

Bedienungsanleitung

ASpect PQ

Software für ICP-OES



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

Service Analytik Jena GmbH+Co. KG
Konrad-Zuse-Str. 1
07745 Jena · Deutschland
Telefon + 49 3641 77 7407
Fax + 49 3641 77 7449
E-Mail service@analytik-jena.com

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

Dokumentationsnummer 13-5850-013-23

Ausgabe B (06/2023)

Ausführung der Techni- Analytik Jena GmbH+Co. KG
schen Dokumentation

Inhalt

1	Software ASpect PQ.....	7
1.1	Starten und Beenden von ASpect PQ.....	7
1.1.1	ASpect PQ starten.....	7
1.1.2	ASpect PQ in zweiter Instanz öffnen.....	11
1.1.3	ASpect PQ sperren.....	11
1.1.4	ASpect PQ beenden.....	11
1.2	Allgemeine Bedienungshinweise.....	11
1.2.1	Die Arbeitsoberfläche.....	11
1.2.2	Die Hilfefunktion.....	12
1.2.3	Die Übersicht über Menü-, Werkzeug- und Symbolleiste.....	13
1.2.4	Häufig verwendete Bedienelemente.....	15
2	Worksheet verwalten.....	19
2.1	Worksheet neu erstellen.....	20
2.2	Worksheet editieren.....	22
2.3	Worksheet löschen.....	22
2.4	Worksheet laden.....	23
3	Methoden.....	24
3.1	Methoden erstellen, speichern und laden.....	24
3.1.1	Neue Methode erstellen.....	24
3.1.2	Methode speichern.....	25
3.1.3	Methode laden.....	26
3.2	Einstellungen der Methodenparameter.....	27
3.2.1	Auswahl der Analysenlinien – Karte Linien.....	27
3.2.2	Parameter für Plasma und Transferoptik einstellen – Karte Plasma.....	34
3.2.3	Einstellungen zum Probentransport – Karte Probenzufuhr.....	35
3.2.4	Peaks auswerten – Karte Auswertung.....	37
3.2.5	Kalibrierparameter eingeben – Karte Kalib.....	41
3.2.6	Statistische Auswertungen spezifizieren – Karte Statistik.....	47
3.2.7	Qualitätskontrollproben für QC-Karten spezifizieren – Karte QCS.....	49
3.2.8	Qualitätskontrolle in der Sequenz spezifizieren – Karte QCC.....	52
3.2.9	Ausgabeformate für Ergebnisse spezifizieren - Karte Ausgabe.....	54
4	Sequenzen.....	57
4.1	Sequenzen erstellen, speichern, öffnen.....	57
4.2	Dialogfunktionen im Fenster Sequenz.....	59
4.3	Proben und Aktionsfolgen für die Sequenz zusammenstellen.....	60
4.3.1	Sonderaktionen in die Sequenz einfügen.....	62
4.3.2	Elemente/Linien für eine Probenanalyse/Aktion auswählen.....	63
5	Probeninformationsdaten.....	65
5.1	Probeninformationsdaten erstellen, speichern und öffnen.....	65
5.2	Informationsdaten für Proben und QC-Proben spezifizieren.....	66
5.2.1	Karte Probeninformation.....	66
5.2.2	Karte QC-Probeninformation.....	67
5.2.3	Probeninformationen spezifizieren.....	68
6	Analysen durchführen / Ergebnisse berechnen.....	69
6.1	Übersicht der Menübefehle und Schaltflächen zum Starten der Analysen im Hauptfenster.....	69
6.2	Plasma zünden/Plasma löschen.....	69
6.3	Analyse starten.....	71
6.4	Analysenablauf unterbrechen/fortsetzen.....	74
6.5	Aktionen der Sequenz wiederholen.....	74

6.6	Analysenergebnisse Neuberechnen	75
6.7	Messungen parallel zur laufenden Analyse auswerten (Offline-Modus).....	78
6.8	Anzeige der Ergebnisse und des Analysenfortschritts im Hauptfenster.....	78
6.8.1	Karte Sequenz/Ergebnisse	79
6.8.2	Karte Sequenz.....	79
6.8.3	Karte Ergebnisse.....	79
6.8.4	Karte Übersicht.....	83
6.9	Probeneinzelwerte anzeigen und bearbeiten (Fenster Probeneinzelwerte)	84
6.10	Intensitätsspektren anzeigen und bearbeiten (Fenster Spektren bearbeiten)	87
6.10.1	Spektren anzeigen – Karte Ansicht.....	88
6.10.2	Peak auswerten und Untergrundkorrektur bestimmen – Karte Auswertung.....	91
6.10.3	Spektrale Störungen beseitigen – Karte Spektrale Korrekturen	93
6.10.4	Linien finden – Karte Linienidentifizierung.....	96
6.11	Übersichtsspektrum aufnehmen.....	97
7	Kalibrierung.....	99
7.1	Darstellung der Kalibrierkurve	100
7.2	Anzeige der Kalibrierergebnisse	101
7.2.1	Kalibrierung – Karte Tabelle	101
7.2.2	Kalibrierung – Karte Residuen	102
7.2.3	Kalibrierung – Karte NWG/BG.....	102
7.3	Kalibrierkurve verändern.....	103
8	Qualitätskontrolle	104
8.1	Parameter der QC-Karten	104
8.2	Einträge und Grenzen der QC-Karten	105
8.3	QC-Karten anzeigen	107
9	Gerät und Zubehör steuern und kontrollieren.....	109
9.1	Spektrometer.....	109
9.1.1	Spektrometerparameter einstellen und Funktionen testen.....	109
9.1.2	Diagnose von Geräteparametern.....	111
9.1.3	Peakmessung kontinuierlich ausführen	112
9.1.4	Signalverlauf aufzeichnen.....	113
9.2	Plasma	114
9.2.1	Plasma zünden und Plasmabedingungen einstellen	114
9.2.2	Probenezufuhr der Pumpe kontrollieren.....	117
9.2.3	Justierung und Optimierung des Plasmas	118
9.3	Probengeber	120
9.3.1	Angeschlossenen Probengeber anzeigen.....	121
9.3.2	Probengeber-Rack konfigurieren.....	122
9.3.3	Technische Parameter des Probengebers	122
9.3.4	Probengeberfunktionen testen.....	124
9.3.5	Probenpositionen auf dem Probengeber anzeigen.....	125
9.3.6	Verdünnungsfunktion	126
9.4	Umlaufkühler.....	127
10	Datenmanagement	128
10.1	Druckfunktionen in ASpect PQ.....	128
10.1.1	Ergebnisdaten drucken.....	128
10.1.2	Weitere Analysenparameter und Einstellungen drucken	131
10.1.3	Protokollvorlagen	132
10.2	Datenverwaltung für alle Datentypen in ASpect PQ	134
10.2.1	Methoden und Sequenzen verwalten.....	135
10.2.2	Ergebnisdateien verwalten	137
10.2.3	Linien-/Wellenlängendateien exportieren.....	139
10.2.4	Korrekturmodelle verwalten	139
10.2.5	Korrekturspektren löschen	140
10.2.6	Protokollvorlagen importieren.....	140

10.2.7	Linienfavoriten verwalten.....	141
10.2.8	Worksheets importieren und exportieren.....	141
10.3	Ergebnisse im ASCII/CSV-Format speichern.....	142
10.4	Einheiten spezifizieren.....	143
10.5	Datenbanken für Stocks und QC-Proben verwalten.....	143
10.6	Vordefinierte Bemerkungen erstellen.....	144
10.7	Windows-Zwischenablage verwenden.....	145
11	ASpect PQ anpassen.....	147
11.1	Ansichtsoptionen.....	147
11.2	Speicherpfade.....	148
11.3	Exportoptionen.....	149
11.4	Optionen zum fortlaufenden ASCII-Export.....	150
11.5	Optionen zum Analysenablauf.....	150
12	Optionales Modul 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ.....	154
12.1	Benutzerverwaltung.....	154
12.1.1	Hierarchie und Funktionszugriff.....	154
12.1.2	Benutzerverwaltung einrichten.....	156
12.1.3	Kennwort ändern.....	163
12.2	Audittrail anzeigen, drucken und exportieren.....	163
12.3	Elektronische Signaturen.....	165
12.3.1	Messergebnisse signieren.....	165
12.3.2	Signatur anzeigen.....	166
12.4	AJ File Protection.....	167
13	Anhang.....	168
13.1	Übersicht über Markierungen in der Werteanzeige.....	168

1 Software ASpect PQ

ASpect PQ ist die Steuer- und Auswertesoftware für folgende ICP-OES Geräte:

- PlasmaQuant PQ 9000
- PlasmaQuant 9100

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 PQ 1.3.

Bestimmungsgemäße Verwendung

Die Software ASpect PQ dient ausschließlich der Ansteuerung der oben genannten Geräte und der Auswertung der mit diesen Geräten aufgenommenen Daten.

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

ASpect PQ und das damit zu steuernde Gerät dürfen nur durch ausgebildetes und eingewiesenes Personal bedient werden. Der Anwender muss mit dem Inhalt dieses und des Geräte-Handbuches vertraut sein.

1.1 Starten und Beenden von ASpect PQ

1.1.1 ASpect PQ starten

- ▶ Schalten Sie das Gerät und den Probengeber ein.
- ▶ Klicken Sie auf das ASpect PQ-Icon auf dem Windows-Desktop.



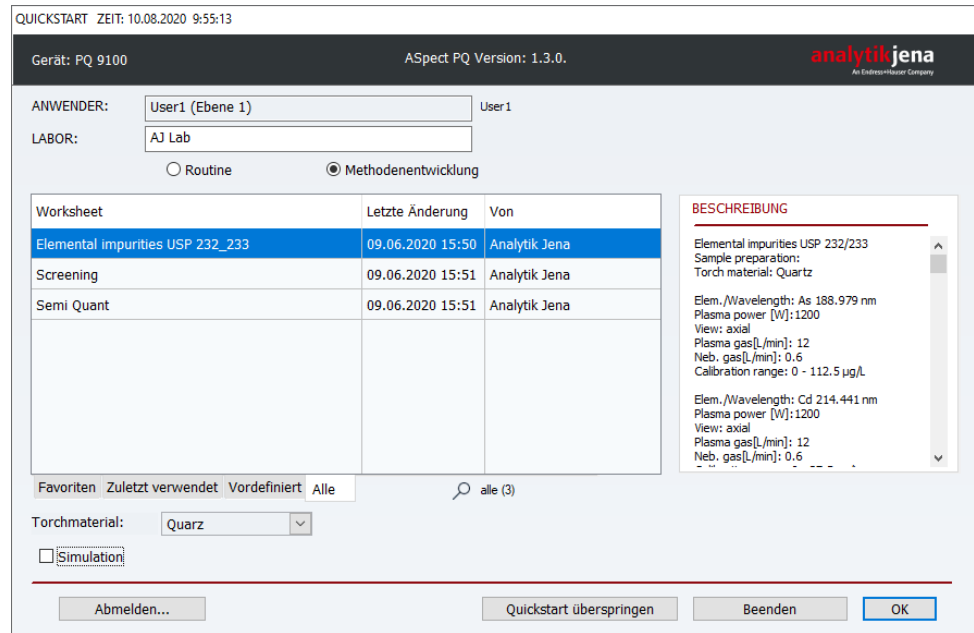
ASpect PQ wird gestartet.

