositionen** gewählt werden.

Hinweis:



Für die Anzeige dieses Fensters muss in der aktuellen Methode mindestens eine Linie geladen sein.

9.7 Feststoffprobengeber SSA 600

In der automatisierten Feststoffanalytik kommt der Feststoffprobengeber SSA 600 zum Einsatz. Der Typ des Probengebers wird bei der Initialisierung im Fenster **Quickstart** identifiziert. Das Fenster **Feststoffprobengeber** beinhaltet folgende Funktionen:

- Funktionstest des SSA 600
- Ausrichtung des SSA 600 zum Graphitrohrföfen

Der Feststoffprobengeber SSA 600 kann mit und ohne Flüssigdosierung betrieben werden, deshalb richtet sich der Funktionstest und die Justierung nach dem in der Methode spezifizierten Probengeber.

- ▶ Öffnen Sie mit dem Symbol  das Fenster **Methode**.
- ▶ Wählen Sie auf der Karte **Linien** eine Analysenlinie und aktivieren Sie auf der Karte **Probenzufuhr** die Option des installierten Probengebers z. B. **SSA600 mit Flüssig-Dosierer Automatik** aktivieren.
- ▶ Einstellungen mit **Übernehmen** aktivieren.
- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Feststoff-Probengeber** mit Klick auf das Symbol  oder mit dem Menübefehl **Methodenentwicklung | Probengeber**.

Schaltflächen im Fenster Probengeber

Schaltflächen	Beschreibung
Rücksetzen	Probenplattformen, die auf verschiedenen Positionen des Probengebers oder im Ofen liegen, aufnehmen und zum Probenteller zurück transportieren
Initialisieren	Den Probengeber neu initialisieren Der Probengeber wird grundsätzlich zu Beginn der Arbeit mit dem AAS im Fenster Quickstart initialisiert. Eine erneute Initialisierung könnte notwendig sein, wenn der Probengeber seine Orientierung verloren hat, z.B. durch einen mechanischen Stoß oder durch Betätigen der Stopptaste am Probengeber. Die Verbindung zwischen Probengeber, AAS und PC wird hergestellt.
Ausrichten	Eine Routine zur Ausrichtung des SSA 600 zum Graphitrohrföfen starten



HINWEIS

Probengeber nur mit ausgeschaltetem AAS verbinden!

Verbinden Sie nicht bei eingeschaltetem AAS den Probengeber mit dem AAS-Gerät. Es kann in diesem Fall zu Kommunikationsfehlern oder zur Zerstörung der Schnittstelle kommen.

9.7.1 Funktionsprüfung des Feststoffprobengebers

Sie können die Funktionen des angeschlossenen Probengebers im Fenster **Feststoff-Probengeber | Funktionstest** prüfen. Folgende Optionen stehen zur Verfügung:

Option	Beschreibung
Status/Taster	SSA 600-Status und den seit der letzten Abfrage betätigten Taster am SSA 600 in der jeweiligen Farbe (grün, orange, rot) anzeigen Mit Klick auf Aktualisieren wird der Status erneut abgefragt bzw. die Taster-Anzeige aktualisiert.
Position anfahren	Die im Listenfeld Pos ausgewählte Position anfahren. Dabei wird keine Plattform aufgenommen oder abgelegt.
Teller drehen	Probenteller auf die gewählte Position drehen
Transport	SSA 600 transportiert eine Plattform von einer Position zur nächsten Start- und Zielposition. Wenn Plattform aufnehmen aktiviert ist, nimmt der Greifer eine Plattform auf. Wenn Plattform ablegen aktiviert ist, legt der Greifer die Plattform am Zielort ab.
Greifer	Greifer öffnen und schließen Kanüle absenken
Waage	Das Gewicht einer auf dem Teller auf der eingestellten Position (Pos) befindlichen Plattform bestimmen Wägen mit Tarierung Vor der Wägung der Plattform erfolgt eine Tarierung der Waage. #1 zeigt das Tariergewicht an. #2 enthält das Gewicht der Plattform (ggf. mit dosierter Probe). Interne Kalibrierung Während dieser Kalibration wird die interne Kalibrierkurve der Waage neu bestimmt. Dazu wird zunächst die Waage zurückgestellt, der Nullpunkt bestimmt und anschließend ein internes Gewicht gewogen. Aus Nullpunkt und internem Gewicht wird die Kalibrierkurve der Waage ermittelt.
Dauertest	Der Probengeber transportiert 2 Plattformen (Positionen 1 und 2) zwischen Probenteller, Waage und Ofen hin und her. Die Anzahl der Transporte kann im Eingabefeld Zyklen eingegeben werden.


9.7.2 Justierung des Feststoffprobengebers

Das Fenster **Feststoff-Probengeber | Justierung** beinhaltet folgende Funktionen:

- Das Anfahren einzelner Positionen kontrollieren und justieren
- Den Probengeber zum Graphitofen ausrichten
- SSA 600 mit Dosiereinrichtung: Automatische Tiefenverstellung für die Aufnahme von Matrixmodifikatoren und flüssigen Sonderproben.
- Test der Flüssigdosierung

Option	Beschreibung
Zu justierende Position	Auswahl der Position auf dem Probengeber
Justieren Position	Ausrichten des Greifers zur eingestellten Justierposition
Greifer öffnen/ Greifer schließen	Greifer softwaregesteuert öffnen und schließen, z.B. zum Wechsel der Greiferspitzen.

Nur Probengeber mit Flüssigdosierung:

Kanüle senken	Kanüle absenken
Automatische Tiefenverstellung	Einstellungen für die automatische Tiefenverstellung bei der Flüssigdosierung
Spülen	Dosierschlauch mit der voreingestellten und mit  bestätigten Anzahl Spülzyklen spülen.
Test Flüssig-Dosierung	Flüssigdosierung überprüfen
Dosiererspritze wechseln!	Kolben des Dosierers für den Wechsel nach unten bewegen

Einzelpositionen kontrollieren / justieren

- ▶ Wählen Sie in der Tabelle **Zu justierende Position** die gewünschte Position.
- ▶ Klicken Sie in der Gruppe **Justieren Position** auf **Anfahren**, um den Probengeber auf die gewählte Position zu bewegen. Legen Sie an dieser Position eine Plattform auf und kontrollieren Sie die Lage der Plattform.
- ▶ Korrigieren Sie ggf. die Position mit den Schaltflächen in dieser Gruppe.
- ▶ Sichern Sie mit den Schaltflächen **Speichern** die geänderten Einstellungen.

Greifer zum Graphitrohrföfen ausrichten

Der Greifer des Probengebers muss softwaregesteuert zum Ofen ausgerichtet werden. Sie benötigen dazu die im Lieferumfang des Probengebers enthaltene Justierhilfe.


- ▶ Klicken Sie im Fenster **Feststoff-Probengeber | Justierung** auf **Ausrichten**.
 ✓ Nach Abschluss der Justieroutine ist der Probengeber zum Ofen ausgerichtet.

Eine ausführliche Beschreibung des Justiervorgangs finden Sie in der Betriebsanleitung "Feststoffprobengeber SSA 600".

System spülen

Nur bei SSA 600 mit Flüssigdosierung

Beim Spülen des Systems wird Verdünnungslösung aus der Vorratsflasche entnommen und durch den gesamten Weg über den Dosierer zum Dosierschlauch gepumpt und in das Spülgefäß abgegeben.

- ▶ Geben Sie im Eingabefeld **Spülzyklen** die Anzahl Wiederholungen ein.
- ▶ Speichern Sie mit dem Symbol  die Eingabe.
- ▶ Starten Sie die Spülvorgang mit der Schaltfläche **Spülen**.

Automatische Tiefenverstellung für Dosiereinheit

Generell erfolgt die Tiefenverstellung beim SSA 600 automatisch, d.h. mit zunehmender Entnahme aus den Gefäßen Probengebers wird die Eintauchtiefe nachgestellt. Ausgangsmengen, die von den in der Methode eingestellten abweichen, sind in diesem Fenster zu korrigieren. Die Einstellungen erfolgen analog den Einstellungen des Probengebers für Graphitrohrtechnik.

Sehen Sie dazu auch

-  Automatische Tiefenverstellung bei Probengeber für Graphitofentechnik [▶ 154]

10 Datenmanagement

In diesem Abschnitt finden Sie Informationen zu folgenden Themen:

- Druckfunktionen
- Verwaltung von Methoden, Sequenzen und Proben-IDs
- Verwaltung gerätespezifischer Dateien
- Definition von Einheiten für Konzentrationen und Gehalte
- Verwaltung häufig verwendeter Stocklösungen und QC-Proben

10.1 Druckfunktionen

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

Für die Ausgabe von Analysenergebnissen und Fensterinhalten werden Protokollvorlagen verwendet. Standardmäßig wird ein Satz Protokollvorlagen installiert. Bei Bedarf können diese Vorlagen mit dem Reportdesigner "Report-/Druckmodul List & Label" individuell angepasst werden.


10.1.1 Analysenergebnisse drucken

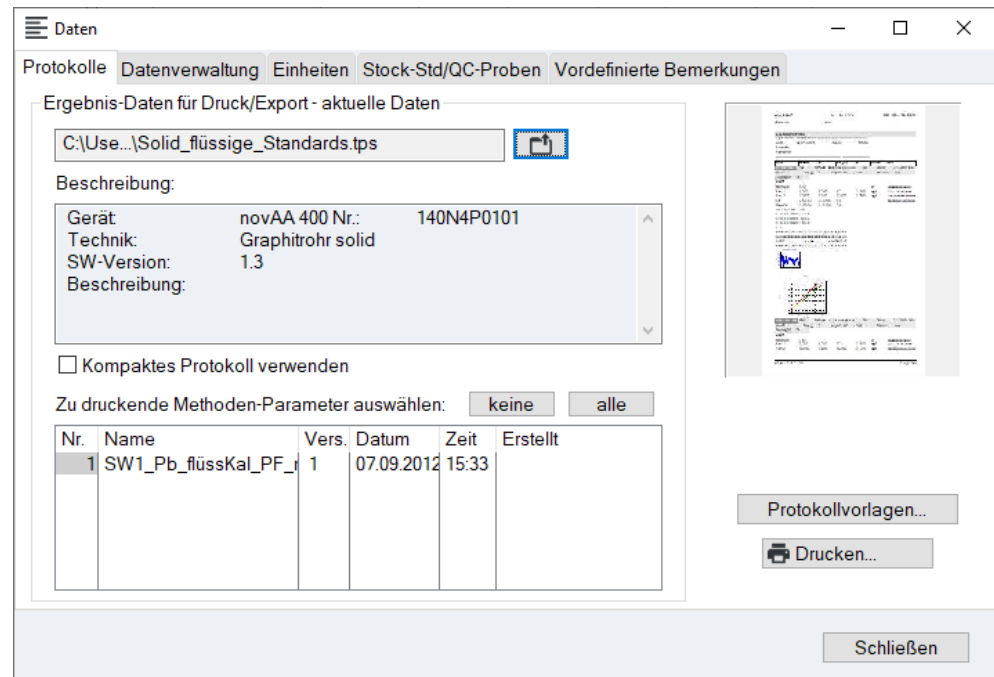
Die Software bietet verschiedene Möglichkeiten, Ergebnisdaten auszudrucken:


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

Gesamtprotokoll ausdrucken

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

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Protokolle** mit Klick auf .
- ▶ Alternativ öffnen Sie das Fenster mit dem Menübefehl **Extras | Daten** oder dem Menübefehl **Datei | Drucken | Protokoll**.
 - ✓ Angezeigt werden der Name der aktuellen Datei, Dateiinformatoren (Feld **Beschreibung**), sowie alle Methodenversionen, die zur Erzeugung der aktuellen Ergebnisdatei herangezogen wurden.



- ▶ Wenn Sie eine gespeicherte Datei drucken wollen, rufen Sie mit  das Standardfenster **Öffnen** auf und wählen Sie die gewünschte Datei aus.
- ▶ Wenn Sie den verkürzten Kompaktbericht drucken möchten, aktivieren Sie die Option **Kompaktes Protokoll verwenden**.
- ▶ Markieren Sie in der Tabelle alle Methodenversionen, die ausgedruckt werden sollen. Nehmen Sie die Markierung mit Mausclick und gedrückter Umschalt- oder Strg-Taste vor. Mit der Schaltfläche **alle** markieren Sie alle Versionen, mit **keine** entfernen Sie alle Markierungen.
- ▶ Öffnen Sie mit **Drucken** das Fenster **Aspect LS Protokoll**.
- ▶ Ändern Sie dort gegebenenfalls in der Liste **Ausgabe auf** das Ausgabeformat und stellen Sie mit **Optionen** spezielle Parameter des Ausgabeformats ein.
- ▶ Starten Sie den Ausdruck mit **Starten**.
 - ✓ Die Ausgabe erfolgt auf das gewählte Medium.


Hinweis: Nutzen Sie für den Ausdruck die Einstellung Vorschau. Mit einem Klick auf Starten werden die Druckseiten zunächst in der Vorschau angezeigt. So können Sie vor der Ausgabe auf dem Drucker prüfen, ob alle gewünschten Daten ausgegeben werden.

Aktuelle Ergebnisse drucken

Die im Hauptfenster angezeigten Ergebniskarten können gedruckt werden.

- ▶ Aktivieren Sie die Karte im Hauptfenster, deren Inhalt Sie ausdrucken wollen.
- ▶ Starten Sie den Ausdruck mit dem Menübefehl **Datei | Drucken | Aktives Fenster**.
 - ✓ Es öffnet sich das Fenster **Ausgabe der Ergebnisse**.
- ▶ Klicken Sie auf **Vollständige Darstellung**, wenn Sie die Ergebnisse mit den Signalgrafiken ausdrucken wollen. Wählen Sie **Kompakte Darstellung** für den Druck der Ergebnisse in einer kompakten Übersicht.
- ▶ Verfahren Sie weiter wie bei "Gesamtprotokoll ausdrucken" oben beschrieben.

Hinweis: Wenn Sie im Fenster **Ausgabe der Ergebnisse** das Kontrollkästchen aktivieren und anschließend auf **Vollständige Darstellung** oder **Kompakte Darstellung** klicken, erscheint dieses Fenster beim nächsten Ergebnisdruck nicht mehr, es wird automatisch der letzte Ergebnisreporttyp verwendet. Diese Einstellung können Sie im Fenster **Optionen | Ansicht** wieder zurücksetzen.

- Ausgewählte Daten drucken
- ▶ Wechseln Sie im Hauptfenster auf die Karte **Übersicht**.
 - ▶ Klicken Sie auf  im unteren Bereich dieser Karte oder wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Drucken | Aktives Fenster**.
 - ✓ Das Fenster **Drucken Übersicht** erscheint.
 - ▶ Markieren Sie alle gewünschten Linien und Parameter für den Ausdruck und bestätigen Sie die Auswahl mit **OK**.
 - ✓ Das Fenster **ASpect LS Protokoll** erscheint.
 - ▶ Verfahren Sie weiter wie bei "Gesamtprotokoll ausdrucken" oben beschrieben.

Sehen Sie dazu auch


 Ansichtsoptionen [▶ 175]

10.1.2 Weitere Analysenparameter und Einstellungen drucken

Folgende Parameter und Einstellungen der Analyse können gedruckt werden:

- Methode
- Sequenz
- Ergebnisdaten und Ergebnisübersicht
- Proben-ID
- QC (Qualitätskontrollkarten)
- Kalibration
- Probengeberpositionen

Der Druck der Parameter erfolgt aus dem jeweiligen Fenster.

- ▶ Aktivieren Sie das Fenster, dessen Inhalt Sie drucken möchten, auf der Arbeitsfläche von ASpect LS.
- ▶ Starten Sie den Druck der Parameter mit einem Klick auf  im Fenster.
- ▶ Alternativ wählen Sie den Menübefehl **Datei | Drucken | Aktives Fenster**.
 - ✓ Es öffnet sich das Fenster **ASpect LS Protokoll**.
- ▶ Ändern Sie dort gegebenenfalls in der Liste **Ausgabe auf** das Ausgabeformat und stellen Sie mit **Optionen** spezielle Parameter des Ausgabeformats ein.
- ▶ Starten Sie den Ausdruck mit **Starten**.

10.1.3 Protokollvorlagen anpassen

Protokollentwurfsmodus nutzen

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

- ▶ Aktivieren Sie den Menübefehl **Datei | Protokoll-Entwurfsmodus**.
- ▶ Öffnen Sie das Fenster, dessen Protokollvorlage Sie ändern wollen.
- ▶ Rufen Sie den Menübefehl **Datei | Drucken | Aktives Fenster** auf.
 - ✓ Es öffnet sich der Reportdesigner.
- ▶ Nehmen Sie die gewünschten Änderungen vor und speichern Sie die geänderte Protokollvorlage.
- ▶ Verknüpfen Sie die Protokollvorlage mit dem entsprechenden Druckinhalt (siehe unten "Protokollvorlagen verwalten").

Kurze Einführung in den Reportdesigner

Die einzelnen Bestandteile der Reportvorlage heißen **Objekte**. So kann z.B. eine Tabelle aus je einem Objekt für die Kopfzeile, den Listenwerten und einer Grafik bestehen.

Diese Objekte wiederum enthalten die zu druckenden Informationen und tragen die zugehörigen Layouteigenschaften wie Schriftarten, Ausrichtungen, Umbrüche, Farben, etc. Der Reportdesigner stellt verschiedene Typen von Objekten zur Verfügung, z.B. Textobjekte, Grafiken, Barcodes. Diese können im Arbeitsbereich frei platziert und in der Größe verändert werden. Je nach Art kann ein Objekt unterschiedliche Informationen darstellen oder Eigenschaften haben.


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

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

Weitere Informationen zur Bedienung und zu den Funktionen des Reportdesigners finden Sie im Handbuch "Designer.pdf" auf der ASpect LS-CD.

Das Fenster Protokollvorlagen

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


- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Protokolle** mit Klick auf .
- ▶ Öffnen Sie mit **Protokollvorlagen** das Fenster das gleichnamige Fenster.

Für folgende Fenster muss eine Protokollvorlage bereitstehen:

Name	Beschreibung
Methode/Ergebnisse	Gesamtprotokoll
Ergebnisse	Inhalt der Karte Ergebnisse im Hauptfenster
Methode	Methodenparameter im Fenster Methode
Kalibration	Kalibration der Analyse im Fenster Kalibration
QC-Karte	Daten der QC-Karten im Fenster QC
Proben-ID	Probeninformationsdaten im Fenster Proben-ID Probeninformation
QC-Probeninformation	Informationsdaten der QC-Proben im Fenster Proben-ID QC-Probeninformation
Sequenz	Sequenzfolge im Fenster Sequenz
Ergebnisse (Übersicht)	Inhalt der Karte Übersicht im Hauptfenster
Probengeber-Pos.	Belegung des Probengebers im Fenster Probengeber Positionen
SSA600-Tabelle	Inhalt der Karte Feststoff im Hauptfenster

Zuordnung ändern

Eine neue/editierte Protokollvorlage müssen Sie der entsprechenden Druckfunktion wieder zuordnen.

- ▶ Markieren Sie das Fenster, dessen Protokollvorlage geändert wird, in der Liste.
- ▶ Öffnen Sie mit Klick auf **Ändern** das Dialogfenster zum Zuordnen der Dateien.
- ▶ Wenn nur eine Protokollvorlage zugeordnet wird, aktivieren Sie die Option **Vorlagendatei verwenden (*.lst)** und wählen Sie dann nach Klick auf  die gewünschte Datei aus.

- ▶ Wenn mehrere Vorlagen gleichzeitig bei Druckstart angeboten werden sollen, aktivieren Sie die Option **Dateiauswahl zulassen (Maske, z.B. c:\Reports\Results***. Geben Sie den Masken-Namen unter Verwendung von Wildcards im Eingabefeld ein.
 - ▶ Bestätigen Sie die Einstellungen mit **OK**.
 - ✓ Die neue Protokollvorlage wird im Fenster **Protokollvorlagen** angezeigt.
- Protokollvorlage editieren
- ▶ Markieren Sie das Fenster, dessen Protokollvorlage editiert wird, in der Liste.
 - ▶ Öffnen Sie mit **Bearbeiten** das Fenster des Reportdesigners.
- Standardeinstellungen wiederherstellen
- Sie können die Einstellungen entsprechend der Programminstallation wieder herstellen.
- ▶ Klicken Sie auf Sie **Standardeinstellungen**.


Sehen Sie dazu auch

- 📖 Protokollvorlagen importieren [▶ 169]

10.2 Verwaltung für alle Dateitypen

Folgende Datentypen werden in ASpect LS erzeugt:

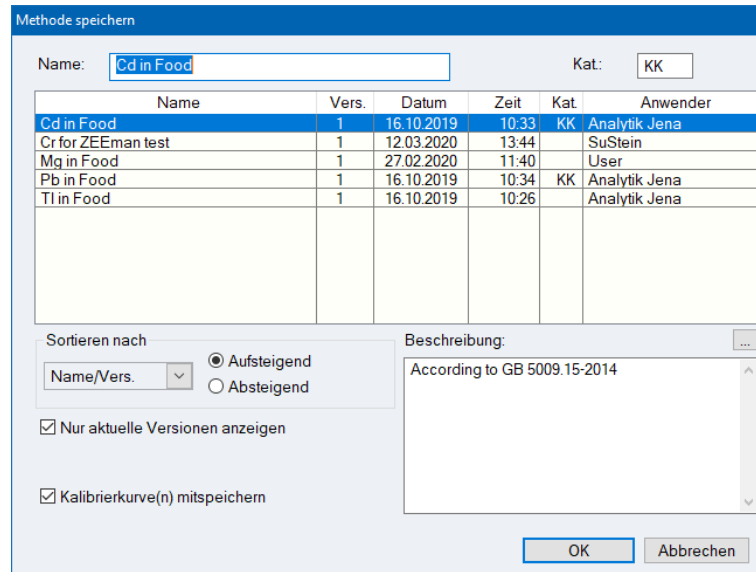
- Methoden
- Sequenzen
- Ergebnisdaten
- Protokollvorlagen
- Worksheets

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

10.2.1 Methoden und Sequenzen verwalten

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

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



Option/Anzeige	Beschreibung
Name	Namen für die Methode/Sequenz eingeben bzw. ausgewählte Methode/Sequenz anzeigen
Kat.	Zusätzliches Merkmal für die Suche der Methode/Sequenz in der Datenbank Es können max. 3 Stellen als Kategoriebezeichnung eingegeben werden. Die Anzeige der Liste können Sie durch Eingabe der Kategoriebezeichnung im Feld Kat. einschränken. Wenn Sie die Datensätze von allen Kategorien anzeigen lassen wollen, löschen Sie den Eintrag im Feld Kat. Hinweis: Bei Verwendung des optionalen 21 CFR Part 11 Konformitätsmoduls können Sie für Methoden Kategorien definieren, mit denen die Methoden als zur Verwendung freigegeben gekennzeichnet werden. In diesem Fall können bei entsprechender Benutzerberechtigung nur diese Methoden zur Messung verwendet werden.
Liste der Datensätze	Gespeicherte Datensätze mit Name, Version, Datum, Zeit, Kategorie und Anwender
Sortieren nach	Sortierung der Liste nach verschiedenen Merkmalen Das Sortieren kann je nach Auswahl der Option aufsteigend oder absteigend vorgenommen werden.
Beschreibung	Zusätzlichen Notizen, z. B. zur Verwendung der Datensätze eintragen bzw. anzeigen Vordefinierte Bemerkungen können Sie im Fenster Daten Vordefinierte Bemerkungen erstellen.
Nur aktuelle Versionen anzeigen	Wenn mehrere Versionen einer Methode/Sequenz mit gleichen Namen angelegt sind, wird nur die Methode/Sequenz mit der höchsten Versionsnummer angezeigt.