- ▶ Wenn die optionale Benutzerverwaltung installiert ist, erfolgt eine Abfrage von Benutzernamen und Passwort. Erst bei erfolgreicher Eingabe wird das Programm ASpect PQ freigegeben.

Nach dem Start der Software wird der Quickstart (→ "Das Quickstart-Fenster" S. 7) geöffnet. Sie haben hier die Möglichkeit, Worksheets mit voreingestellten Methoden und Sequenzen zu wählen (→ "Mit Worksheet starten" S. 9) oder direkt auf die Oberfläche von ASpect PQ zu wechseln (→ "Ohne Worksheet starten" S. 10).

1.1.1.1 Das Quickstart-Fenster

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



Fenster Quickstart

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.
Routine	Programm für den Routinebetrieb starten. Im Routinebetrieb werden nur Methoden angezeigt, die für den Routinebetrieb freigeschaltet sind.
Methodenentwicklung	Programm vollständig starten. Alle Einstellungen in der Methodenentwicklung sind freigeschaltet.
Torchmaterial	Wählen Sie das verwendete Torchmaterial (Quarz oder Keramik), um die Empfindlichkeit des optischen Plasmasensors anzupassen.
Simulation	Für Trainings- und Demonstrationszwecke ist es möglich, ASpect PQ ohne ein angeschlossenes Analysengerät zu betreiben. Bei Aktivierung werden alle Gerätefunktionen (einschließlich Messwerterfassung und -auswertung) im Simulationsmodus abgearbeitet.
[Quickstart überspringen]	Ohne Auswahl eines Worksheets zur Oberfläche von ASpect PQ wechseln.

[Ports konfigurieren: ASC/DX]	Nur wenn das Verdünnungssystem Teledyne Cetac SDXHPLD mit ASX-560 Autosampler angeschlossen ist Nach einem Klick auf die Schaltfläche werden die vom Probengeber und Verdünnungssystem belegten USB-Ports automatisch konfiguriert. Wenn das optionale "Modul 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ" (Benutzerverwaltung) installiert ist, kann diese Funktion nur von einem Benutzer mit Administratorrechten ausgeführt werden.
[Beenden]	Fenster Quickstart schließen und ASpect PQ beenden.
[OK]	Nach Auswahl eines Worksheets zur Oberfläche von ASpect PQ wechseln.

Worksheet-Tabelle

Die Worksheet-Tabelle zeigt die aktuell verfügbaren Worksheets an. Die 4 Tabs erleichtern Ihnen das Auffinden eines Worksheets:

Tab	Inhalt
Favoriten	Worksheets mit der Markierung Favorit
Zuletzt verwendet	Zuletzt verwendete Worksheets
Vordefiniert	Worksheets von Analytik Jena, die bei der Installation von ASpect PQ mit installiert werden
Alle	Alle Worksheets
	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 in der hinterlegten Methode beinhalten (ODER-Logik).

1.1.1.2 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 Zubehör am Analysengerät und schalten Sie danach das Zubehör und das Gerät ein.
- ▶ Starten Sie die Software.
 - ✓ Der Quickstart erscheint.
- ▶ Nehmen Sie die notwendigen Eingaben in den Feldern **Anwender** und **Labor** vor.
- ▶ Wählen Sie das **Torchmaterial**.
- ▶ Markieren Sie in der Worksheet-Tabelle das benötigte Worksheet.
- ▶ Klicken Sie auf **[OK]**.

- ✓ Die Oberfläche von ASpect PQ 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.

1.1.1.3 Ohne Worksheet starten

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

- ▶ Installieren Sie das Zubehör am Analysengerät und schalten Sie danach das Zubehör und das Gerät ein.
- ▶ Starten Sie die Software.
 - ✓ Der Quickstart erscheint.
- ▶ Nehmen Sie die notwendigen Eingaben in den Feldern **Anwender** und **Labor** vor.
- ▶ Wählen Sie das **Torchmaterial**.
- ▶ Klicken Sie auf **[Quickstart überspringen]**.
 - ✓ Die Oberfläche von ASpect PQ erscheint.

Allgemeiner Ablauf einer Messung

Spezifizieren Sie für Ihre Analysenaufgabe eine Methode und eine Sequenz und starten Sie die Messung.

Für einen manuellen oder automatischen Messablauf sind folgende Schritte notwendig:

- ▶ **Methodenparameter** (Methodenentwicklung) spezifizieren.
- ▶ **Sequenz** erstellen. Diese enthält Proben und Aktionen in der abzuarbeitenden Reihenfolge. Einige probenbeschreibende Daten wie Probenbezeichnung und Position auf dem Probenhalter können ebenfalls direkt eingegeben und mit der Sequenz gespeichert werden.
- ▶ Für die Routine-Analytik ist es vorteilhaft, eine **Probenidentifikationsdatei** (Proben-ID) zu erstellen. Diese enthält probenbeschreibende Daten wie Bezeichnung, Verdünnungsfaktor und Probenhalter-Position. Die Daten werden benötigt, wenn eine Rückrechnung der Konzentration auf die Originalprobe erfolgen soll. Probenidentifikationsdateien sind Textdateien und können 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, ...) zugegriffen.

Nach dem Starten der Messung werden die Ergebniswerte in die Ergebnisliste im Hauptfenster eingetragen. Für eine Detailanzeige (Einzelwerte, Spektren, ...) kann die entsprechende Probenzeile 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.

1.1.2 ASpect PQ in zweiter Instanz öffnen

Bei bereits laufender Anwendung wird eine weitere Programminstanz der Anwendung im Offline-Modus geöffnet. In diesem Modus besteht keine Verbindung zum Gerät. Alle weiteren Funktionen wie das Erstellen von Methoden oder das Laden und Auswerten von Ergebnissen können jedoch parallel zum laufenden Messbetrieb in der ersten Programminstanz verwendet werden.

- ▶ Starten Sie das Programm in der zweiten Instanz mit dem Menüpunkt **Datei | Offline-Programminstanz starten**.

1.1.3 ASpect PQ sperren

Die Anwendung kann für die Bedienung gesperrt werden, Messungen werden während der Sperrung weiter ausgeführt. In Verbindung mit der optional erhältlichen Benutzerverwaltung wird eine Kennwortbestätigung für das Entsperren des Bildschirms benötigt.

- ▶ Wählen Sie den Menüpunkt **Extras | Sperren**.
- ▶ Um die Anwendung zu entsperren, klicken Sie auf das Schlosssymbol auf dem Bildschirm.

1.1.4 ASpect PQ beenden

- ▶ Löschen Sie das Plasma (→ "Plasma zünden/Plasma löschen" S. 69).
- ▶ Beenden Sie das Programm, indem Sie den Menüpunkt **Datei | Beenden** wählen.
- ▶ Sind zu diesem Zeitpunkt Methoden-, Sequenz- oder Probeninformationsdaten noch nicht gespeichert, erscheint ein Bedienhinweis. Klicken Sie auf **[Ja]**, wenn Sie die Dateien speichern wollen.
- ▶ Das ICP-OES Gerät benötigt nach Abschalten des Plasmas noch Zeit für die Systemkühlung. Ist die Zieltemperatur noch nicht erreicht, wird ein Verlaufsfenster mit Benachrichtigung zum sicheren Ausschalten des Gerätes angezeigt. Schalten Sie erst nach Beenden von ASpect PQ das ICP-OES Gerät aus.



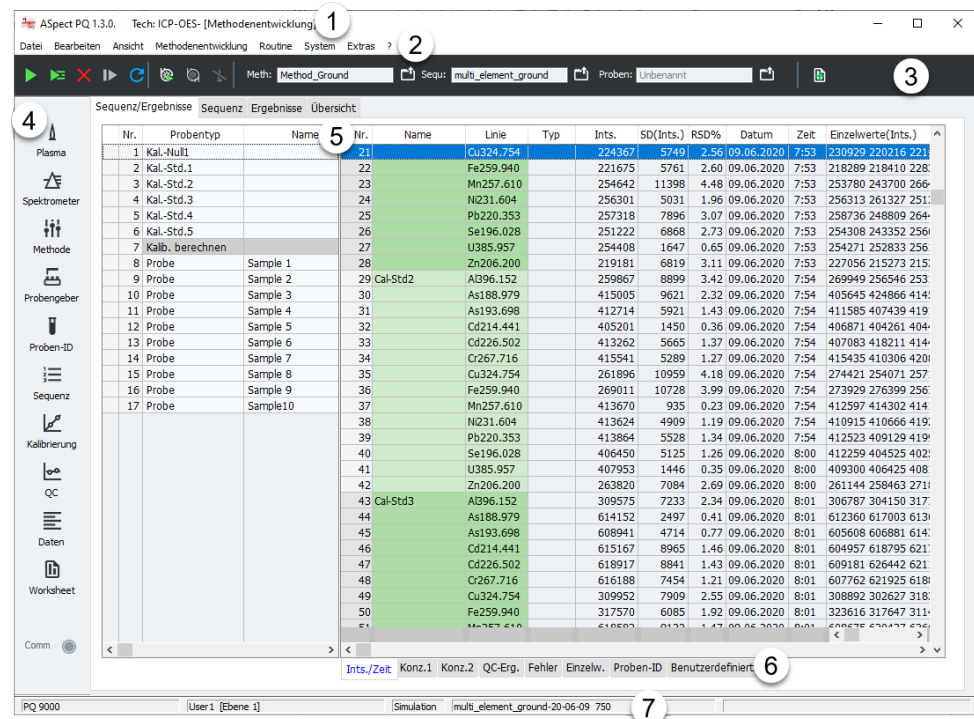
Hinweis

Wird ASpect PQ beendet, während das Plasma brennt, wird das Plasma nach Rückfrage automatisch gelöscht!

1.2 Allgemeine Bedienhinweise


1.2.1 Die Arbeitsoberfläche

Nach dem Start des Programms ASpect PQ wird zunächst das Fenster **Quickstart** geöffnet. Von dort aus erreichen Sie die Arbeitsoberfläche (→ "Das Quickstart-Fenster" S. 7).



Arbeitsoberfläche von ASpect PQ

Hauptbestandteile 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 Messsequenzen, 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 Schaltfläche zum Anlegen ein neues Worksheets.
4	Über die Symboleiste 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 (→ "Anzeige der Ergebnisse und des Analysenfortschritts im Hauptfenster" S. 78).
6	Einige Hauptkarten besitzen weitere Unterregister , die im unteren Bereich des Fensters angeordnet sind.
7	In der Statusleiste am unteren Rand werden Informationen über das angeschlossene Gerät, den angemeldeten Nutzer und der Name der aktuell angezeigten Ergebnisdatenbank ausgegeben.

1.2.2 Die Hilfefunktion

Hilfe zur Bedienung von ASpect PQ erhalten Sie über den Menüpunkt ? | **Hilfethemen**. Während der Arbeit mit den Fenstern von ASpect PQ können Sie die Funktionstaste **[F1]** drücken, um eine kontextsensitive Hilfe zu erhalten.

Das Programm blendet Kurzinformationen (Tooltips) zu den Schaltflächen der Werkzeug- und der Symbolleiste, anderen Symbolschaltflächen und für die Spaltentitel in den Fenstern **Methode**, **Sequenz** und **Proben-ID** ein, wenn Sie den Mauszeiger darüber bewegen.

1.2.3 Die Übersicht über Menü-, Werkzeug- und Symbolleiste

Funktionen in der Menüleiste











Am oberen Rand der ASpect PQ-Oberfläche 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 ▪ Spektrendaten exportieren ▪ Aktives Fenster oder Protokoll drucken ▪ Offline- bzw. Online-Programminstanz starten ▪ Protokollentwurfsmodus aufrufen ▪ Das Fenster Quickstart aufrufen ▪ 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
Ansicht	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Fenster, die Darstellungen und Informationen während des Analyseablaufs enthalten, z. B. Signalverlauf, öffnen und schließen ▪ Skalierung der Signalachse der Darstellungen auswählen
Methodenentwicklung	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Fenster, die während der Methodenentwicklung benötigt werden, öffnen ▪ Übersichtsspektrum aufzeichnen
Routine	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Messablauf starten, pausieren und abbrechen ▪ Ergebnisse Neuberechnen ▪ Plasma löschen ▪ System spülen
Extras	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Fenster Daten und Optionen öffnen ▪ Linienliste aufrufen ▪ Suche nach Einzelproben starten ▪ Aktuelle Bildschirmanzeige ausdrucken ▪ Wartungen (Umlaufkühler) überprüfen und durchführen ▪ Arbeitsplatz sperren

System	Verfügbar, wenn das optionale Modul "21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ" installiert ist <ul style="list-style-type: none"> ▪ Benutzerverwaltung konfigurieren ▪ Kennwort ändern ▪ Audit Trail ansehen ▪ Ergebnisse signieren
?	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Hilfe und Versionsinformation anzeigen


Werkzeugleiste










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

Tools	Beschreibung
	Sequenzmessung starten.
	Markierte Zeilen in der Sequenz messen.
	Laufende Sequenzmessung unterbrechen.
	Unterbrochene Sequenzmessung fortsetzen.
	Ergebnisse neu berechnen, z. B. nach Messung einer weiteren Probe.
	Pumpe am ICP-OES Gerät starten/stoppen.
	Pumpe schneller laufen lassen (Probenweg spülen).
	Plasma zünden / löschen.
	Dateien öffnen. Es können gespeicherte Methoden, Sequenzen oder Proben-ID in das Programm geladen und für die aktuelle Analyse verwendet werden.
	Neues Worksheet erstellen.

Symbolleiste

Die Symbolleiste bietet schnellen Zugriff zu den wichtigsten Funktionen des Programms ASpect PQ. Ein Klick auf das Icon 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.

Icon	Beschreibung
	Atomisierung kontrollieren: <ul style="list-style-type: none"> ▪ Zünden/Löschen des Plasmas ▪ Einstellungen der Gasflüsse ▪ Überprüfen der Pumpe für die Probenförderung zum Zerstäuber ▪ Justieren der Transferoptik ▪ Optimierung von Plasmaleistung und Zerstäubergas

	Spektrometerfunktionen überprüfen: <ul style="list-style-type: none"> ▪ Gerätedaten ▪ Test der Wellenlängenkorrekturen ▪ Messung an einer Test-Wellenlänge starten ▪ eine kontinuierliche Messung für Geräteoptimierungen starten
	Methodenfenster öffnen
	Probengeber spezifizieren
	Fenster mit Probeninformationsdaten öffnen
	Sequenzfenster öffnen
	Fenster mit Kalibrierung öffnen
	Fenster mit Daten der Qualitätskontrolle öffnen
	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Datenverwaltung ▪ Ergebnisse drucken und Protokollvorlagen verwalten ▪ Auswahl der Maßeinheiten ▪ Datenbank für Stockstandards und QC-Proben
	Worksheets verwalten, gespeicherte Worksheets öffnen


1.2.4 Häufig verwendete Bedienelemente

Verschiedene Schaltflächen, Maus- und Tastaturfunktionen werden innerhalb von ASpect PQ mit immer wieder 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 klicken Sie in der ersten grau unterlegten Tabellenspalte auf die entsprechende Zeile. Der Markierungsbalken kann anschließend mit den Tasten [↑] und [↓] verschoben werden.
- ▶ Zum Verändern der Spaltenbreite bewegen Sie den Mauszeiger auf die Begrenzungslinie zwischen zwei Spalten bis ein Doppelpfeil erscheint. Drücken Sie die linke Maustaste und passen Sie die Spaltenbreite an.

In Eingabefeldern stehen zusätzlich folgende Funktionen zur Verfügung:

- ▶ [F2] schaltet den Editiermodus ein. In diesem Modus werden die Tasten [←] und [→] zum zeichenweisen Editieren verwendet. Erneutes Drücken von [F2] aktiviert den Standardmodus bei dem die Cursortasten zur Navigation zwischen den Zellen verwendet werden.
- ▶ Texte können über das Menü **Bearbeiten | Kopieren** und **Bearbeiten | Einfügen** oder über die Tastenkombination [Strg+C] und [Strg+V] in die Windows-Zwischenablage kopiert und wieder eingefügt werden.

Schaltflächen in den Tabellen

Schaltfläche	Funktion
[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 (Probe, Standards, QC usw.). Bei aktiviertem Kontrollkästchen inc. (steht für Inkrement) wird dieser Wert automatisch erhöht, z. B. Probe001, Probe002 ...

	Typ	Pos	Name	AS-VF	Name(2)	Elemente
1	Reag.-Blindwert	101		1		alle
2	Kal.-Null1	101		1		alle
3	Kal.-Std.1	102		1		alle
4	Kal.-Std.2	103		1		alle
5	Kal.-Std.3	104		1		alle
6	Kal.-Std.4	105		1		alle
7	Kal.-Std.5	106		1		AB96.152, Cu324.754, Fe259.940, :
8	Kalb. berechnen					
9	Probe	101		1		alle
10	Probe	102		1		alle
11	Probe	103		1		alle

Anhängen Einfügen Löschen

☰ ☰ ☰





inc.
 Typen

Beispiel für eine Tabelle

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	Funktion
	Aktiviert den Zoommodus. Bei gedrückter linker Maustaste kann ein Grafikbereich ausgewählt werden, der vergrößert dargestellt wird.
	Deaktiviert den Zoommodus und schaltet die Darstellung auf die ursprüngliche Skalierung zurück.
	Aktiviert den Textmodus. Bei gedrückter linker Maustaste kann ein Bereich für ein Fenster ausgewählt werden, mit dem ein Text zur Grafik hinzugefügt werden kann. 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

Symbol	Funktion
[F1]	Kontextsensitive Hilfe aufrufen.
[F2]	Tabellenzellen editieren.
[F5]	Bildschirm Ausdruck starten.
[F6]	Ausgewählte Zeile der Sequenz (Menüpunkt Routine Zeile der Sequenz ausführen) messen.
[F7]	Zusätzliche Darstellungsfenster (z. B. Signalverlauf) anzeigen.
[F8]	Zusätzliche Darstellungsfenster schließen.

[F10]	Für die Bedienung per Tastatur zwischen Menüzeile des Arbeitsbereichs und Ergebnisfenster umschalten.
[F11]	Gestoppten Messablauf fortsetzen (Menüpunkt Routine Fortsetzen).
[F12]	Messablauf starten und stoppen (Menüpunkte Routine Sequenz starten und Routine Stopp).

Drucker verwenden

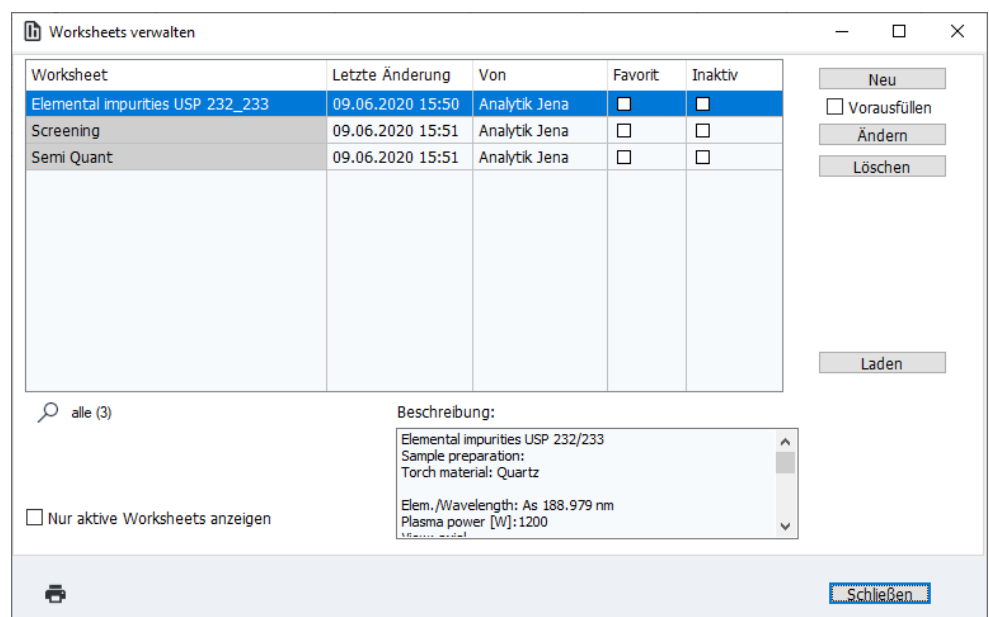
In ASpect PQ wird der unter Windows eingerichtete Standard-Drucker verwendet.

2 Worksheet 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 Messung der Sequenz starten (→ "Mit Worksheet starten" S. 9).

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.



Fenster Worksheets verwalten



Elemente im Fenster
Worksheets verwalten

Schaltflächen / Optionen	Beschreibung
[Neu]	Neues Worksheet erstellen.
Vorausfüllen	Eine bereits geladene Sequenz und Methode werden übernommen.
[Ändern]	Markiertes Worksheet editieren.
[Löschen]	Markiertes Worksheet löschen.
[Laden]	Markiertes Worksheet für eine Messung laden.
Nur aktive Worksheets anzeigen	In der Tabelle alle Worksheets ausblenden, die mit inaktiv gekennzeichnet sind.
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	Datum der letzten Änderung des Worksheets
Von	Anwender, der die letzte Änderung vorgenommen hat Der Name des Anwenders wird aus dem Quickstart übernommen.
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.


2.1 Worksheet neu erstellen


- ▶ 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 Vereinbarungen zum Speichern der Ergebnisdatei und der Verwendung einer Proben-ID-Datei treffen und die Beschreibung editieren (siehe unten "Elemente im Fenster **Neues Worksheet**").
- ▶ Verlassen Sie das Fenster mit [OK].
 - ✓ Das neue Worksheet erscheint im Fenster **Worksheets verwalten** und kann geladen werden.


Neues Worksheet


Name: ★ Favorit


Methode:   Inaktiv
08.06.2020 15:10

Sequenz: 
09.06.2020 7:45

Proben-ID: 

Ordner: 

Ergebnisdatei: 

Ordner: 

Name:

C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectPQ\ICP\RESULTS\Ground.tps





Elemente:

Letzte Änderung: 10.08.2020 10:29

Beschreibung:

Fenster Neues Worksheet


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 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	<p>Optional können Sie Einstellungen zum Speichern der Ergebnisse vornehmen:</p> <p>(keine): Messung startet mit Fenster Messung starten, in dem der Name der Ergebnisdatei und der Speicherort vergeben wird (→ "Analyse starten" S. 71)</p> <p>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.</p> <p>Erstellen und an Datei anhängen: Beim ersten Sequenzstart wird die Ergebnisdatei erzeugt. Bei jedem weiteren Sequenzstart werden die Ergebnisse in dieser Datei angehängt.</p>
Beschreibung	<p>Im Feld Beschreibung werden zunächst voreingestellt einige Analysenparameter 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.</p>
Favorit	<p>Mit einem Klick auf den Stern, können Sie das Worksheet als Favorit markieren:</p> <p>Gelber Stern: Favorit</p> <p>Grauer Stern: Kein Favorit</p>
Inaktiv	<p>Wenn aktiviert, dann wird das Worksheet nicht im Quickstart angezeigt</p>


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.