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

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

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

Datenverwaltung öffnen

▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Datenverwaltung** mit Klick auf .


- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** den zu bearbeitenden Datensatztyp aus: **Methode** oder **Sequenz**.
- Datensätze exportieren
- Mit einem Export können Sie Datensätze anderen Geräten/Computern zur Verfügung stellen. Es können mehrere Datensätze gleichzeitig in eine gemeinsame Datei exportiert werden. Exportdateien erhalten folgende Erweiterungen: Methodendatensätze - ".met", Sequenzdatensätze - ".seq".
- ▶ Öffnen Sie mit Klick auf **Export** das Datenbankfenster.
 - ▶ Markieren Sie die Datensätze und klicken Sie auf **Export**.
 - ▶ Geben Sie im Standardfenster **Speichern unter** einen Dateinamen ein und klicken Sie auf **Speichern**.
Es wird das Datenbankfenster mit den exportierten Dateien angezeigt.
 - ▶ Verlassen Sie das Datenbankfenster mit Klick auf **Schließen**.
- Datensätze importieren
- Durch Importieren können Sie Datensätze von anderen Geräten/Computern in Ihre Datenbank laden. Eine Import-Datei kann mehrere Datensätze enthalten, aus denen die zu ladenden Datensätze ausgewählt werden.
- ▶ Öffnen Sie mit Klick auf **Importieren** das Fenster **Zu importierende Datei auswählen**.
 - ▶ Wählen Sie die zu importierende Datei aus und klicken Sie auf **Öffnen**.
Es öffnet sich das Datenbankfenster mit der Ausgabe von Namen, Erstellungsdatum und Kategorie der in der Datei enthaltenen Datensätze. In der Titelzeile des Fensters wird der Name der Importdatei angezeigt.
 - ▶ Markieren Sie im Datenbankfenster die zu importierenden Datensätze und klicken Sie auf **Importieren**.
Die Datensätze werden in die Datenbank importiert. Sollte eine Methode/Sequenz mit gleichem Namen bereits vorhanden sein, so wird eine neue Version des Datensatzes angelegt. Im Datenbankfenster erscheinen die aktuellen Versionen der vorhandenen Datensätze.
 - ▶ Verlassen Sie das Datenbankfenster mit Klick auf **Schließen**.
✓ Die importierten Datensätze können jetzt in der Software verwendet werden.
- Datensätze löschen
- Mit der Löschfunktion löschen Sie dauerhaft komplette Datensätze aus der Datenbank.
- ▶ Mit Klick auf **Löschen** das Datenbankfenster öffnen.
 - ▶ Die zu löschenden Datensätze markieren.
 - ▶ Auf **Löschen** klicken.
✓ Das Datenbankfenster wird aktualisiert und zeigt nur noch die übergebliebenen Datensätze an. Bei Datensätzen mit gleichen Namen wird die Versionsnummer um 1 verringert.
- Datensätze über Menü Datei löschen
- Alternativ können Sie die Datenbankfenster zum Löschen von Datensätzen mit dem Menüpunkt **Datei | Löschen | Methode** bzw. **Datei | Löschen | Sequenz** öffnen. Verfahren Sie dann weiter wie oben beschrieben.

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Allgemeine Einstellungen der Benutzerverwaltung konfigurieren [▶ 185]

10.2.2 Ergebnisdaten verwalten

Ergebnisdaten werden während der Messung in einer Datenbank gespeichert. Bei jedem Sequenzstart wird eine neue Datenbankdatei angelegt, Sie können aber auch Messungen an eine vorhandene bereits vorhandene Datei anhängen. Ergebnisdaten erhalten die Erweiterung TPS.

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

Ergebnisdaten importieren

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

- ▶ Wählen Sie im Fenster **Quickstart** die Atomisierungstechnik, für die Daten importiert werden sollen.
- ▶ Klicken Sie im Fenster **Daten | Datenverwaltung** auf **Importieren**. Das Fenster **Ergebnisdatei(en) auswählen** erscheint.
- ▶ Markieren Sie die TPS-Dateien und klicken Sie auf **Öffnen**.
- ▶ Wählen Sie einen Unterordner für den Ergebnisspeicher und klicken Sie auf **OK**.
 - ✓ Die TPS-Dateien werden in den Ergebnisordner der aktiven Atomisierungstechnik kopiert.

Ergebnisdaten exportieren

Mit diesem Befehl kopieren Sie eine oder mehrere Ergebnisdateien in einen anderen Ordner.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Daten | Datenverwaltung** auf **Exportieren**. Das Fenster **Exportieren** mit der Übersicht über vorhandene TPS-Dateien erscheint. Für die Dateien werden Namen, Größe und Zeitpunkt der letzten Änderung aufgelistet.
- ▶ Markieren Sie die TPS-Dateien.
- ▶ Öffnen Sie mit Klick auf **Exportieren** das Fenster **Ordner suchen**.
- ▶ Wählen Sie den Zielordner aus und mit klicken Sie auf **OK**.
 - ✓ Die TPS-Dateien werden in den Zielordner kopiert.

Ergebnisdaten löschen

Sie können Ergebnisdaten dauerhaft löschen.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Daten | Datenverwaltung** auf **Löschen**. Das Fenster **Ergebnisdateien löschen** mit der Übersicht über vorhandene Ergebnisdatenbanken erscheint.
- ▶ Markieren Sie die TPS-Dateien.
- ▶ Klicken Sie auf **Löschen** und bestätigen Sie die anschließende Abfrage zum Löschen der Dateien mit **OK**.
 - ✓ Die Daten werden dauerhaft gelöscht.

Ergebnisse einzelner Proben suchen


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

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Daten | Datenverwaltung** auf **Suchen nach Probe**. Alternativ wählen Sie den Menübefehl **Extras | Suchen nach Probe**. Es erscheint das Fenster **Suchen nach Probe**.
- ▶ Geben Sie im Feld **Probe** den Probenamen ein. Wenn die eingegebene Zeichenkette Bestandteil des Namens ist, aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Teilstringsuche**.

- ▶ Den Zeitpunkt der Messung können Sie mit Aktivierung des Kontrollkästchens **Datum** eingrenzen.
- ▶ Klicken Sie auf **Start**.
In der Tabelle werden alle Ergebnisse angezeigt, die Proben mit dem eingegebenen Probenamen enthalten.
- ▶ Um eine der angezeigten Ergebnisdateien zu öffnen, markieren Sie die Datei in der Liste und klicken Sie auf **Öffnen**.
 - ✓ Die Ergebnisse werden im Hauptfenster angezeigt.


10.2.3 Protokollvorlagen importieren

Vorlagen für Druckprotokolle, die extern erstellt wurden, müssen Sie über die Datenverwaltung in die Software importieren.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Datenverwaltung** mit Klick auf .
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** die Option **Protokollvorlagen** und klicken Sie auf **Importieren**.
- ▶ Wählen Sie im Fenster **Öffnen** die Protokolldatei LST aus und klicken Sie auf **Öffnen**.
 - ✓ Die Protokollvorlage ist in die Software importiert. Ordnen Sie nun die Protokollvorlage dem Druckinhalt im Fenster **Protokollvorlagen** zu.

10.2.4 Worksheets importieren, exportieren und löschen

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

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

Worksheet importieren

- ▶ Klicken Sie auf **Importieren**.
- ▶ Klicken Sie im Fenster **Worksheet importieren** auf **Importieren**. Für den Import von Methoden und Sequenz aktivieren Sie die Option **inklusive Sequenz und Methode(n)**.
- ▶ Markieren Sie im Fenster **Worksheet importieren** das Worksheet und klicken Sie auf **Öffnen**.
 - ✓ Das Worksheet wird importiert.

Worksheet exportieren


- ▶ Klicken Sie auf **Exportieren** klicken.
- ▶ Markieren Sie im Fenster **Worksheet exportieren** das Worksheet. Zum Export von Methoden und Sequenz aktivieren Sie die Option **inklusive Sequenz und Methode(n)**.
- ▶ Auf **Exportieren** klicken.
- ▶ Im Fenster **Speichern unter** einen Ordner und einen Namen für die Exportdatei eingeben und auf **Speichern** klicken.
 - ✓ Das Worksheet wird exportiert.

Worksheet löschen

- ▶ Auf **Löschen** klicken.
- ▶ Im Fenster **Löschen** das Worksheet markieren und auf **Löschen** klicken.
 - ✓ Das Worksheet wird gelöscht.

10.3 Einheiten spezifizieren

Im Fenster **Daten | Einheiten** werden programmweit verfügbare Einheiten verwaltet. Es stehen jeweils Vorzugsvarianten (bei Lösungen: mg/L, µg/L, ng/L, g/L und bei festen Proben: mg/kg, µg/kg, ng/kg) zur Verfügung. Diese Einheiten können vom Anwender nicht geändert werden. Davon abweichende Einheiten können frei definiert werden.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Einheiten** öffnen mit dem Symbol .

Die Tabelle enthält die Übersicht der verfügbaren Einheiten.


Option	Beschreibung
Einheit	Bezeichnung der Einheit (max. 10 Zeichen)
Kommentar	Bemerkungen (max. 20 Zeichen)
Faktor	Faktor 1 entspricht 1 µg/L bzw. µg/kg, Faktor 1000 entspricht 1 ng/L bzw. ng/kg Bei eigenen Einheiten muss der Faktor eingegeben werden.
Art	fest: Einheit bezogen auf feste Probe flüssig: Einheit bezogen auf flüssige Probe (Lösung)

Mit den Schaltflächen können Sie eigene Einträge verwalten.

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

10.4 Datenbanken für Stocks und QC-Proben verwalten

Die Datenbanken für häufig verwendete Stockstandards und QC-Proben werden im Fenster **Daten | Stock-Std/QC-Proben** verwaltet. Sie können Einträge der Datenbank hinzufügen, löschen oder editieren. Die Stockstandards und QC-Proben stehen in der Methodenentwicklung zur Verfügung.

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

Option	Beschreibung
Name	Bezeichnung des Standards (max. 20 Zeichen)
Einheit	Bezeichnung der Einheit (max. 10 Zeichen) des Standards
Elemente und Konzentrationen	Die Eingabe der Elementkonzentration erfolgt im Format Elementsymbol Konzentration in der ausgewählten Einheit, z.B. Fe 0.5; Cu 10; Co 0.005. Alternativ öffnen Sie mit Klick auf Konzentrationen das gleichnamige Fenster, in dem Sie jedem Element die Konzentration zuordnen können.

Mit den Schaltflächen können Sie die Einträge verwalten:

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


10.5 Vordefinierte Bemerkungen erstellen

Für folgende Vorgänge können benutzerdefinierte Bemerkungen voreingestellt werden:

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

Die benutzerdefinierten Bemerkungen können jeweils über die Schaltfläche **...** neben den Feld **Bem.** in den entsprechenden Fenstern eingefügt werden. Oft verwendete Bemerkungen sind bereits in der Software hinterlegt.