2.3 Worksheet löschen

Sie können ein nicht benötigtes 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 im Quickstart wählen (→ "Das Quickstart-Fenster" S. 7) oder im Fenster **Worksheets verwalten** laden:

- ▶ Das Fenster **Worksheets verwalten** mit einem Klick auf  in der Symbolleiste öffnen.
- ▶ Das Worksheet mit einem Mausklick in der Tabelle markieren und auf **[Laden]** klicken.
 - ✓ 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.

 Hinweis


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

3 Methoden

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

- Auswahl der Analysenlinien
- Parameter für die Linienauswertung
- Plasma- und Spektrometereinstellungen
- Art der Probenzufuhr
- Kalibrierparameter
- Statistische Auswertungen
- Einstellungen zur Qualitätskontrolle und -sicherung
- Einstellungen zur Messwertausgabe

Die Methode ist die Grundlage für eine Messsequenz, in der die Abfolgen von Probenmessungen und anderen Aktionen innerhalb einer Analyse festgelegt sind (→ "Sequenzen" S. 57). 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. Wurde nach Start des Programms bis zu diesem Zeitpunkt keine Methode geladen, enthalten die Anzeigen des Fensters die Voreinstellungen oder sind leer.

3.1 Methoden erstellen, speichern und laden

Methoden werden in einer Datenbank gespeichert. Werden die Methodenparameter einer vorhandenen Methode variiert und diese Änderungen mit gleichen Namen gespeichert, wird von der Methode eine neue Version angelegt. Die vorhandene Methode kann also nicht überschrieben und auf diese Weise unabsichtlich gelöscht werden. Weitere Hinweise zur Verwaltung von Methoden finden Sie im Abschnitt "Methoden und Sequenzen verwalten" S. 135.


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 Menüpunkt **Datei | Neue Methode erstellen**.
- ▶ Aktivieren Sie eine der drei Optionen und öffnen Sie dementsprechend das Fenster **Methode**:

Option	Bedeutung
Basierend auf Standardwerten	Ein Fenster mit neuen Methodenparametern (nur mit Voreinstellungen für die Kalibrierung und Statistik) öffnen.
Basierend auf aktuellen Parametern	Das Fenster Methode mit den aktuellen Methodenparametern öffnen.

Basierend auf gespeicherter Methode	Das Fenster Methode öffnen aufrufen. Nach Auswahl einer Methode werden deren Parameter im Fenster Methode angezeigt.
--	---

Alternativ klicken Sie auf  oder wählen Sie den Menüpunkt **Methodenentwicklung | Methode**, um das Fenster **Methode** mit den aktuellen Parametern zu öffnen.

- ▶ Nehmen Sie die benötigten Methodeinstellungen vor (→ "Einstellungen der Methodenparameter" S. 27).
- ▶ Aktivieren Sie die eingestellten Methodenparameter mit den Schaltflächen **[OK]** oder **[Übernehmen]** für die nachfolgende Analyse.

3.1.2 Methode speichern

Nach Eingabe der Methodenparameter speichern Sie die Methode in der Datenbank:

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Methode** auf **[Speichern]**, um das Fenster **Methode speichern** zu öffnen.
Alternativ wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Speichern | Methode**.

Methode speichern

Name: Kat.:

Name	Vers.	Datum	Zeit	Kat.	Anwender	Status
Method_Ground	1	05.06.2020	17:15	INS	User	Entwicklung
TW Standardkt	1	08.06.2020	12:34		User	Entwicklung

Sortieren nach: Aufsteigend Absteigend

Nur aktuelle Versionen anzeigen
 Als Routinemethode verwenden
 Kalibrierkurve(n) speichern

Beschreibung:

Datenbankfenster zum Speichern der Methode

- ▶ Nehmen Sie folgende Einstellungen vor:

Option	Eingabe / Einstellung
Name	Methodenname eingeben.
Als Routinemethode verwenden	Wenn aktiviert, ist die Methode im Programmmodus Routine verfügbar (→ "Das Quickstart-Fenster" S. 7).

Tabelle	Übersicht vorhandener Methoden Mit den Optionen der Gruppe Sortieren nach können Sie die Methoden nach verschiedenen Kriterien sortieren. Ist die Option Nur aktuelle Versionen anzeigen aktiviert, wird bei gleichnamigen Methoden jeweils nur die Methode mit der höchsten Version angezeigt.
Beschreibung	Optional nähere Erläuterungen zur Methode eingeben.
Kat.	Optional eine Kategorie (drei Zeichen) für eine weitere Kennzeichnung und Sortierung der Methoden eingeben.
Kalibrierkurve(n) speichern	Vorhandene Kalibrierkurven werden mit der Methode gespeichert und können für weitere Analysen verwendet werden.

- ▶ Speichern Sie die Methode mit **[OK]**.

Die Methode ist in der Datenbank gespeichert. Bei Verwendung eines vorhandenen Methodennamens wird die vorhandene Methode nicht überschrieben, sondern eine neue Version in der Datenbank angelegt. Um Methoden aus der Datenbank zu entfernen, müssen sie explizit gelöscht werden (→ "Methoden und Sequenzen verwalten" S. 135)!



Hinweis

Die Methode wird auch in der Ergebnisdatei der Messung gespeichert. Nach Aufrufen der Ergebnisdatei kann auch die Methode wiederhergestellt werden.

3.1.3 Methode laden

Methodenparameter können sowohl aus der Methodendatenbank als auch aus einer vorhandenen Ergebnisdatei geladen werden.


Aus Datenbank laden

- ▶ Öffnen Sie das Datenbankfenster mit einer der folgenden Alternativen:
 - Klicken Sie in der Werkzeugleiste auf das Ordner-Symbol neben dem Feld **Methode**
 - Wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Methode öffnen** oder
 - Klicken Sie im Fenster **Methode** auf **[Öffnen]**.
- ▶ Wählen Sie in der Liste die gewünschte Methode aus.
- ▶ Im Feld **Kat.** können Sie die angezeigten Methoden mit Auswahl einer Kategorie einschränken. Wenn Sie alle Methoden sehen möchten, löschen Sie den Eintrag im Feld **Kat.**
- ▶ Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Nur aktuelle Version anzeigen**, wenn bei gleichnamigen Methoden jeweils nur die Methode mit der höchsten Version angezeigt werden soll.
- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Methode** mit **[OK]**.

Aus Ergebnisdatei laden

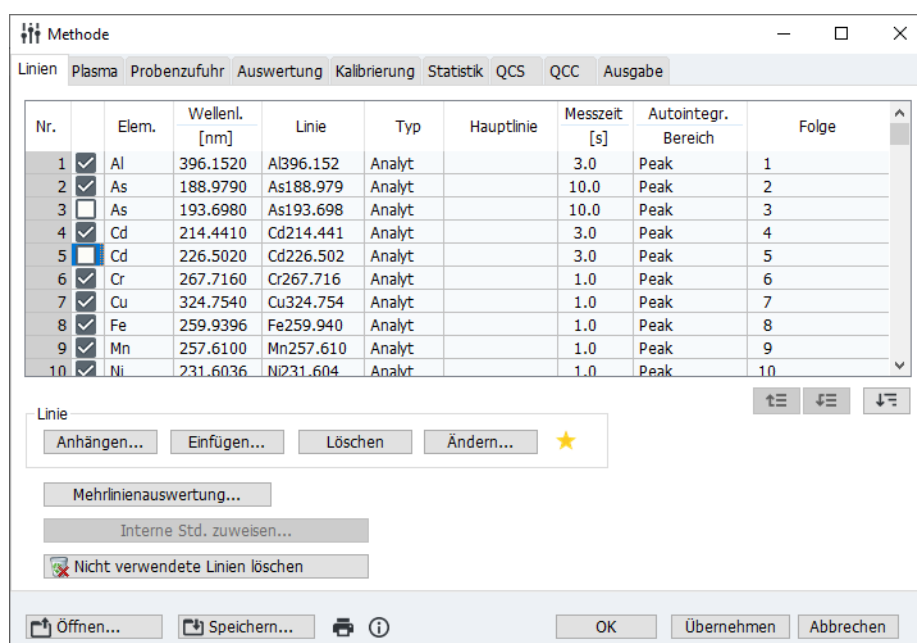
Aus einer im Hauptfenster angezeigten Ergebnisdatei kann die Methode extrahiert werden.

- ▶ Führen Sie auf eine beliebige Probe einen Rechtsklick aus.

- ▶ Wählen Sie im Kontextmenü den Punkt **Methode aus Ergebnisdatei laden**.
- ▶ Nach einer Abfrage, ob aktuelle Methodenparameter überschrieben werden, kann die Methode mit einem Klick auf  angezeigt werden.

3.2 Einstellungen der Methodenparameter




3.2.1 Auswahl der Analyselinien – Karte Linien



Fenster Methode / Linien

Parameter der Linientabelle

Tabellenspalte	Beschreibung
Nr.	Reihenfolge der ausgewählten Linien in der Tabelle
<input type="checkbox"/> <input checked="" type="checkbox"/>	Nur im Modus Methodenentwicklung verfügbar Die Markierung erleichtert die Methodenentwicklung, bei der zu Beginn mehrere Linien eines Elements gemessen und dann die geeignete Linie ausgewählt wird. Wenn eine Elementlinie mit einem Häkchen aktiviert ist, wird diese Linie für die Analyse verwendet und gemessen. Deaktivierte Linien sind in der folgenden Analyse ausgeschlossen und werden nicht gemessen. Deaktivierte Linien sind noch nicht explizit aus der Linientabelle gelöscht.
Elem.	Elementsymbol des zu analysierenden Elements
Wellenl. [nm]	Wellenlänge der Analyselinie in nm
Linie	Bezeichnung der Analyselinie. In der Voreinstellung setzt sich die Bezeichnung der Linie aus dem Elementsymbol und der Wellenlänge zusammen. Die Bezeichnung kann jedoch frei editiert werden und muss eindeutig sein.
Typ	Auswahl zwischen Analyt (zu analysierende Linie) und Int. Standard (interne Referenzlinie)

Hauptlinie	<p>Anzeige, mit welcher Analysenlinie die aktuelle Linie gleichzeitig gemessen wird (Simultanmessung).</p> <p>Die Messzeit kann verkürzt werden, indem nahe zusammen liegende Linien mit einer Spektrometereinstellung erfasst werden. Nach einem Klick auf [Mehrlinienauswertung] werden die möglichen Kombinationen angezeigt (→ "Linien simultan messen" S. 31).</p>
Messzeit	Gesamtmesszeit für eine Analysenlinie
Autointegr. Bereich	<p>Die Integrationszeit automatisch wählen, sodass der CCD-Detektor optimal beleuchtet ist und keine Überbelichtung auftritt. Bei einer Überbelichtung läuft die von einem Pixel nicht aufgenommene Ladung auf benachbarte Pixel über und verursacht Messfehler (Blooming-Effekt). Für die Ermittlung der Integrationszeit muss der betrachtete Bereich gewählt werden:</p> <p>Spektrum Die Integrationszeit wird auf den höchsten Peak im Spektralbereich der Linie optimiert. Diese Option ist voreingestellt und führt zu einem sicheren Ergebnis.</p> <p>Peak Die Integrationszeit wird auf den Analysenpeak optimiert. Bei Auswahl dieser Option wird der Dynamikbereich des CCD-Detektors für die Analyse optimal genutzt. Es ist jedoch darauf zu achten, dass sich nicht in unmittelbarer Nähe des Analysenpixels ein höherer Peak befindet. In diesem Fall könnte das Messergebnis durch den Blooming-Effekt verfälscht werden.</p> <p>Detektor Die Integrationszeit wird an den höchsten Peak auf dem Detektor angepasst. Bei dieser Option wird kein Bereich des Detektors überbelichtet, unter Umständen werden die Pixel des Analysenpeaks nicht optimal beleuchtet.</p>
Folge	<p>Reihenfolge in der Analyse. Die Messreihenfolge kann frei festgelegt werden.</p> <p>Hinweis: Nach Markierung einer Zahl werden mit einem Klick auf  den nachfolgenden Zeilen die Zahlen in aufsteigender Reihenfolge zugeordnet. Sie können markierte Zeilen (Elementlinien) mit  und  in der Tabelle in der gewünschten Messreihenfolge anordnen, in der ersten Zeile unter Folge "1" eingeben und mit  die Messreihenfolge aufsteigend allen anderen Analysenlinien zuordnen.</p>

Schaltflächen in der Gruppe Linien

Mit den Schaltflächen **[Anhängen]**, **[Einfügen]** und **[Ändern]** fügen Sie der Linientabelle weitere Analysenlinien hinzu bzw. editieren Sie eine ausgewählte Linie (→ "Tabellen" S. 16). Nach einem Klick auf eine dieser Schaltflächen öffnet sich das Fenster **Element/Linie auswählen** für weitere Eingaben. Mit der Schaltfläche **[Löschen]** löschen Sie eine oder mehrere markierte Analysenlinien aus der Methode.

Weitere Schaltflächen

Schaltfläche	Beschreibung
[Mehrlinienauswertung]	Analysenlinien, die gemeinsam mit einer Monochromatoreinstellung erfasst werden, können simultan gemessen werden (→ "Linien simultan messen" S. 31).
[Interne Std. zuweisen]	Analysenlinien mit einem internen Standard verknüpfen und korrigieren (→ "Interne Standards zuweisen" S. 33).
[Nicht verwendete Linien löschen]	Nur im Programmmodus Methodenentwicklung verfügbar Alle deaktivierten Linien aus der Methodenliste löschen. Hinweis: Methoden können nur als Routinemethoden gespeichert und verwendet werden, wenn alle Linien in der Linientabelle verwendet werden.

3.2.1.1 Analysenlinien in die Linientabelle einfügen

Fenster Elemente/Linie auswählen

Die Auswahl der Analysenlinien erfolgt im Fenster **Element/Linie auswählen**. Die Karte **Elemente** enthält das Periodensystem mit allen mit der ICP-OES-Technik analysierbaren Elementen (dunkelgrauen Schaltflächen und schwarzen Elementsymbole). "Ausgegraute" Elemente sind nicht verfügbar. Die Karte **Linieninterferenzen** zeigt für eine ausgewählte Linie die bekannten möglichen Interferenzen mit den relativen Empfindlichkeiten an.

Element	Wellenl. [nm]	Typ	BEC(ax.) [mg/L]	Rang	
<input checked="" type="checkbox"/>	Si	251.6112	I	0.05	1
<input type="checkbox"/>	Si	212.4120	I	0.08	2
<input type="checkbox"/>	Si	288.1577	I	0.13	3
<input type="checkbox"/>	Si	221.6669	I	0.15	4
<input type="checkbox"/>	Si	220.7978	I	0.61	5
<input type="checkbox"/>	Si	252.4108	I	0.19	6
<input type="checkbox"/>	Si	198.8370	I	0.25	7
<input type="checkbox"/>	Si	190.0730	I	0.65	8
<input type="checkbox"/>	Si	221.0892	I	0.28	9
<input type="checkbox"/>	Si	251.9202	I	0.25	10
<input type="checkbox"/>	Si	250.6897	I	0.15	11
<input type="checkbox"/>	Si	252.8508	I	0.16	12
<input type="checkbox"/>	Si	251.4316	I	0.19	13
<input type="checkbox"/>	Si	243.5150	I	0.57	14
<input type="checkbox"/>	Si	205.8130	I	1.07	15

Fenster Element/Linie auswählen

Das Tabellenblatt **Favoriten** enthält eine Vorauswahl Linien mit den empfohlenen Anwendungen (Schlagwörtern). Bei Auswahl dieser Linien werden gleichzeitig optimierte Methodenparameter in die Methode übertragen. Eigene Linien können ebenfalls diesen Favoriten hinzugefügt werden (→ "Eigene Favoritenlinien definieren" S. 33.)

Das Tabellenblatt **Linien** beinhaltet alle wählbaren Linien mit folgenden Angaben:

Tabellenspalte	Beschreibung
Element	Element
Wellenl. [nm]	Analysewellenlänge
Typ	Atomisierungstyp: I Atomlinie II Ionenlinie
BEC(ax.)	Typischer BEC-Wert der Analytlinie. Der BEC-Wert (background equivalent concentration) ist die Konzentration des Analyten, die eine dem Untergrund äquivalente Intensität erzeugt. Ein kleinerer Wert entspricht damit einer höheren Empfindlichkeit. Die BEC-Werte wurden unter folgenden Bedingungen ermittelt: axiale Beobachtung, Leistung 1200 W, Plasmagasfluss 12 L/min, Hilfsgasfluss 0,5 L/min, Zerstäubergasfluss 0,6 L/min.
Rang	Rangordnung der Empfehlung der Analysenlinie. Die Empfehlung einer Analysenlinie hängt sowohl von der Empfindlichkeit als auch von den möglichen Störungen durch benachbarte Linien anderer Elemente ab. Je weiter vorn sich eine Linie in der Rangfolge befindet, desto besser sind Erfolgchancen, dass mit der Analysenlinie gute Ergebnisse erzielt werden.

Mit den Optionen **Element**, **Wellenlänge** oder **BEC** sortieren Sie die Linientabelle aufsteigend nach chemischen Symbol, Wellenlänge oder BEC.

Wird die Option **Auswahl wie Liste sortieren** aktiviert, werden die Linien in Sortierreihenfolge der Liste (**Sortieren nach**) in die Linientabelle der Methode eingefügt. Ist die Option deaktiviert, werden die Linien in der Reihenfolge der Markierung eingefügt.

Linien auswählen

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Methode / Linien** auf **[Anhängen]** oder **[Einfügen]**. Das Fenster **Element/Linie auswählen** erscheint.
- ▶ Klicken Sie im Periodensystem auf ein Elementsymbol (graue Schaltflächen sind wählbare Elemente). Damit werden nur die Linien des gewählten Elements in der Linientabelle / Favoritentabelle 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.
- ▶ Markieren Sie auf dem Tabellenblatt **Favoriten** die Linien entsprechend Ihrer Anwendung oder aktivieren Sie in der Tabelle **Linien** die Kontrollkästchen der gewünschten Linien.
- ▶ Wechseln Sie auf die Karte **Linieninterferenzen** und prüfen Sie die Linien auf bekannte Interferenzen.

Hinweis:

Wählen Sie während der Methodenerarbeitung mehrere Linien für jeden Analyten aus.

- ▶ Fahren Sie so fort, bis Sie für jeden Analyten die Linien ausgewählt haben. Verlassen Sie das Fenster mit [OK].
 - ✓ Die markierten Linien werden in das Fenster **Methode / Linien** übernommen.

Erweiterter Linienkatalog

Die Linienliste enthält nach der Installation eine Vorauswahl von Analysenlinien. Diese

kann durch Analysenlinien aus dem erweiterten Linienkatalog ergänzt werden.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Element/Linie auswählen / Elemente** auf **[Erweiterter Linienkatalog]**.
- ▶ Markieren Sie in der Liste per Mausclick die gewünschten Linien.
Mit einem erneuten Mausclick auf eine einzelne Linie entfernen Sie die Markierung.
Mit **[Auswahl aufheben]** entfernen Sie alle Markierungen.
- ▶ Übertragen Sie mit einem Klick auf **[Zur Linienliste hinzufügen]** die Auswahl in die Linienliste.

Hinweis

Die aus dem erweiterten Linienkatalog hinzugefügten Linien können nicht aus dem Standardkatalog entfernt werden.

Eigene Analysenlinien anlegen und editieren

In ASpect PQ können Sie eigene Analysenlinien anlegen:

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Element/Linie auswählen / Elemente** auf **[Eigene Linien]**.
- ▶ Geben Sie im Fenster **Linien editieren** die Daten für das **Element** und die **Wellenlänge** ein und wählen Sie im Listenfeld den **Typ**.
- ▶ Übertragen Sie die Eingaben mit **[Hinzufügen]** in die eigene Linienliste.
- ▶ Mit **[Schließen]** werden die eigenen Linien in die Linienliste übernommen.

Eigenen Linie können editiert und aus der Linienliste wieder entfernt werden.

- ▶ Um eine Linie in der eigenen Liste zu editieren, markieren Sie die Linie mit Mausclick in der Liste des Fensters **Linie editieren**.
Geben Sie die neuen Liniendaten ein und klicken Sie anschließend auf **[Ändern]**.
- ▶ Einen markierten Eintrag in der Liste entfernen Sie mit einem Klick auf **[Löschen]**.

3.2.1.2 Linien simultan messen

Beim Zusammenfassen von Linien werden im aktuellen Messprogramm Linien gesucht, die gemeinsam mit einer Monochromatoreinstellung vom Detektor aufgenommen und so auch simultan gemessen werden können.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Methode/Linien** auf **[Mehrlinienauswertung]**.
Das gleichnamige Fenster erscheint.

Mehrlinienauswertung

Hauptlinie		Zusätzliche Linie		Messwellenl.	Status
Linie	Wellenl. [nm]	Linie	Wellenl. [nm]	[nm]	
<input checked="" type="checkbox"/> P178.224	178.2240	I178.218	178.2180	178.2210	OK
<input checked="" type="checkbox"/> S182.565	182.5650	B182.581	182.5810	182.5730	OK
<input checked="" type="checkbox"/> Ge265.157	265.1568	Ge265.117	265.1172	265.1606	OK
<input checked="" type="checkbox"/> Ge265.157	265.1568	Hg265.204	265.2040	265.1606	OK

Keine Linien zusammenfassen Priorität der Linien vertauschen

178.021 178.2210(MP) 178.661

I178.218
P178.224(Hauptl.)

Linienpositionen auf CCD [nm] Alle Linienpositionen anzeigen

OK Abbrechen

Fenster Linien zusammenfassen mit Linienkombinationen

Im Fenster **Mehrlinienauswertung** werden die möglichen Linienkombinationen aufgelistet. Eine Grafik zeigt die Lage der Linien auf dem Detektor für die ausgewählte Listenzeile.