Bemerkung erstellen

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten | Vordefinierte Bemerkungen** mit dem Menübefehl **Extras | Datenverwaltung** oder dem Symbol .
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Kategorie auswählen** den Vorgang.
- ▶ Öffnen Sie mit einem Klick auf **Bearbeiten** die Liste der Bemerkungen.
- ▶ Erstellen Sie eine neue Bemerkung mit Klick auf **Neu**. Geben Sie im Feld **Bezeichnung** einen Titel ein, unter dem die Bemerkung anwählbar ist. Im Feld **Text** tragen Sie die eigentliche Bemerkung ein.
- ▶ Eine Bemerkung können Sie mit Klick auf **Ändern** editieren oder mit Klick auf **Löschen** aus der Auswahlliste entfernen.

10.6 Daten in das ASCII/CSV-Format exportieren

Messergebnisse können sowohl automatisch als auch manuell im ASCII/CSV-Format gespeichert werden. Für beide Export-Formen werden im Fenster **Optionen | ASCII/CSV-Export** die Parameter für das Dezimaltrennzeichen und die zu exportierenden Ergebnisspalten eingestellt.

Automatisch fortlaufender Datenexport

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

Manueller Datenexport

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

- Markieren Sie die Proben in der Ergebnisliste.
- Halten Sie die Strg- oder Umschalttaste gedrückt und wählen Sie die Proben durch Mausklick auf die Probenzeile aus.
Alle Probenzeilen markieren Sie mit dem Menübefehl **Bearbeiten | Alles markieren Strg+A**.
- Rufen Sie mit dem Menübefehl **Bearbeiten | Auswahl speichern** das Standardfenster **Speichern unter** auf.

- Geben Sie den Dateinamen ein und bestätigen Sie mit **OK**. Die Daten werden im in einem für Tabellenkalkulationsprogramme lesbaren Format mit der Erweiterung ".csv" gespeichert.

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Exportoptionen [▶ 177]
- 📖 Optionen zum fortlaufenden ASCII-Export [▶ 177]

10.7 Windows-Zwischenablage verwenden

Ergebnisdaten in die Zwischenablage kopieren

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

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

Menüpunkt Bearbeiten	
Nur sichtbare Spalten kopieren Strg+C	Die sichtbaren Probenergebnisse in der aktuellen Tabelle kopieren
Alle Spalten kopieren	Die Probenergebnisse aus allen Tabellen kopieren
Spaltentitel	Wenn mit Häkchen aktiviert, wird die Titelzeile mit den Spaltenbezeichnungen mit kopiert

- ▶ Markieren Sie die Proben in der gewünschten Tabelle der Ergebnisliste. Halten Sie die Strg- oder Umschalttaste gedrückt und wählen Sie die Proben durch Mausclick auf die Probenzeile aus.
- ▶ Alle Probenzeilen markieren Sie mit dem Menübefehl **Bearbeiten | Alles markieren** **Strg+A**.
- ▶ Aktivieren Sie den Menübefehl **Bearbeiten | Spaltentitel**, wenn Sie die Titelzeile kopieren möchten.
- ▶ Wählen Sie den entsprechenden Menübefehl, um die Ergebnisse in die Zwischenablage zu kopieren.

Grafiken als Screenshot kopieren

Grafikfenster und Grafiken von Kalibrierkurven, Extinktionssignalen oder Emissionssignalen können Sie als Screenshot in die Zwischenablage kopieren.

- ▶ Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Grafik.
- ▶ Wählen Sie im Kontextmenü den Menüpunkt **Graphik kopieren**, wenn Sie nur die Grafik kopieren möchten.
- ▶ Wählen Sie den Menüpunkt **Fenster kopieren**, wenn Sie das gesamte Fenster kopieren möchten.
 - ✓ Das gewählte Objekt wird in die Zwischenablage kopiert und steht anderen Windowsanwendungen zur Verfügung.

Signalwerte in die Zwischenablage kopieren

Sie können die Signale der Einzelproben (Statistik-Runs) in die Zwischenablage kopieren.

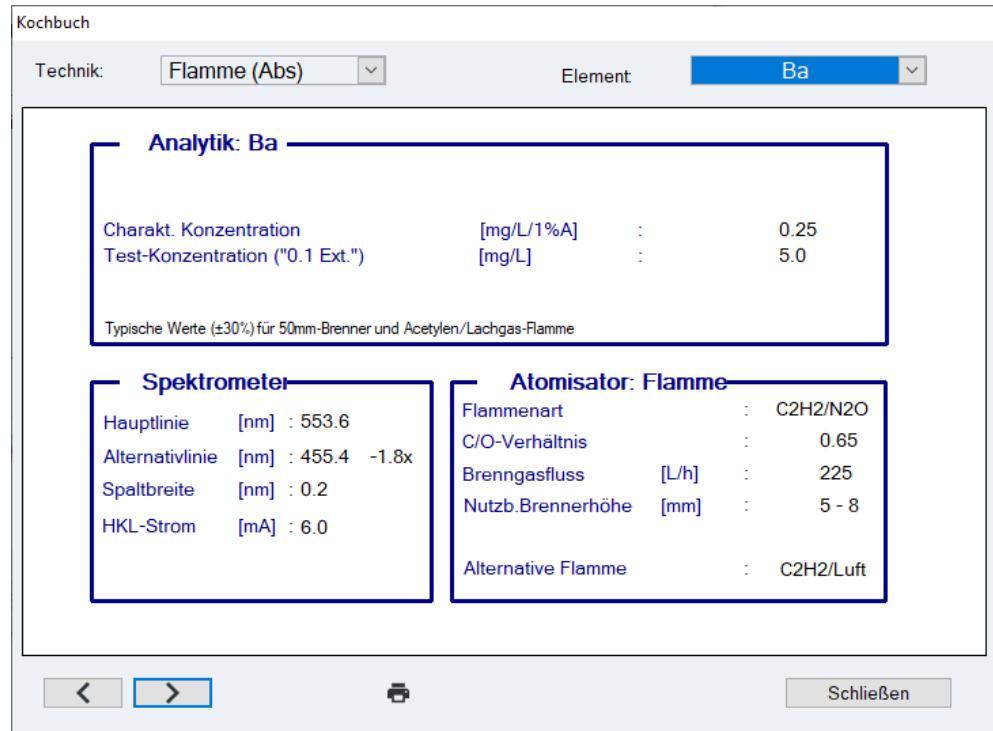
- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Probeneinzelwerte** durch einen Doppelclick mit der linken Maustaste auf die entsprechende Probenzeile in der Ergebnistabelle.
- ▶ Kopieren Sie die Daten mit "Strg"+"C" in die Zwischenablage.

- ✓ Die Daten stehen nun anderen Windowsanwendungen, z. B. Excel, zur Verfügung.

11 Kochbuch

Das Kochbuch gibt für die Atomabsorptionsspektrometrie eine komplette Übersicht über die bestimmaren Elemente und die dafür von Analytik Jena empfohlenen Geräteeinstellungen und Analysenhinweise. Bei Erstellung einer Methode können diese Daten element- und technikspezifisch als Voreinstellung geladen werden. Die Datenbank des Kochbuchs kann auch separat aufgerufen werden.

- ▶ Öffnen Sie das Kochbuch mit dem Symbol  in der Werkzeugleiste oder verwenden Sie den Menübefehl **Methodenentwicklung | Kochbuch**.



Anzeige- und Bedienelemente im Fenster Kochbuch

Option	Beschreibung
Technik	Auswahl der verwendeten Atomisierungstechnik
Element	Auswahlliste der mit der ausgewählten Technik zu analysierenden Elemente Info gibt allgemeine Informationen zu Analysen mit der gewählten Atomisierungstechnik
Fensteranzeige	Informationen zur Analyse
</>	Zwischen den Fensterseiten blättern

12 Optionen - ASpect LS anpassen

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

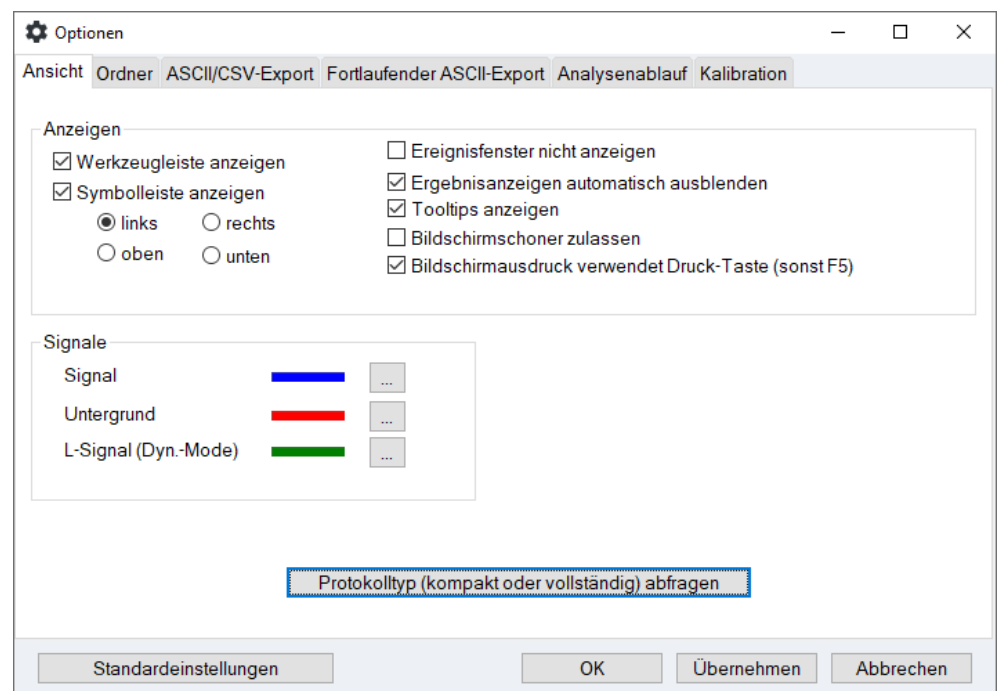
- Ansichtsoptionen
- Speicherorte für Dateien
- Parameter für den Datenexport
- Allgemeingültige Messeinstellungen
- Allgemeingültige Einstellungen für die Kalibration

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

- Rufen Sie das Fenster **Optionen** mit dem Menübefehl **Extras | Optionen** auf.

12.1 Ansichtsoptionen

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



Elemente im Fenster Optionen | Ansicht

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

Option	Beschreibung
Ergebnisanzeigen automatisch ausblenden	Ergebnisfenster ausblenden, wenn Unterfenster (z.B. Fenster Methode) geöffnet werden Nach Schließen der Unterfenster werden die Ergebnisfenster wieder angezeigt.
Tooltips anzeigen	Über allen Symbolschaltflächen und für die Spaltentitel in den Fenstern Methode , Sequenz und Proben-ID kleine Hilfetexte (Tooltips) einblenden
Bildschirmschoner zulassen	Den Windows-Bildschirmschoner in Eingabepausen einschalten
Bildschirmausdruck verwendet Druck-Taste (sonst F5)	Standardmäßig wird der Bildschirmausdruck mit F5 ausgelöst. Die Taste PrtScr/Druck wird dabei für die Windows-Zwischenablage-Funktion verwendet. Wenn diese Option aktiviert ist, dann löst die Taste PrtScr/Druck den Bildschirmausdruck aus. Diese Option wird erst nach Neustart von ASpect LS aktiv.
Anwendung sperren nach [min]:	Nur verfügbar, wenn das optionale 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul installiert ist Der Bildschirm wird gesperrt, wenn in der vorgegebenen Zeit keine Eingabe im PC erfolgt ist. Der Bildschirm wird durch Anmeldung eines berechtigten Nutzers wieder freigegeben. Im Flammenbetrieb ist die dauerhafte Anwesenheit eines Nutzers erforderlich, um bei Veränderung der Flamme diese rechtzeitig zu löschen. Die Aktivierung dieser Funktion wird für die Flammentechnik nicht empfohlen.
Signale	Die Schaltflächen ... öffnet den Farbauswahl-Dialog. Es können vordefinierte oder neu Signalfarben gewählt werden.
Protokolltyp (kompakt oder vollständig) abfragen	Beim Druck von Analyseergebnissen wird der Abfragedialog zum Protokolltyp wieder eingeblendet.

Sehen Sie dazu auch

 [Analyseergebnisse drucken \[► 161\]](#)

12.2 Speicherpfade

Die bei der Installation ausgewählten Speicherpfade und Auswahl von Speicherpfaden für Dateien werden im Fenster **Optionen | Ordner wechseln** angezeigt und definiert.

Option	Beschreibung
Programm	Installationspfad der ausführbaren Dateien
Arbeitsverzeichnis	Verzeichnis für Anwenderdaten Das Arbeitsverzeichnis enthält weitere Unterordner und wird Arbeitsverzeichnis wird bei der Installation oder durch die optionale Benutzerverwaltung festgelegt.
Temporäre Daten	Verzeichnis für vom Programm temporär angelegte Daten
Probeninformation	Voreingestellter Pfad für das Öffnen und Speichern von Probeninformationsdateien Dieser Pfad kann geändert werden. Beim Öffnen und Speichern der Probeninformationsdateien kann ein abweichender Pfad ausgewählt werden.

Option	Beschreibung
Export/Import	Voreingestellter Pfad für den Export und Import von Methoden- und Sequenzdaten Dieser Pfad kann geändert werden. Beim Exportieren und Importieren kann ein abweichender Pfad ausgewählt werden.
Ergebnisse	Verzeichnis für Ergebnisdaten Dieses Standard-Verzeichnis kann weitere Unterordner für Ergebnisspeicherung enthalten. Diese Ordner stehen beim Messstart für die Dateiablage zur Verfügung.
Anwendungsdaten	Verzeichnis für Daten, in dem ASpect LS notwendige Daten ablegt werden

Mit der Schaltfläche **Hinzufügen** legen Sie neue Unterordner für Ergebnisspeicherung unterhalb des Ordners **Ergebnisse** an. Leere Ordner können Sie löschen oder umbenennen.

12.3 Exportoptionen

Im Fenster **Optionen | ASCII/CSV-Export** werden die Parameter für den ASCII-Export von Ergebnisdaten festgelegt. Die Parameter gelten für beide Formen des Daten-Exports, für den automatisch fortlaufenden als auch den manuellen.

Einstellungen

Option	Beschreibung
Dezimaltrennzeichen	Trennzeichen für Dezimalzahlen
Listentrennzeichen	Trennzeichen der Elemente einer Liste

Im Bereich **Zu exportierende Ergebnis-Felder** wird festgelegt, welche Spalten der Ergebnistabelle in die ASCII-Datei exportiert werden. **alle** exportiert sämtliche Spalten der ausgewählten und nicht ausgewählten Tabellen der Ergebnisliste, **nur ausgewählte Felder** öffnet eine Liste, in der die zu exportierenden Spalten ausgewählt werden können.

12.4 Optionen zum fortlaufenden ASCII-Export

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

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

Export von Ergebnisdaten

Das Kontrollkästchen **Fortlaufender ASCII-Export von Ergebnisdaten** aktiviert die Exportfunktion. Die Daten werden im Standardpfad für den Export/Import abgelegt (Fenster **Optionen | Ordner**).

Dateiname	Beschreibung
Methodenbezeichnung.csv	Die CSV-Datei erhält die Bezeichnung der Methode. Die Datei wird im Standardpfad Export/Import (Fenster Optionen Ordner) gespeichert.
Bezeichnung der Ergebnisdatei.csv	Die CSV-Datei erhält die Bezeichnung der Ergebnisdatei. Die Datei wird im Standardpfad Export/Import gespeichert.

Dateiname	Beschreibung
anderer	Dateiname und Pfad können frei vergeben werden. Die Schaltfläche ... öffnet den Dateiauswahldialog, um eine bestehende Datei auszuwählen.
Für jede Probe eine Datei erzeugen (Zeile und Probenname wird an Dateinamen angehängt)	Für jede Probe wird eine eigene Datei erstellt. Der Dateiname wird um die Zeilennummer der Ergebnisliste und den Probennamen ergänzt. Nicht erlaubte Zeichen werden durch Unterstriche ersetzt (z.B. Testmethode-001 QC 1 mg_L.csv).
Exportpfad	In diesem Pfad werden die ASCII-Dateien gespeichert.

Export der Signale

Die zeitaufgelösten Extinktions- oder Intensitätssignale (Peaks) können zusätzlich als CSV-Dateien exportiert werden.

Mit der Option **Fortlaufender Signal-Export (CSV)** aktivieren Sie den Signalexport. Der Dateiname wird nach dem Schema "Listenzeile-Probenbezeichnung-Linienbezeichnung-Wiederholungsmessung" gebildet, z.B. 0007-Probe-AI309-02.csv. Im Feld **Exportpfad** können Sie einen Pfad zum Speichern der Signaldateien wählen.

12.5 Optionen zum Analysenablauf

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

Stoppen nach folgenden Fehlern

Aktion	Beschreibung
Ungültige Kalibrierfunktion	Der Analysenablauf wird gestoppt, wenn die Kalibrierfunktion nicht berechnet werden konnte.

Zusätzliche Fehlerprüfungen

Funktion	Beschreibung
Monotonie der Kalibrierpunkte	Es erfolgt ein Test auf Monotonie der Kalibrierpunkte. Der Monotonietest untersucht, ob höhere Standardkonzentrationen auch zu höheren Messwerten führen.
Füllstands-Sensoren des Autosamplers	Nicht für AS-GF und AS-F/AS-FD Es erfolgt eine Füllstandsüberwachung des Probengebers und der Abfallflasche.
Autozero Driftkontrolle	Beim Nullabgleich wird die Drift der Extinktionswerte kontrolliert.

Anzeigefenster

Durch Aktivieren der entsprechenden Optionen können Sie verschiedene Anzeigefenster während des Analyseablaufs anzeigen lassen.

Fenster	Beschreibung
Signalverlauf	Während des Analysenablaufs wird ein Fenster mit einer Darstellung des zeitabhängigen Verlaufs des Messsignals (z.B. Extinktionsverlauf) angezeigt.
Skalierung des max. Signalwertes	Maximum der Messwert-Achse für die Darstellungen des Signalverlaufs festlegen Auto: Automatische Achsenskalierung

Fenster	Beschreibung
	Alternativ kann diese Einstellung auch mit der Menüfunktion An-sicht Skalierung vorgenommen werden.
mit Ofenprogramm	Im Signalverlauf wird zusätzlich der Temperaturverlauf des Ofenprogramms angezeigt.
Bargraph	Messwerte werden mit Extinktion- bzw. Emissionsergebnis als Balkendiagramm angezeigt.
Peakübersicht	Peaks der Einzelmessung werden hintereinander angezeigt.
Report-Fenster	Während des Analysenablaufs wird ein Fenster angezeigt, das Statusinformationen zum verwendeten Atomisator (Flamme, Graphitrohrföfen, Hydridsystem) ausgibt.
Probenkonz. in Bezugskurve	Das Fenster Probenkonz. in Bezugskurve mit der aktuellen Kalibrier- und, soweit bereits vermessen, Rekalibrierkurve wird angezeigt. Nach der Probenmessung wird die Berechnung der unkorrigierten Konzentration aus der Extinktion/Emission mit roten Hilfslinien verdeutlicht. Im Falle der Additions-Kalibration wird die umgerechnete Kalibrierkurve angezeigt.
Ofenkamera	Blendet ständig das Bild der Ofenkamera mit der Aufnahme des Graphitrohrs ein, bis die in der Ofenkontrolle eingestellte Temperatur erreicht ist. Ablage des Proben tropfens und Trocknung können so direkt beobachtet werden. Hinweis: Die Ofenkamera ist nicht für alle AAS-Gerätetypen standardmäßig verfügbar.

Sonstiges

Option	Beschreibung
Datum/Zeit an Ergebnisdateinamen anhängen	Aktuelle PC/Zeit beim Messstart automatisch an den Namen der Ergebnisdatei anhängen
Mindest-Vorheizzeit Lampe (Routine)	Automatische Vorheizzeit der Lampe einstellen Ist keine Vorheizzeit eingestellt, muss auf das Einhalten der Vorheizzeit selbst geachtet werden.
Beep nach Ende der Abkühlphase	Nur für Graphitofentechnik Nach Ende der Abkühlphase des Graphitrohrs erfolgt ein Beep-Ton.
Komponenten-Aufnahme bereits in der Abkühlphase	Nur für Graphitofentechnik Während des Abkühlens des Graphitrohrs wird mit dem Probengeber die nächste Probe aufgenommen. Option kann zur Beschleunigung des Messablaufs dienen.
Stopp nach Trafo-Überhitzung	Nur für Graphitofentechnik Wenn aktiviert, wird das Messprogramm bei einer Überhitzung des Transformators für die Graphitrohrtechnik gestoppt und nicht wieder fortgesetzt. Wenn deaktiviert, unterbricht das Programm bei Überhitzung des Transformators. Nach Abkühlen des Transformators wird das Programm fortgesetzt.
Zwang zur Formierung nach Öffnung des Ofens	Nur für Graphitofentechnik Graphitrohr immer formieren, nachdem der Ofen geöffnet wurde
Fortlaufender Export auch bei Neuberechnung	Nach einer Neuberechnung die Ergebnisse automatisch exportieren

Option	Beschreibung
Zeitstempel bei Neuberechnung nicht aktualisieren	Nach Neuberechnen der Ergebnisse bleiben die Originalzeiten der Messung erhalten
Mischkammerreinigung beim Löschen der Flamme	Nur für Flammentechnik Beim Löschen der Flamme die Mischkammer spülen
Einbrennzeit Acetylen/N₂O-Flamme [min]	Nur für Flammentechnik Stabilisierungszeit der Acetylen-Lachgas-Flamme einstellen

12.6 Allgemeine Einstellungen für die Kalibration und Blindwertkorrektur

Im Fenster **Optionen | Kalibration** nehmen Sie grundlegende Einstellungen für die Kalibration und die Blindwertkorrektur vor. In den Standardeinstellungen sind alle Kontrollkästchen deaktiviert.

Optionen für die Kalibration

Option	Beschreibung
Korrelationskoeffizient	Kennzahl der Anpassungsgüte der Kalibrierkurve auswählen R : Korrelationskoeffizient R² : Bestimmtheitsmaß R²(adjust) : adjustiertes Bestimmtheitsmaß
Prognose- statt Konfidenzband anzeigen	Wenn aktiviert, wird das Prognoseband für die Kalibration angezeigt. Das Konfidenzband ist in den Standardeinstellungen vorgesehen.
auto vergleicht mit quadratischer statt rationaler Funktion	"auto" bezeichnet die automatische Auswahl der Kalibrierfunktion. Wenn aktiviert, wird die quadratische Funktion für den Vergleich herangezogen. Die Standardeinstellung ist die gebrochene rationale Funktion.
Anstieg für mittlere Konzentration statt 0 berechnen	Wenn aktiviert, wird der Anstieg der Kalibrierkurve an der mittleren Konzentration des Kalibrierbereiches berechnet. In der Standardeinstellung wird der Anstieg für die Konzentration 0 berechnet.
>KAL bei Überschreitung des oberen Standards um [%]	Standardmäßig erfolgt die ">KAL"-Anzeige bei Überschreitung des oberen Standards um 10 %. Den Prozentwert können Sie hier anpassen. Wenn im Fenster Methode Probenzufuhr die Option Verdünnung bei Konz.-Überschreitung aktiviert ist, wird ab diesem Prozentwert der Überschreitung automatisch eine Verdünnung vorgenommen.