Tabelleneigenschaften

Tabellenspalte	Inhalt
Kontrollkästchen	Wenn aktiviert, wird die betreffende Linienkombination in der Methode simultan gemessen.
Hauptlinie	Linie Linienbezeichnung der Messlinie Wellenl. [nm] Wellenlänge in nm der Messlinie
Zusätzliche Linie	Linie Linienbezeichnung der zusätzlich zu analysierenden Linie Wellenl. [nm] Wellenlänge in nm der zusätzlich zu analysierenden Linie
Messwellenl. [nm]	Messwellenlänge in nm (Mittelpunkt der Detektorzeile)
Status	Bemerkungen
[Keine Linien zusammenfassen]	Alle Markierungen löschen. Es werden keine Linien in der Methode zusammen gemessen.
[Priorität der Linien vertauschen]	Vertauscht in einer Linienkombination die Hauptlinie und die zusätzliche Linie.

Für eine Linienkombination wird automatisch eine Hauptlinie und die zusätzliche Linie bestimmt. Die zusätzlichen Linien übernehmen die Analysenzeit und die Plasmaparameter von der Hauptlinie. Mit **[Priorität der Linien vertauschen]** kann diese Zuordnung umgekehrt werden.

3.2.1.3 Eigene Favoritenlinien definieren


Bevorzugte Analysenlinien können Sie einer Favoritenliste mit Hinweisen zur bevorzugten Applikation hinzufügen. Die Angaben zur Analysenlinie werden mit allen linienrelevanten Methodenparametern unter diesem Eintrag gespeichert. Die Favoritenliste steht Ihnen bei jeder Auswahl von Elementlinien zur Verfügung.

- ▶ Markieren Sie die Linie in der Tabelle des Fensters **Methode | Linien** und klicken Sie auf .
- ▶ Editieren Sie im Fenster **Zu Favoriten hinzufügen** die Linienbezeichnung.
- ▶ Im Feld **Kommentar** können Sie weitere Notizen zur Linie eintragen.
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Schlagwörter** eine oder mehrere Applikationen aus. Die Schlagwortliste können Sie durch eigene Einträge ergänzen. Vordefinierte Schlagwörter sind blau gekennzeichnet.

Die Linie steht danach im Fenster **Element/Linie auswählen** zur Verfügung.

3.2.1.4 Interne Standards zuweisen

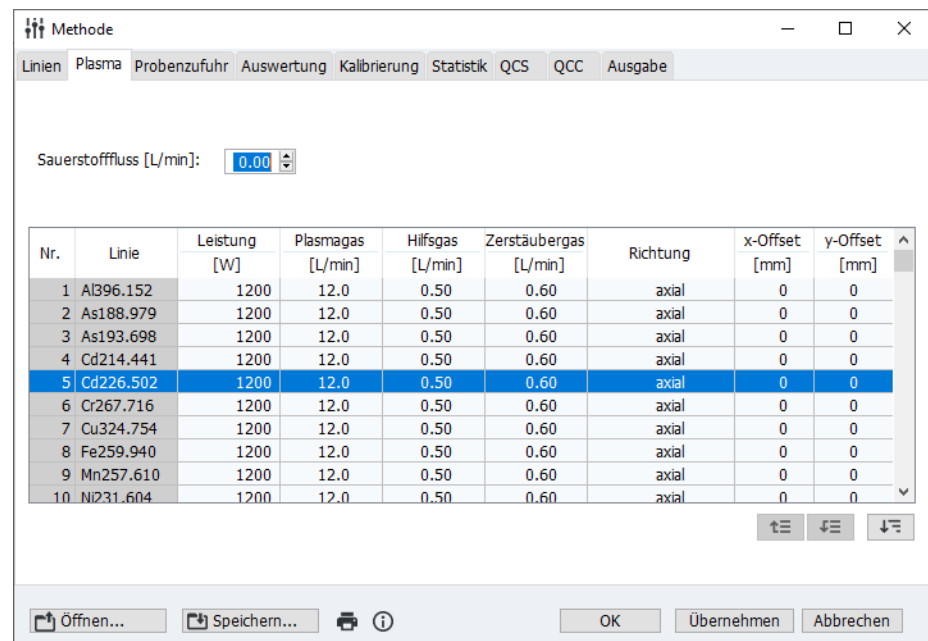
Interne Standards dienen hauptsächlich dazu, nichtspektrale Störungen, die z. B. auf Probentransportstörungen beruhen, zu korrigieren.

- ▶ Fügen Sie die Analysenlinie, die Sie als internen Standard verwenden wollen, in die Linientabelle ein und wählen Sie in der Tabellenspalte **Typ** die Option **Int. Std.**
- ▶ Klicken Sie auf **[Interne Std. zuweisen]**. Das Fenster **Interne Std. zuweisen** erscheint.
- ▶ Jeder Analysenlinie können Sie jetzt in der Tabelle einen internen Standard zuordnen.
- ▶ Mit einem Klick  übertragen Sie die Einstellungen für eine Analysenlinie auf alle in der Tabelle folgenden Linien.
- ▶ Mit [OK] werden die Einstellungen in die Methode übernommen.



Fenster Interne Std. zuweisen

3.2.2 Parameter für Plasma und Transferoptik einstellen – Karte Plasma



Fenster Methode / Plasma

Tabellenparameter

Tabellenspalte	Beschreibung
Nr.	Reihenfolge der ausgewählten Linien in der Tabelle
Linie	Bezeichnung der Analysenlinie Die Bezeichnung wird auf der Registerkarte Linien spezifiziert.
Leistung [W]	Effektive Plasmaleistung Eine Erhöhung der Plasmaleistung verbessert die Stabilität des Plasmas, z. B. bei organischen Lösungsmitteln oder stark salzhaltigen Proben als Messlösung. Gleichzeitig erfordert eine größere Plasmaleistung auch einen höheren Plasmagasstrom, um das Schmelzen oder Beschädigungen der Torch zu verhindern.
Plasmagas [L/min]	Plasmagasstrom Das Plasmagas fließt zwischen äußerem und innerem Quarzrohr der Torch. Es wird durch die Induktion der Spule in den Plasmazustand versetzt und kühlt gleichzeitig das äußere Rohr der Torch. Eine höherer Plasmagasstrom kann die Lebensdauer der Torch verbessern.
Hilfsgas [L/min]	Hilfsgasstrom Das Hilfsgas strömt zwischen innerem Quarzrohr und Injektor. Es unterstützt die Ausbildung des Messkanals und drückt das Plasma weg von der Injektorspitze. Ein höherer Hilfsgasstrom wird z. B. bei Messlösungen mit organischen Lösungsmitteln oder höheren Salzkonzentrationen benötigt.
Zerstäubergas [L/min]	Zerstäubergasstrom Das Zerstäubergas wird am Zerstäuber zugeführt. Es zerstäubt die Probe und trägt sie durch Zerstäuberkammer und Injektor in das Plasma.

Richtung	<p>Beobachtungsrichtung des Plasmas</p> <p>Mit der Transferoptik kann die Emissionsstrahlung aus dem Plasma aus zwei Richtungen in das Spektrometer eingekoppelt werden. Je nach Analytlinie kann die optimale Beobachtungsrichtung gewählt werden.</p> <p>radial Die Beobachtung des Plasmas erfolgt von der Seite auf einer bestimmten Höhe über der Spulenoberkante.</p> <p>axial Die Beobachtung erfolgt von oben entlang der Längsachse des Plasmas.</p> <p>Beide Beobachtungsrichtungen können auch abgeschwächt werden. Dadurch wird bei hohen Intensitäten ein Überlauf des Detektors vermieden und der analytische Bereich vergrößert.</p>
x-Offset [mm] und y-Offset [mm]	<p>Korrektur der Transferoptik</p> <p>Durch das Verschieben der Optik entlang des Messkanals (bei radialer Beobachtung) und aus dem Zentrum des Messkanals (bei radialer und axialer Beobachtung) können unterschiedlich heiße Bereiche gescannt und so die optimale Emissionstemperatur der Analysenlinie erfasst werden.</p> <p>Sie können das Optimum für eine Linie im Fenster Plasma automatisch bestimmen lassen (→ "Justierung und Optimierung des Plasmas" S. 118).</p>

 Hinweis

Während der ersten Phase der Methodenentwicklung (Auswahl der geeigneten Linien) sind die voreingestellten Plasma-Parameter ausreichend. Die Änderung dieser Parameter kann nach der Festlegung der Analysenlinien, der nötigen Untergrundkorrekturen und der Bestimmung des Linearitätsbereiches erfolgen, um die Methodenparameter noch weiter zu optimieren.

Sauerstoff verwenden

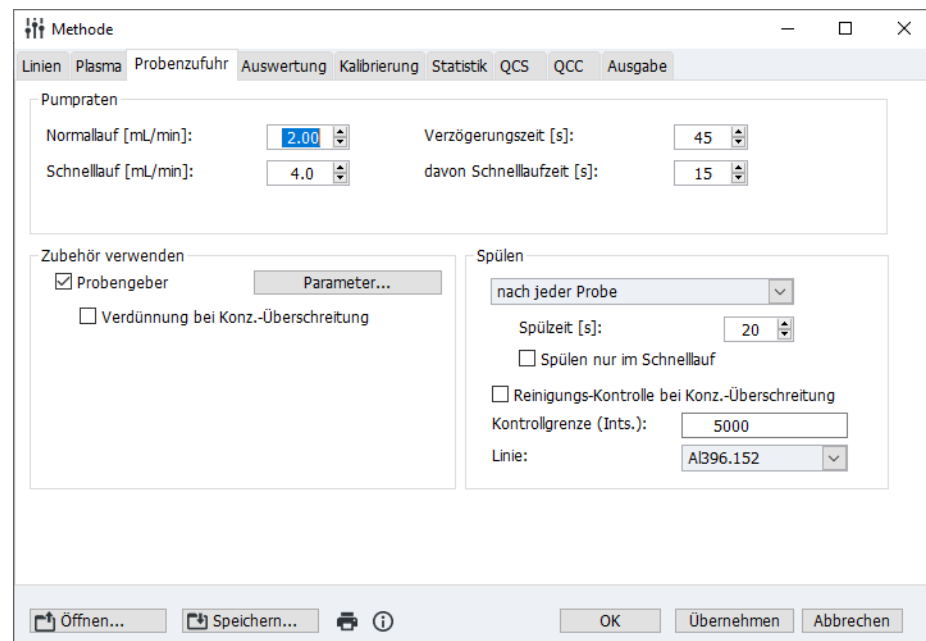
Für spezielle Applikationen, z. B. organische Matrices, kann als Zusatzgas Sauerstoff zum Einsatz kommen.

- ▶ Stellen Sie im Feld **Sauerstofffluss** den Gasfluss ein.

3.2.3 Einstellungen zum Probentransport – Karte Probenzufuhr

Auf der Karte **Probenezufuhr** nehmen Sie für das Analysengeräte folgende Einstellungen vor:

- Pumpraten der Pumpe am Analysengerät
- Verwendung des Probengebers
- Spüloptionen



Fenster Methode / Probenzufuhr

Pumpraten einstellen

Option	Beschreibung
Normallauf [mL/min]	Normale Pumpgeschwindigkeit, mit der die Probe während der Analyse transportiert wird. Diese Geschwindigkeit sollte eine optimale Zerstäubung der Probe gewährleisten und sich an der empfohlenen Pumprate des verwendeten Zerstäubers orientieren.
Schnellauf [mL/min]	Erhöhte Geschwindigkeit, mit der zwischen den Messpausen gespült (mit Spülflüssigkeit) und die Probe bis zum Zerstäuber transportiert werden kann. Mit Einschalten dieser Geschwindigkeit wird die Transportzeit optimiert. Die Geschwindigkeit darf jedoch nicht während der Messzeit genutzt werden, da die homogene Zerstäubung der Probe nicht mehr gewährleistet ist.
Verzögerungszeit [s]	Zeit vom Beginn des Ansaugens der Probe bis zum tatsächlichen Messstart. Diese Zeit wird benötigt, um den gesamten Probenweg bis einschließlich Torch mit der Probe zu spülen und eine stabile Atomisierung zu gewährleisten. Hinweis: Die Verzögerungszeit beinhaltet auch die im Feld davon Schnellaufzeit [s] eingestellte Zeit.
davon Schnellaufzeit [s]	Zeit, mit der die Probe während des Ablaufs der Verzögerungszeit mit hoher Pumprate transportiert wird.

i Hinweis

Im Fenster **Methode / Probenzufuhr** stellen Sie die Pumpraten der Schlauchpumpe des ICP-OES Gerätes ein. Die Pumprate am Probengeber zur Förderung der Spülflüssigkeit regulieren Sie mit dem Drehknopf über der Pumpe am Probengeber bzw. bei den Cetac-Samplern im Fenster **Probengeber / Technische Parameter**.

Probengeber verwenden

Wird für die Analyse ein Probengeber verwendet, aktivieren Sie die Option **Probengeber**. Über **[Parameter]** gelangen Sie zu den Einstellungen des Probengebers.

Spülen

Während der Abarbeitung einer Sequenz können Sie Spülschritte nach jeder Probenmessung einstellen. Die Spülflüssigkeit wird bei der automatischen Messung aus dem Spülgefäß des Probengebers entnommen. Bei der manuellen Messung erfolgt eine Aufforderung, die Spülflüssigkeit bereitzustellen.

- ▶ Wählen Sie in der Gruppe **Spülen** im Listenfeld die Option **nach jeder Probe**, wenn Sie den Probenweg während der Sequenz spülen möchten.
- ▶ Stellen Sie im Eingabefeld **Spülzeit** die Spüldauer in Sekunden ein.
- ▶ Wenn der gesamte Spülschritt nur im Schnelllauf erfolgen soll, aktivieren Sie die Option **Spülen nur im Schnelllauf**. Wenn die Option deaktiviert ist, erfolgt die Spülung zunächst im Schnelllauf über die eingegebene Schnelllaufzeit (**davon Schnelllaufzeit**) und für den Rest der Spülzeit im Normallauf.
- ▶ Wählen Sie die Option **aus**, wenn keine Spülung erfolgen soll.

Reinigungskontrolle

Werden Proben analysiert, die zu einer Überschreitung des Arbeitsbereichs der Kalibrierkurve um mehr als 10 % führen, können der Probenweg und die Torch gespült werden, um Kontaminationen aus der vorangegangenen Messung zu entfernen. Während der Spülung wird zur Kontrolle des Reinigungsergebnisses die Intensität gemessen und so lange gespült, bis die Kontrollgrenze erreicht ist. Die automatische Reinigungskontrolle wird nach der Messung von hochkonzentrierten Proben empfohlen.

Option	Beschreibung
Reinigungs-Kontrolle	Wenn aktiviert, erfolgt automatisch bei Konzentrationsüberschreitungen eine kontrollierte Reinigung.
Kontrollgrenze	Wert des Signalpegels, der während der Spülung erreicht werden muss, bevor die nächste Lösung gemessen wird.
Linie	Elementlinie, die als Kontrolllinie herangezogen wird

3.2.4 Peaks auswerten – Karte Auswertung

Nr.	Linie	Bereich [nm]	Peakausw.	Poly.grd.	Korrektur	Anpassung	UGK-Pixelpos.
		unt.	ob.				
1	Al396.152	-0.22	0.22	3 Pixel	auto	aus	dynamisch -15,15
2	As188.979	-0.12	0.12	3 Pixel	auto	aus	dynamisch -15,15
3	As193.698	-0.12	0.12	3 Pixel	auto	aus	dynamisch -15,15
4	Cd214.441	-0.13	0.13	3 Pixel	auto	aus	dynamisch -15,15
5	Cd226.502	-0.13	0.13	3 Pixel	auto	aus	dynamisch -15,15
6	Cr267.716	-0.16	0.16	3 Pixel	auto	aus	dynamisch -15,15
7	Cu324.754	-0.19	0.19	3 Pixel	auto	aus	dynamisch -15,15
8	Fe259.940	-0.15	0.15	3 Pixel	auto	aus	dynamisch -15,15
9	Mn257.610	-0.15	0.15	3 Pixel	auto	aus	dynamisch -15,15
10	Ni231.604	-0.14	0.14	3 Pixel	auto	aus	dynamisch -15,15

Spektrale Korrekturen... (keine)

IEC-Faktoren... (keine)

Öffnen... Speichern... OK Übernehmen Abbrechen

Fenster Methode / Auswertung



Hinweis

In der Methodenentwicklung ermitteln Sie die optimalen Einstellungen zur Untergrundkorrektur der jeweiligen Analyselinie im Fenster **Spektren bearbeiten / Analyse** und übertragen Sie dann in die Methode (→ "Peak auswerten und Untergrundkorrektur bestimmen – Karte" S. 91).

Parameter der Tabelle
Auswertung

Tabellenspalte	Beschreibung	
Nr.	Reihenfolge der ausgewählten Linien in der Tabelle	
Linie	Bezeichnung der Analyselinie Die Bezeichnung wird auf der Registerkarte Linien spezifiziert.	
Bereich	unt.	untere Grenze des Wellenlängenbereichs für die Spektrenauswertung relativ zur Messwellenlänge
	ob.	obere Grenze des Wellenlängenbereichs relativ zur Messwellenlänge
Poly.grd.	Auswahl des Polynomgrades der Regressionskurve bei statischer Untergrundkorrektur Zur Auswahl stehen Polynomgrade 0., 1., 2. und 3. Ordnung oder eine automatische Suche des Polynomgrades (Option auto).	
Peakauswertung	Auswahl der Peakauswertung	
	1-19 Pixel	Anzahl Pixel, die zur Auswertung der Intensität herangezogen und aus denen schließlich die Messwerte gebildet werden. Die Intensitäten der Auswertepixel werden summiert. Auf diese Weise können Analysenungenauigkeiten durch Schwankungen der Peakposition verringert werden. Empfohlene Anzahl Auswahlpixel: 3
	Höhe	Interpolation des Peakmaximums
	Benutzerdef.	Freie Auswahl der Auswertungspixel, z. B. für die Auswertung von Multipletts. Eingabebeispiel: 50,120-130 bildet die Summe über die Messwerte der Pixel 50 und 120 bis 130.
Korrektur	Algorithmus für die spektrale Korrektur (siehe unten).	
	aus	Keine spektrale Korrektur vornehmen
	LSM	Spektrale Korrektur mit Methode der kleinsten Quadrate
	IEC	Spektrale Korrektur mit Interelementkorrektur (Inter Element Correction)
Anpassung	Pixel für die Untergrundkorrektur anpassen	
	dynamisch	Die Pixel für die Untergrundkorrektur werden automatisch durch die Software gefunden.
	statisch	Die Pixel für die Untergrundkorrektur werden durch den Nutzer in der Spalte UGK-Pixelpos. vorgegeben.
UGK-Pixelpos.	Lage der Pixel relativ zum Messpixel bei statischer Anpassung der Untergrundkorrektur Geben Sie die Pixelnummern für die Untergrundkorrektur ein.	

Schaltflächen

Schaltfläche	Beschreibung
[Spektrale Korrekturen]	Analysenlinien ein Modell für die spektrale Korrektur zuweisen.
[IEC-Faktoren]	Analysenlinien eine Interelementkorrektur zuweisen.

3.2.4.1 Spektrale Korrekturen mit Methode der kleinsten Quadrate

Mit spektralen Korrekturen können strukturierte Untergrundemissionen, die z. B. durch die Überlagerung der Analysenlinie durch Linien der Matrixelemente verursacht werden, rechnerisch beseitigt werden. Voraussetzung ist, dass für die betreffende Analysenlinie die möglichen Störspektren in einem Korrekturmodell zusammengefasst wurden (→ "Spektrale Störungen beseitigen – Karte **Spektrale Korrekturen**" S. 93).

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Methode / Auswertung** auf **[Spektrale Korrekturen]** und stellen Sie für jede Linie separat das geeignete Korrekturmodell ein.
 - ✓ Linien, für die ein Korrekturmodell zugewiesen ist, werden in der Spalte **Korrektur** mit LSM gekennzeichnet.

3.2.4.2 Interelementkorrektur

Mit der Interelementkorrektur können direkte Linienüberlagerungen korrigiert werden. Voraussetzung dafür ist eine weitere, ungestörte Wellenlänge des Interferenten.

Mit einer Einzelelementlösung (IEC-Lösung) wird das Verhältnis der beiden Linien des Interferenten (überlagerte Analysenlinie und ungestörte Linie) ermittelt. Der Quotient (IEC-Faktor) wird bei den nachfolgenden Probenmessungen verwendet, um die scheinbare Intensität oder Konzentration des Interferenten auf der Analytlinie zu subtrahieren.

Fenster IEC-Elemente zuweisen

Fenster IEC-Elemente zuweisen

Bedienelement	Erläuterung
[IEC-Lösungen]	Eingabe von Bezeichnung, Konzentration, Einheit und Probengeberposition der für die Interelementkorrektur verwendeten IEC-Elementlösungen und –Blindwerte
[Anhängen]	Neue Zeile am Ende der Liste anhängen
[Einfügen]	Neue Zeile am markierten Listenplatz einfügen

[Löschen]	Markierte Zeile löschen
Interelementkorrektur basiert auf	Intensitäten Korrektur erfolgt durch Subtraktion der Intensitäten.
	Konzentration Korrektur erfolgt durch Subtraktion der scheinbaren Konzentrationen.
[Faktoren aus Ergebnissen extrahieren]	Berechnete IEC-Faktoren aus einer geladenen Ergebnisdatei extrahieren

Tabellenspalte	Beschreibung
Analytlinie	Bezeichnung der gestörten Analyselinie
Interferent	Bezeichnung der Störlinie
IEC-Lösung	Bezeichnung der Einzelementlösung, die den Interferenten enthält. IEC-Lösungen werden über die Schaltfläche [IEC-Lösungen] spezifiziert.
IEC-Blindwert	Bezeichnung der Blindwertlösung, die von der Intensität bzw. Konzentration des Interferenten subtrahiert wird. Blindwertlösungen werden über die Schaltfläche [IEC-Lösungen] spezifiziert.
IEC-Faktor	IEC-Korrekturfaktor Berechnete Faktoren sind grau unterlegt.
manuell	Wenn aktiviert, kann ein IEC-Faktor manuell eingegeben werden. Es werden keine Messlösungen benötigt.

Interelementkorrektur zuweisen

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Methode / Auswertung** auf **[IEC-Faktoren]**.
Es erscheint das Fenster **IEC-Elemente zuweisen**.
- ▶ Spezifizieren Sie zunächst die IEC-Lösungen. Sie benötigen für jeden Interferenten einen Blindwert und eine IEC-Lösung (Einzelementlösung).
 - Klicken Sie auf **[IEC-Lösungen]**.
 - Fügen Sie der Tabelle im Fenster **IEC-Lösungen spezifizieren** für jeden Interferenten jeweils einen Blindwert und eine IEC-Lösung mit einem Klick auf **[IEC-Blindwert hinzufügen]** und **[IEC-Lösung hinzufügen]** ein.
 - Geben Sie in den entsprechenden Tabellenzellen jeweils einen Namen für die Lösungen ein.
 - Für die IEC-Lösungen geben Sie in der Spalte **Konzentration** jeweils die Konzentration des Interferenten in der IEC-Lösung ein.
 - Bestätigen Sie die Eingaben mit **[OK]**.