Optionen für die Blindwertkorrektur

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

Beim **Konz. 2** Berechnungsverfahren wird zunächst die Originalkonzentration des Blindwerts ($\text{Conc}_{2_{\text{BV}}}$) auf Basis der Proben-IDs des Blindwerts berechnet. Bei Ermittlung der **Konz. 2** der Probe wird $\text{Conc}_{2_{\text{BV}}}$ berücksichtigt.

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

Berechnungsbeispiel für flüssige Originalprobe mit Vorverdünnung:

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

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

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

Nachweisgrenze/Bestimmungsgrenze

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

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

Parameter	Wert
Faktor NWG	3
Faktor BG	9
Anzahl der Wiederholungsmessungen	11

Sehen Sie dazu auch

- 📄 Kalibrierparameter spezifizieren (Fenster Methode | Kalib.) [► 54]

13 Optionales FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul

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

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

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

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

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

13.1 Benutzerverwaltung

13.1.1 Benutzerverwaltung – Anzeigen und Einstellungen

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

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

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

Fenster Benutzerverwaltung

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

Einzelheiten des Benutzerprofils

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

Option	Beschreibung
Benutzername	Anmeldename des Benutzers
Benutzerebene	Zugewiesene Benutzerebene mit Benutzerrechten
Vollstd. Name	Vollständiger Name des Benutzers
E-Signatur	Ja: Der Benutzer kann Ergebnisdaten elektronisch signieren. Nein: Der Benutzer kann nicht elektronisch signieren.
Status	Aktiv: Der Benutzername kann verwendet werden (grüner Kreis).

Option	Beschreibung
	Inaktiv: Benutzername ist deaktiviert und kann nicht verwendet werden (roter Kreis).
Kennwortschutz	Aktiv: Die Benutzeranmeldung erfordert ein Kennwort. Nicht aktiv: Benutzeranmeldung ist ohne Kennwort möglich. Mit Klick auf das Schlosssymbol öffnet sich das Fenster Benutzerdaten ändern . Wenn das Schloss geschlossen ist, ist der Kennwortschutz aktiviert.
Gültig bis	Unbegrenzt: Das Kennwort läuft nie ab. Datum/Tage: Der Anwender muss das Kennwort nach Ablauf der spezifizierten Frist ändern. Die Option wird nicht angezeigt, wenn die Anmeldung über Active Directory erfolgt.

Schaltflächen

Schaltfläche	Beschreibung
Neu ...	Neuen Benutzer anlegen Das Fenster Benutzerdaten hinzufügen erscheint.
Ändern ...	Benutzerdaten für markierte Tabellenzeile ändern Das Fenster Benutzerdaten ändern für einen markierten Benutzer erscheint. Das Fenster kann auch durch Doppelklick auf den Benutzer aufgerufen werden.
Nur aktive Benutzer	Nur aktive Benutzer anzeigen
Audittrail	Ereignisprotokoll öffnen
Berechtigungen	Benutzerberechtigungen in der Software zuweisen
Beenden	Anwendung beenden

13.1.2 Benutzerebenen konfigurieren

Ab FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul Version 2.0 besitzt die Benutzerverwaltung eine neue Funktionalität für die Einrichtung der Benutzerebenen. Während in den vorhergehenden Software-Versionen die verfügbaren Berechtigungen der Benutzerebenen festgelegt waren, können Sie nun die Benutzerebenen frei konfigurieren. In einer Liste von Software-Funktionen aktivieren oder deaktivieren Sie die Funktionen, die für eine Benutzerebene zugänglich sein soll.

Anzahl verfügbare Benutzerebenen

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

- Administratorebene (Ebene 0)
Der Administrator hat vollständige Rechte für die Benutzerverwaltung und kann die Benutzerverwaltung einrichten, Rechte in den Benutzerebenen konfigurieren und Benutzer anlegen oder sperren. In der Voreinstellung hat der Administrator keine Berechtigung für ASpect LS und kann sich nicht in der Software anmelden.
- Ebene 1
Benutzer dieser Ebene besitzen alle Berechtigungen für ASpect LS für Methodenentwicklung und Routine und können die Software konfigurieren.
- Ebene 2 bis 4
Benutzer dieser Ebene haben abgestufte Berechtigungen für den Analysenbetrieb, wobei gilt: Ebene 2 > Ebene 3 > Ebene 4. Sie haben keine Berechtigungen zur Konfiguration von ASpect LS.

- Benutzerebene 5
Die Benutzer dieser Ebene besitzen Berechtigungen für die Anmeldung an der Benutzerverwaltung und ASpect LS mit minimalen Berechtigungen, z.B. für Auditzwecke.

Optional können bis zu 4 weitere Ebenen (6 bis 9) für spezielle Konfigurationen angelegt werden.

Benutzerebenen konfigurieren

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Benutzerverwaltung** auf **Berechtigungen**.
✓ Das Fenster **Benutzerberechtigungen ändern** erscheint.
- ▶ In der Matrix Berechtigung/Ebenen können Sie für durch Anhaken der Kontrollkästchen eine Funktion in einer Ebene aktivieren.
Wenn Sie einen Rechtsklick auf ein Kontrollkästchen ausführen, können Sie über das Kontextmenü alle Häkchen in der Ebene setzen oder entfernen oder die Berechtigungen einer anderen Ebene übernehmen.
- ▶ Wenn Sie zusätzliche Ebenen der Matrix hinzufügen möchten, klicken Sie auf **Konfigurieren**. Aktivieren Sie die Option **Zusätzliche Benutzerebenen (max.4)**: und stellen Sie die gewünschte Anzahl in der Liste ein.
- ▶ Wenn Sie die Rechtevergabe auf die Voreinstellungen zurücksetzen möchten, klicken Sie auf **Konfigurieren**. Aktivieren Sie die Option **Benutzerrechte und -ebenen auf Voreinstellung zurücksetzen**. Wenn zusätzliche Benutzerebenen schon Benutzern zugewiesen wurden, erscheint eine Aufforderung zur Änderung des entsprechenden Benutzerprofils.
- ▶ Jeder Funktionsberechtigung ist eine ID zugeordnet. Wenn ein Benutzer eine Tätigkeit ausführen möchte, zu der er keine Berechtigung hat, wird in der Warnung/Fehlermeldung diese ID ausgegeben. Mit der ID können Sie die fehlende Berechtigung eindeutig identifizieren. Aktivieren Sie bei Bedarf die Option **Spalte "ID" anzeigen**.

Hinweise zu Benutzerrechten

Einzelne Benutzerrechte sind mit den allgemeinen Einstellungen in der Benutzerverwaltung verknüpft. Diese Einstellungen erreichen Sie im Fenster **Benutzerverwaltung** über den Menüpunkt **Extras | Einstellungen**.

Recht	Beschreibung
Kalibrierintervall ignorieren (ME003)	In den Einstellungen der Benutzerverwaltung können Sie optional eine Gültigkeitszeitspanne für die Kalibrierung festlegen. Wenn Sie diese Zeitspanne aktiviert haben und der Benutzer nicht dieses Recht besitzt, kann er keine Messung starten.
Messung mit nicht freigegebenen Methoden (Kategorien) (ME004)	Sie können für die Methoden beim Speichern das Merkmal Kat. (Kategorie) vergeben und so Methoden für die Verwendung kennzeichnen. In der Benutzerverwaltung können Sie bis zu 5 Bezeichnungen für Kategorien angeben, für die Methoden als freigegeben gekennzeichnet sind. Wenn ein Benutzer dieses Recht besitzt, kann er Messung mit einer nicht freigegebenen Methode starten.

Hinweise zum Update

Wenn Sie bereits eine Benutzerverwaltung eingerichtet haben, werden den Benutzern die neuen Benutzerebenen Admin und Ebene1 bis Ebene 4 zugeordnet. Prüfen Sie, ob die eingestellten Berechtigungen ihren Bedürfnissen entsprechen und ändern Sie die Rechte in den Ebenen. Achten Sie besonders darauf, dass in der neuen Installation der Administrator standardmäßig nur Zugang zur Benutzerverwaltung und keine Rechte mehr zur Bedienung von ASpect LS hat.

13.1.3 Allgemeine Einstellungen der Benutzerverwaltung konfigurieren

Im Fenster **Einstellungen** können Sie mit folgenden Optionen die Benutzerverwaltung generell konfigurieren:

- Anmeldung und Richtlinien für das Kennwort
- Verwendung von Datenverzeichnissen
- Einstellungen für die Verwendung von Kalibrierungen und Methoden
- Signaturen

Die Einstellungen gelten für neu erstellte Benutzerkonten und sind daher zweckmäßigerweise nach der Installation durchzuführen, bevor Benutzerkonten angelegt werden.

- ▶ Wählen Sie im Fenster **ASpect LS Benutzerverwaltung** den Menüpunkt **Extras | Einstellungen...**
Das Fenster **Einstellungen** erscheint.
- ▶ Wählen Sie auf der linken Seite die zu ändernde Aktionsgruppe.
- ▶ Nehmen Sie die Konfiguration vor.
Mit Klick auf **Auf Standardwerte setzen** stellen Sie die Voreinstellungen für die ausgewählte Aktionsgruppe wieder her. Die Einstellungen der anderen Gruppen bleiben davon unberührt.
- ▶ Übernehmen Sie die Einstellungen mit Klick auf **OK**.

Anmeldung

Sie können die Anmeldung lokal über die Benutzerverwaltung oder über einen Anmelde-server über Active Directory konfigurieren.

Für die lokale Anmeldung wählen Sie auf der Seite **Anmeldung** die Option **Lokal (über Benutzerverwaltung)** und konfigurieren Sie die allgemeinen Richtlinien für neue Anmeldungen und Kennwörter:

Option	Beschreibung
Anzahl der Anmeldeversuche	Anzahl der ungültigen Anmeldeversuche (max. 10) Bei Überschreitung wird ASpect LS nach einer Wartezeit beendet und muss für eine weitere Anmeldung erneut gestartet werden. Es erfolgt ein Eintrag (Warnung) in die Audittrail-Datei.
Bei Überschreitung Benutzer sperren	Benutzer nach Überschreiten der Anzahl Anmeldeversuche sperren
Mindestlänge des Benutzernamens	Mindestanzahl der Zeichen für neu angelegte Benutzernamen (max. 10)
Kennwortvergabe erzwingen	Für neu erteilte Benutzernamen muss ein Kennwort vergeben werden.
Kennwort muss Buchstaben und Ziffern enthalten	Nur Kennwörter, die sowohl Buchstaben als auch Ziffern enthalten, können vergeben werden. Diese Richtlinie wird auch bei der Kennwortänderung angewendet.
Benutzername und Kennwort unterschiedlich	Nur Kennwörter, die sich vom Benutzernamen unterscheiden, können vergeben werden. Diese Richtlinie wird auch bei der Kennwortänderung angewendet.
Kennwort bei der nächsten Anmeldung ändern aktivieren	Neuangelegte Benutzer müssen standardmäßig bei der ersten Anmeldung ihr Kennwort ändern.
Kennwort läuft ab nach	Nach Ablauf der Frist wird der Benutzer bei der Anmeldung bei zum Ändern des Kennworts aufgefordert. Das Kennwort wird dann um die in den Richtlinien eingestellte Frist verlängert. Der Wert wird als Vorgabe übernommen und kann für einzelne Benutzer abweichend spezifiziert werden (max. 999 Tage).

Option	Beschreibung
Mindestlänge des Kennworts:	Mindestanzahl der Zeichen für neu angelegte Kennwörter Anzahl Zeichen: 3 bis 10

Für die serverbasierte Anmeldung aktivieren Sie die Option **Serverbasiert (über Active Directory)** und konfigurieren Sie Folgendes:

Option	Beschreibung
Domain-Name(n)	Domainnamen des Anmeldeservers Es können 2 Server angegeben werden.
Lokale Anmeldung erlauben, wenn Anmeldeserver nicht erreichbar	Wenn die Anmeldung über den Server fehlschlägt, können sich die mit den entsprechenden Rechten ausgestatteten Benutzer lokal in der Benutzerverwaltung über das Windows Startmenü anmelden. Für diesen Zweck muss den Benutzern auch ein lokales Passwort zugewiesen sein. In der Benutzerverwaltung können die berechtigten Benutzer die Option Lokal (über Benutzerverwaltung) aktivieren, sodass eine lokale Anmeldung in ASpect LS möglich ist.
Lokale Anmeldung für AJService Konto erlauben	Die Aktivierung dieser Option ermöglicht AJ Service-Personal Wartungen am Gerät ohne zusätzliche Unterstützung des Administrators auszuführen.

Ordner

Das Arbeitsverzeichnis der Steuer- und Auswertesoftware und das Verzeichnis für die Audittrail-Datei können spezifiziert werden.

Option	Beschreibung
ASpect-Arbeitsverzeichnis	Einstellung des Arbeitsverzeichnisses Das Arbeitsverzeichnis enthält die Methoden- und Sequenzdatenbanken und die Ergebnisdateien. Das Arbeitsverzeichnis wurde bei der Installation von ASpect LS festgelegt und kann hier geändert werden.
Audittrail	Einstellung des Pfads der Audittrail-Datei Der Pfad kann geändert werden.
Ordner mit Benutzerdatenbank	Anzeige des Pfads der Benutzerdatenbank Dieser Pfad kann nur mit Hilfe des Installationsprogramms geändert werden.
AJ File Protection	Zusätzlichen Schutz bietet die optionale Software AJ File Protection. Diese schützt Dateien gegen beabsichtigte und unbeabsichtigte Datenmanipulation, z. B. Löschen oder Verändern von Daten. Bei installierter AJ File Protection ist die Schaltfläche aktiv und zeigt den Schutzstatus durch eine Markierung an. Grün – Dateischutz ist aktiv; Rot – Dateischutztreiber ist nicht aktiv. Nach Klick auf die Schaltfläche erscheint ein Fenster mit einer Liste der geschützten Verzeichnisse.

Berechtigungen (Details)

In dieser Gruppe werden generelle Einstellungen für Methoden und Kalibrierungen getroffen, die Auswirkungen auf die Berechtigungen in den Benutzerebenen haben.

Option	Beschreibung
Gültigkeitsdauer der Kalibrierung [h:mm]:	Optional Gültigkeitszeitraum der Kalibrierung spezifizieren Wenn die Berechtigung Kalibrierintervall ignorieren für einen Benutzer deaktiviert ist (siehe Benutzerebenen), kann der Benutzer nach Ablauf der Gültigkeitsdauer keine Sequenz starten.

Option	Beschreibung
	Wenn die Berechtigung Kalibrierintervall ignorieren aktiviert ist, kann der Benutzer die Sequenz starten. Es wird ein Hinweis angezeigt, dass die Gültigkeitsdauer der Kalibrierung abgelaufen ist.
Methoden-Kategorien für freigegebene Methoden	Sie können hier bis zu 5 Kategorien angeben, mit denen Sie die Methoden als freigegeben kennzeichnen. Die Kategorien geben Sie jeweils beim Speichern der Methode im Feld Kat. ein. Wenn die Berechtigung Messung mit nicht freigegebenen Methoden (Kategorien) für einen Benutzer deaktiviert ist, kann dieser Benutzer keine Sequenz starten, wenn die dazugehörige Methode nicht mit einer der vorgegebenen Kategorien gekennzeichnet ist.

Signaturen

Die Liste zeigt die Signaturbedeutungen und die dazugehörigen Benutzerebene an, die beim Signieren ausgewählt werden können.

Schaltfläche	Beschreibung
Neu	Neue Signaturbedeutung hinzufügen Nach Klick auf die Schaltfläche erscheint das Fenster Signaturbedeutungen bearbeiten , in dem eine neue Signaturbedeutung und die gültige Benutzerebene ausgewählt werden können.
Ändern	Markierte Signaturbedeutung editieren
Entfernen	Markierte Signaturbedeutung löschen

Sehen Sie dazu auch

 Methoden speichern [▶ 27]

13.1.4 Neues Benutzerkonto anlegen

Nur Benutzer mit den entsprechenden Benutzerrechten können ein neues Benutzerkonto einrichten. In den Voreinstellungen der Benutzerebenen sind der Ebene Admin die Rechte für die Benutzerverwaltung zugeteilt. Die Konfiguration eines neuen Benutzers mit entsprechenden Rechten erfolgt im Fenster **Benutzerdaten hinzufügen**.

Optionen im Fenster Benutzerdaten hinzufügen

Option	Beschreibung
Benutzername	Mit diesem Namen meldet sich der Benutzer an. Groß- und Kleinschreibung wird nicht geprüft. Die Mindestlänge hängt von den allgemeinen Konfigurationen der Benutzerverwaltung ab.
Vollstd. Name	Vollständiger Name des Benutzers Dieser Name wird als Bestandteil der elektronischen Signatur verwendet. Max. Anzahl Zeichen: 32
Beschreibung	Feld für Notizen Die Eingabe ist optional.
Benutzerebene	Auswahl der Benutzerebene mit den entsprechenden Rechten
Kennwort	Kennwort festlegen Bei Kennwörtern wird Groß-/Kleinschreibung unterschieden. Bei Bestätigung des Kennwortdialogs ohne Eingabe eines Kennworts wird der Kennwortschutz aufgehoben. Die Mindestlänge und andere Kennwortrichtlinien werden in den allgemeinen Konfigurationen der Benutzerverwaltung spezifiziert.

Option	Beschreibung
	Max. Kennwortlänge: 20 Zeichen
Schloss-Symbol	Geschlossen: Der Kennwortschutz ist durch die Vergabe eines Kennworts aktiviert. Offen: Der Kennwortschutz wurde noch nicht aktiviert.
Kennwort läuft nie ab	Wenn aktiviert, ist das Kennwort unbefristet gültig. Wenn deaktiviert, läuft das Kennwort in einer vorgegebenen Frist ab. Der vorgegebene Wert wird aus den Kennwort-Richtlinien übernommen. Der Benutzer kann das Kennwort auch vorher verlängern. Diese Einstellung ist ausgeblendet, wenn die Anmeldung über den Anmeldeserver und Active Directory erfolgt.
Benutzerspezifisches Arbeitsverzeichnis	Für den Benutzer wird ein eigenes Arbeitsverzeichnis entsprechend folgendem Schema eingestellt: \ASpect-Arbeitsverzeichnis\Benutzername. Die Verzeichnisstruktur wird bei der Erstanmeldung des Benutzers angelegt.
E-Signatur verwenden	Der Benutzer darf Messergebnisse elektronisch signieren. Ihm stehen dabei die Signaturbedeutungen seiner Benutzerebene zur Verfügung.
Benutzernamen sperren	Das Benutzerkonto deaktivieren Der Benutzername kann zeitweise deaktiviert werden. Durch die Deaktivierung eines Benutzerkontos, im Gegensatz zur Entfernung, wird verhindert, dass für neu angelegte Benutzer der Benutzername erneut vergeben werden kann.
Benutzer muss Kennwort bei nächster Anmeldung ändern	Bei der nächsten Anmeldung wird der Benutzer zur Kennwortänderung aufgefordert.

Benutzerdaten spezifizieren

- ▶ Im Fenster **Benutzerverwaltung** auf **Neu ...** klicken.
Das Fenster **Benutzerdaten hinzufügen** erscheint.
- ▶ In den Feldern und Optionen die Einstellungen vornehmen und mit Klick auf **OK** bestätigen.
 - ✓ Das neue Benutzerkonto erscheint im Fenster **ASpect LS Benutzerverwaltung**.

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Allgemeine Einstellungen der Benutzerverwaltung konfigurieren [▶ 185]

13.1.5 Bestehendes Benutzerkonto ändern

Sie können die Eigenschaften eines Benutzerkontos ändern.

- ▶ Im Fenster **Benutzerverwaltung** das Benutzerkonto markieren und auf **Ändern ...** klicken.
Das Fenster **Benutzerdaten ändern** mit den Einstellungen des Kontos erscheint.
- ▶ Die Einstellungen vornehmen und auf **OK** klicken.
 - ✓ Die Änderungen werden übernommen und sind bei der nächsten Anmeldung des Benutzers wirksam.

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Neues Benutzerkonto anlegen [▶ 187]

13.2 Kennwort ändern

Diese Funktion gibt es nur bei lokaler Anmeldung in ASpect LS oder der Benutzerverwaltung. Bei Anmeldungen über einen Anmeldeserver, werden die Passwörter und deren Gültigkeit dort verwaltet.

Je nach Vereinbarung im Benutzerkonto muss der Benutzer bei lokaler Anmeldung das zugeteilte Kennwort in regelmäßigen Abständen ändern.

- ▶ In **ASpect LS** den Menüpunkt **System | Kennwort ändern** wählen.
Das Fenster **Kennwort ändern** erscheint.
- ▶ Das alte Kennwort und zweimal das neue Kennwort eingeben und mit Klick auf **OK** bestätigen.
 - ✓ Bei fehlerfreier Eingabe erscheint die Meldung **Kennwort wurde geändert!**

13.3 Audittrail anzeigen, drucken und exportieren

In der Audittrail-Datei werden Systemereignisse und zusätzlich alle Warn- und Fehlermeldungen von ASpect LS und der Benutzerverwaltung aufgezeichnet. Für das Anzeigen des Audittrails müssen die Rechte im Benutzerkonto erteilt sein.

Den Audittrail öffnen Sie in ASpect LS über den Menüpunkt **System | Audit-Trail** oder in der Benutzerverwaltung mit Klick auf **Audittrail**.

Folgende Funktionen stehen für den Audittrail zur Verfügung:

- Ansicht
- Filter
- Aktualisierung
- Export als CSV-Datei (nur wenn der Audittrail aus dem Fenster Benutzerverwaltung aufgerufen wurde)

Folgende Parameter werden im Audittrail dokumentiert:

Tabellenspalte	Beschreibung
Typ	Anzeige des Ereignistyps Im Audittrail werden folgende Ereignistypen vermerkt und durch Symbole gekennzeichnet: Info, Warnung, Fehler, Login und Logout
Datum/Zeit	Datum und Zeit des Ereignisses (PC-Uhr) Mit den [+] und [-] Schaltflächen im Tabellenkopf beider Spalten können die Einträge nach auf- und absteigenden Zeiten oder Datum sortiert werden.
Zeitzone	Zum Zeitpunkt des Ereignisses gültige Zeitzone (Windows Systemsteuerung)
Benutzerverwaltung	Zum Zeitpunkt des Ereignisses angemeldeter Benutzer
Quelle	Unterscheidung nach Ereignissen in der Benutzerverwaltung oder in ASpect LS
Beschreibung	Ausführliche Angaben zum markierten Ereignis

Ansicht auswählen

Wenn Sie den Audittrail im Fenster **Benutzerverwaltung** geöffnet haben, sehen Sie sowohl die Ereignisse in ASpect LS als auch in der Benutzerverwaltung. In der Liste Ansicht können Sie die Anzeige auf Ereignisse in ASpect LS oder administrative Ereignisse einschränken.

	Wenn Sie den Audittrail in ASpect LS mit dem Menüpunkt System Audittrail geöffnet haben, werden Ihnen nur Ereignisse in ASpect LS angezeigt.
Audittrail filtern	Mit Klick auf Filtern können Sie nach angemeldeten Benutzern, Eintragsstypen oder Zeiträumen suchen. Außerdem können Sie die Suche auf Aktionen betreffend Methoden, Sequenzen, Ergebnisse oder Worksheets eingrenzen. Mit Klick auf Filter deaktivieren heben Sie die Einschränkungen des gesetzten Filters wieder auf.
Audittrail aktualisieren	Mit Klick auf Aktualisieren aktualisieren Sie die Eintragsliste des Audittrails. Dies kann notwendig sein, wenn bei bereits geöffneter Audittrail-Anzeige weitere Einträge hinzugefügt werden.
Audittrail drucken	Sie können den Audittrail drucken. Wenn Sie die Einträge gefiltert haben, werden nur die gefilterten Einträge gedruckt. <ul style="list-style-type: none"> ▶ Starten Sie den Ausdruck der aktuellen Audittrail-Ansicht mit Klick auf Drucken. Es öffnet sich das Druckfenster. ▶ Wählen Sie in der Liste Ausgabe auf das Ausgabeformat. ▶ Starten Sie den Ausdruck mit Klick auf Starten. <ul style="list-style-type: none"> ✓ Der Audittrail wird im gewählten Ausgabeformat ausgegeben.
Audittrail exportieren	Sie können die Audittrail-Einträge in eine CSV-Datei exportieren. Die Exportfunktion ist nur verfügbar, wenn der Audittrail in der Benutzerverwaltung geöffnet wurde. Bei aktivierten Filter werden nur die gefilterten Einträge exportiert. <ul style="list-style-type: none"> ▶ Öffnen Sie mit Klick auf Exportieren das Fenster Speichern unter. ▶ Geben Sie einen Pfad und den Namen ein und klicken Sie auf OK bestätigen. <ul style="list-style-type: none"> ✓ Die Audittrail-Datei wird exportiert.

13.4 Elektronische Signaturen

In ASpect LS können Ergebnisdaten elektronisch signiert werden. Die Signatur schließt die Arbeit an einer Datei ab, spätere Dateiänderungen führen zu einem ungültigen Signaturstatus. Signaturbedeutungen und ihre Zugehörigkeit zu einer Berechtigungsebene werden in den allgemeinen Einstellungen der Benutzerverwaltung angelegt. Die Einstellung, dass ein Nutzer ein Dokument signieren kann, wird im Benutzerkonto vorgenommen. Ein Benutzer kann also ein Dokument signieren, wenn diese Funktion in seinem Benutzerkonto aktiviert wurde und wenn für seine Berechtigungsebene Signaturen vorgesehen sind.

Durch den Signaturvorgang werden die Dateien verschlüsselt, mit einem Signaturstatus und den Daten des signierenden Benutzers versehen. Zusätzlich wird eine verschlüsselte Signaturdatei mit gleicher Bezeichnung wie die Ergebnisdatei, jedoch mit der Dateierweiterung ".sig" angelegt. Diese Datei enthält die Prüfsummen der Ergebnisdatei.

Eine Datei kann von mehreren Benutzern signiert werden.

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Allgemeine Einstellungen der Benutzerverwaltung konfigurieren [▶ 185]
- 📖 Benutzerebenen konfigurieren [▶ 183]

13.4.1 Messergebnisse signieren

Messergebnisdateien können im Anschluss an die Messung oder nach späterem Laden der Datei durch berechtigte Benutzer im Fenster **Signieren** mit einer elektronischen Signatur versehen werden.

Optionen im Fenster Signieren

Option	Beschreibung
Benutzername	Anmeldename des aktuellen Benutzers Der Benutzername kann geändert werden. Dies ermöglicht das Signieren durch weitere Benutzer.
Kennwort	Kennwort des Benutzers
Bedeutung	Signaturbedeutung Die Liste der Signaturbedeutungen wird durch den Administrator der Benutzerverwaltung festgelegt.
Kommentar	Optionale Bemerkungen (max. 256 Zeichen)
Signieren	Dokument mit den oben getätigten Einstellungen signieren

Ergebnisse signieren

- ▶ Messergebnisse zum Signieren im Hauptfenster der Software anzeigen.
- ▶ Den Menüpunkt **System | Ergebnisse signieren** wählen.
- ▶ Benutzernamen und Kennwort eingeben.
- ▶ Signaturbedeutung wählen.
- ▶ Auf **Signieren** klicken.
 - ✓ Es erfolgt eine Rückfrage, ob die Signatur erteilt oder der Vorgang abgebrochen werden soll. Die erfolgreiche Erteilung der Signatur wird bestätigt.

Sehen Sie dazu auch

- 📖 Neues Benutzerkonto anlegen [▶ 187]
- 📖 Allgemeine Einstellungen der Benutzerverwaltung konfigurieren [▶ 185]

13.4.2 Signatur anzeigen

Bei der Vorschau oder dem Ausdruck signierter Ergebnisdaten wird am Ende des Protokolls ein Abschnitt **Signaturen** angehängt. Dieser enthält alle elektronischen Signaturen der entsprechenden Datei:

Option	Beschreibung
Erteilt von	Vollständiger und Anmeldename des Benutzers, der die Datei signiert hat
Signiert am	Datum/Zeit der Signaturerteilung
Status	Der Signaturstatus kann eine der folgenden Bedeutungen annehmen: Gültig Signatur und Ergebnisdaten sind vollständig und korrekt. Die berechneten Prüfsummen der Dateien zeigen keine Differenzen zu den in der Signaturdatei gespeicherten Prüfsummen zum Zeitpunkt der Signatur. Ungültig (Fehlende oder ungültige Signaturdatei) Die zum Datensatz gehörende Signaturdatei wurde nicht gefunden oder ist fehlerhaft.

Option	Beschreibung
	Ungültig (TPS-Daten) Die Ergebnisdatei wurde nach dem Signieren geändert. Der Vergleich zwischen den neu berechneten und den gespeicherten Prüfsummen zeigt Differenzen.
Bedeutung	Signaturbedeutung
Kommentar	Optionaler Kommentar in der Signatur

13.5 AJ File Protection

Die optionale Software AJ File Protection schützt Dateien gegen beabsichtigte und unbeabsichtigte Datenmanipulation, z. B. Löschen oder Verändern von Daten. Dabei erlaubt ein Filtertreiber Verzeichniszugriffe durch hierfür autorisierte Anwendungen, Zugriffe durch andere Anwendungen werden blockiert. Die Funktion von Virenscannern sowie professioneller Replikations-, Synchronisations- oder Datensicherungssoftware wird bei Einhaltung der Microsoft-Standards nicht beeinträchtigt.

AJ File Protection muss durch den Systemadministrator installiert und konfiguriert werden. Die Installation erfordert Administratorrechte.

Eine detaillierte Beschreibung der Installation und der Konfiguration der Software finden Sie auf der Installations-Datenträger.

In Verbindung mit den separaten Rechten zum automatischen Speichern und Exportieren gewährleistet die Software AJ File Protection eine lückenlose Datensicherheit der Methodenerstellung, der Datenaufnahme und Auswertung.

14 Anhang

14.1 Übersicht über Markierungen in der Werteanzeige

Bemerkung	Bedeutung	Werte	Ausgabe
> KAL	Probenmittelwert ist größer als der Arbeitsbereich der Kalibrierkurve	Mittelwerte	Sequenz- und Ergebnisfenster
< KAL	Probenmittelwert ist kleiner als der Arbeitsbereich der Kalibrierkurve	Mittelwerte	Sequenz- und Ergebnisfenster
< NWG	Probenwert ist kleiner als die Nachweisgrenze	Mittelwerte	Sequenz- und Ergebnisfenster
< BG	Probenwert ist kleiner die Bestimmungsgrenze und größer als die Nachweisgrenze	Mittelwerte	Sequenz- und Ergebnisfenster
RSD !	Probenmittelwert liegt außerhalb des Bereichs der vorgegebenen relativen Standardabweichung	Mittelwerte	Sequenz- und Ergebnisfenster
RR!	Probenmittelwert liegt außerhalb des Bereichs der vorgegebenen relativen Spannweite	Mittelwerte	Sequenz- und Ergebnisfenster
Faktor!	Grenzüberschreitung des Rekali-brierfaktors für die Kalibrierkurve	Kalibrierkurve	Sequenz- und Ergebnisfenster
R ² (adj.)	Bestimmtheitsmaß der Regression R ² (adj.) der Kalibrierkurve unterschreitet den vorgegebenen Wert	Kalibrierkurve	Sequenz- und Ergebnisfenster Fenster Kalibrierkurve
MAN	Probeneinzelwert wurde manuell aus der Berechnung der Probenmittelwerte ausgeschlossen	Probeneinzelwerte	Fenster Probeneinzelwerte
KOR	Probeneinzelwert wurde automatisch durch Grubbs-Ausreißertest aus der Berechnung der Probenmittelwerte ausgeschlossen	Probeneinzelwerte	Fenster Probeneinzelwerte

14.2 Speicherorte der ASpect LS Dateien

Die für die Dateispeicherung verwendeten Ordner unterscheiden sich je nach Installationsoptionen und verwendeter Windows-Version. Im Folgenden werden die standardmäßig verwendeten Ordner aufgeführt. Die von der aktuellen Installation verwendeten Ordner werden im Fenster **Optionen | Ordner** angezeigt.

Arbeitsverzeichnis (und Unterordner)

Laufwerk:>Benutzer>Öffentlich>Öffentliche Dokumente>Analytik Jena>Aspect LS

Typ	Ordner	Dateien
Ergebnisse	C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectLS\<Technik>\Results	*.tps – Ergebnisdaten

Typ	Ordner	Dateien
Methoden- und Sequenzdaten	C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectLS\<Technik>\meth	*.tps
Optimierungsergebnisse (z.B. Optimierung des Ofenprogramms)	C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectLS\<Technik>\opt	*.tps
Defaultparameter	C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectLS\<Technik>\tables	*.dat
Proben-ID-Dateien, Einheiten-Daten und exportierte Dateien (CSV)	C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectLS\User	*tps; *.csv
Reportvorlagen	C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectLS\User\Reports	*.lst – Template; *.jpg- Vorschau-datei
Optionen und Justierwerte	C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectLS	*.cfg; *.ini
Worksheets	C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectLS\Worksheets	*.wst

Anwendungsdaten (und Unterordner)

Laufwerk:>ProgramData>Analytik Jena >ASpectLS

Typ	Ordner	Dateien
Gerätedaten und vordefinierte Kommentare	C:\ProgramData\Analytik Jena\ASpectLS	*.dat;*.tps
Benutzerverwaltungs- und Audittrail-Daten	C:\ProgramData\Analytik Jena\ASpectLS\UserMgmt	usrIrv.tps – Benutzerdatenbank; Evtlog*.tps Audittrail

Programm

Laufwerk:>ProgramData>Analytik Jena >ASpectLS oder

Laufwerk:>Programme(x86)>Analytik Jena >ASpectLS

Typ	Ordner	Dateien
Geräte- und Systemkonfiguration	C:\Program Files (x86)\ASpectLS	ASpectLS.ini

Technik: FL – Flamme; EA – Graphitofen; EAS – Feststoff-Graphitofen; HS – Hybrid; HF – HydrEA

Vor einer kompletten Wiederherstellung (Anwendung und Daten) muss zusätzlich die ASpect LS Installation ausgeführt werden.

Hinweis zur Anzeige von Ordnern und Dateinamenerweiterungen: Bei einigen Ordnern kann es sich um versteckte Ordner handeln, möglicherweise ist auch die Anzeige von Dateinamenerweiterungen ausgeschaltet. Wählen Sie ggf. im Windows Explorer den Menüpunkt **Ansicht**, um ausgeblendete Dateien, Ordner und Erweiterungen anzuzeigen.

Sehen Sie dazu auch

📄 Speicherpfade [▶ 176]