IEC-Lösungen spezifizieren

Typ	Name	Konz.	Einheit	Pos
IEC-Blindwert1	CR-IEC-Blindwert-Al	0	mg/L	1
IEC-Lösung1	Cr-IEC-Lösung-Al	1	mg/L	1

IEC-Blindwert hinzufügen IEC-Lösung hinzufügen Löschen

OK Abbrechen

Fenster IEC-Lösungen spezifizieren mit den einem IEC-Blindwert und einer IEC-Lösung

- ▶ Zurück im Fenster **IEC-Elemente zuweisen** wählen Sie in der Tabellenspalte **Analytlinie** die gestörte Linie des Analyten.
- ▶ Wählen Sie in der Spalte **Interferent** die ungestörte Linie des Interferenten.
- ▶ Stellen Sie in den Spalten **IEC-Lösung** und **IEC Blindwert** die dazugehörige Einzelelementlösung und die Blindwertlösung ein.
- ▶ Wählen Sie die Art der **Interelementkorrektur**, entweder beruhend auf **Intensitäten** oder **scheinbaren Konzentrationen**.
- ▶ Bestätigen Sie die Eingaben mit **[OK]**.
 - ✓ Linien, denen eine Interelementkorrektur zugewiesen ist, werden in der Linientabelle des Fensters **Methode / Auswertung** in der Spalte **Korrektur** mit IEC gekennzeichnet.

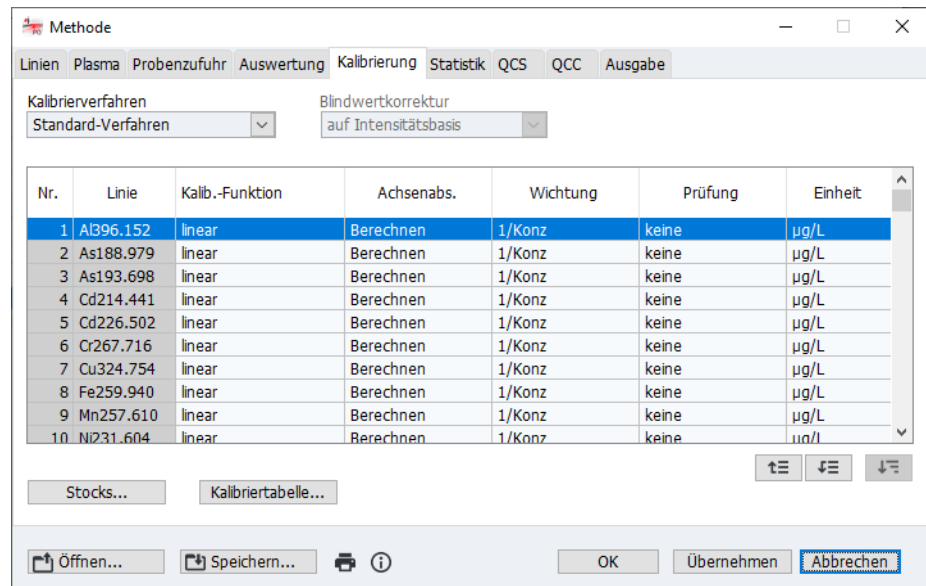
Die Messung der IEC-Lösungen muss in der Sequenz nach der Messung der Kalibrierstandards bzw. Berechnung der Kalibrierung erfolgen.

Statt die Faktoren für die Interelementkorrektur mit der Messung der Einzelelementlösung zu bestimmen, können bekannte Faktoren direkt in die Tabelle eingetragen werden:

- ▶ Nach Eingabe der **Analytlinie** und des **Interferenten** aktivieren Sie das Kontrollkästchen **manuell**.
- ▶ Tragen Sie in der Spalte **IEC-Faktor** den bereits ermittelten Faktor ein.

3.2.5 Kalibrierparameter eingeben – Karte Kalib.

Im Fenster **Methode / Kalib.** erfolgt die Auswahl der Art der Kalibrierung und der Blindwertkorrektur. Im Allgemeinen werden dafür Mehrelementstandards verwendet.



Fenster Methode / Kalib. mit Einstellungen für eine Kalibrierung mit Standardverfahren

Kalibrierverfahren auswählen

Wählen Sie in der Liste **Kalibrierverfahren** das Verfahren aus:

Kalibrierverfahren	Beschreibung
Keine Kalibrierung	Die Probenergebnisse werden ausschließlich als Intensität ausgegeben. Eine Kalibrierung ist für diese Messungen nicht erforderlich.
Standard-Verfahren	Die Kalibrierung erfolgt mit Proben, die den Analyten in bekannter Konzentration enthalten (Standards). Die Proben unbekannter Konzentration werden gegen diese Kalibrierung gemessen.
Standard-Additionsverfahren	Die unbekannte Probe wird mit unterschiedlichen Konzentrationen eines Standards aufgestockt und gemessen. Als Ergebnis einer Ausgleichung ergibt sich die Konzentration des Analyten in der Probe.
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.

Blindwertkorrekturen vereinbaren

Standard-Additionsverfahren und Additions-Kalibrieren erfordern eine Blindwertkorrektur. Wählen Sie in der Liste **Blindwertkorrektur** das Verfahren:

Korrektur	Beschreibung
Auf Intensitätsbasis	Bei jeder Standardaddition wird der Blindwert mitgemessen und der gemessene Intensitätswert vor der Berechnung der Ausgleichsgeraden von allen Messwerten subtrahiert. Dieses Verfahren war lange Zeit üblich, führt aber bei vielen Realproben zu fehlerhaften Ergebnissen.
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 (Konz. 2) subtrahiert.

Herstellung der Standards


Option	Beschreibung
Manuell hergestellt	Die Kalibrierstandardlösungen werden manuell bereitgestellt.
Durch Verdünnungssystem	Nur bei Verwendung des Probengebers Cetac SDXHPLD mit automatischer Verdünnungsfunktion Die Herstellung der Standards erfolgt durch Verdünnung eines Stocks im Vortexer (Mischgefäß) des Probengebers.

Linien-spezifische Kalibrierparameter

Die linien-spezifischen Parameter werden in der Tabelle eingestellt:

Tabellenspalte	Beschreibung
Nr.	Reihenfolge der ausgewählten Linien in der Tabelle
Linie	Bezeichnung der Analyselinie Die Bezeichnung wird auf der Registerkarte Linien spezifiziert.
Kalib.-funktion	Nur für Kalibrierung nach Standardverfahren linear Linearer Verlauf der Kalibrierfunktion $y = a + bx$ nichtlinear ratio. Nichtlinearer Verlauf der Kalibrierfunktion beschrieben durch eine gebrochenrationale Funktion $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$ nichtlinear quadr. Nichtlinearer Verlauf der Kalibrierfunktion beschrieben durch eine quadratische Funktion $y = a + bx + cx^2$ automatisch Für die Kalibrierung wird 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/Analysenablauf gewählt (→ "Optionen zum Analysenablauf" S. 150). Als Standardeinstellung ist hier die gebrochenrationale Funktion vorgesehen. Hinweis: Für das Standardadditionsverfahren und die Additions-Kalibrierung sind nur lineare Kurvenverläufe zugelassen.
Achsenabschnitt	Null setzen Die Kalibrierkurve wird exakt durch den gemessenen Nullwert-Punkt gelegt. Berechnen Der Nullwert wird wie jeder andere Kalibrierpunkt in die Berechnung einbezogen.

Wichtung	<p>keine</p> <p>1/Konz</p> <p>1/SD</p> <p>1/(SD*Konz)</p>	<p>Alle Kalibrierpunkte gleich berücksichtigen.</p> <p>Kalibrierpunkte mit kleineren Konzentrationen stärker berücksichtigen.</p> <p>Punkte mit geringeren Abweichungen innerhalb der mehrfach wiederholten Messungen eines Standards stärker berücksichtigen (Voraussetzung: Mittelwert-Statistik aktiviert).</p> <p>Kombination aus den Berechnungsverfahren 1/Konz und 1/SD.</p>
Prüfung	<p>ASpect PQ ermöglicht eine automatische Überprüfung von ermittelten Kalibrierkurven anhand eines Prognosebandes, das auf der Basis einer manuell gewählten statistischen Sicherheit berechnet wird.</p> <p>keine</p> <p>Ausreißer elim.</p>	<p>Alle gemessenen und nicht gelöschten Kalibrierpunkte werden zur Kurvenberechnung genutzt. Kalibrierpunkte werden weder gekennzeichnet noch eliminiert.</p> <p>Liegen Kalibrierpunkte außerhalb des berechneten Prognosebandes, 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 lange 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 blau gekennzeichnet.
Einheit	Einheiten für die Konzentration für jedes Element separat eingeben.	

Mit  übernehmen Sie den Wert der aktuellen Zelle in alle nachfolgenden Zellen der Tabellenspalte. Mit der Schaltfläche **[Kalibriertabelle]** öffnen Sie die Tabelle zur Eingabe der Standardkonzentration.

3.2.5.1 Stockstandards spezifizieren

Verwenden Sie Stockstandards, so können Sie statt der Konzentrationen jeweils die Verdünnungsfaktoren für die einzelnen Standards eingeben. Dafür müssen Sie die Stockstandards vor Ausfüllen der Kalibriertabelle spezifizieren, wobei mehrere Stocks mit verschiedenen Elementen und Konzentrationen verwendet werden können.

- ▶ Öffnen Sie im Fenster **Methode / Kalib** mit **[Stocks]** das Fenster **Stock-Standards**.
- ▶ Fügen Sie mit **[Neu]** oder **[Einfügen]** eine neue Zeile in die Stock-Liste ein.
Max. Anzahl Stockstandards: 20
- ▶ Bei der Option **Aus Stock-Datenbank** wählen Sie in der Liste die Bezeichnung des Stocks. Die Stock-Datenbank wird im Fenster **Datenbank** verwaltet (→ "Datenbanken für Stocks und QC-Proben" S. 143).
- ▶ Wählen Sie die Option **Manuell eingeben**, wenn Sie keinen Stock aus der Datenbank verwenden.

Zurück im Fenster **Stock-Standards** tragen Sie die Daten des Stocks direkt in die Tabelle ein:

Tabellenspalte	Beschreibung
Name	Name des Standards
Element und Konzentration	<p>Elemente und dazugehörige Konzentrationen des Standards Mit [Konzentrationen...] öffnen Sie ein Liste zur Eingabe der Konzentrationen.</p> <p>Alternativ geben Sie die Werte in folgendem Eingabeformat direkt in die Zeile im Format <i>Elementsymbol-Leerzeichen-Konzentration</i> ein, z. B. Nickel mit einer Konzentration von 0,5 mg/L: Ni 0.5 Weitere Elemente und ihre Konzentrationen werden einfach durch Semikolon getrennt angefügt. Ein Beispiel für das Eingabeformat ist unter der Stock-Liste aufgeführt.</p>
Einheit	Konzentrationseinheit der Elemente im Standard

3.2.5.2 Kalibriertabelle eingeben

Die Standarddaten geben Sie in der Kalibriertabelle ein.

Kalibriertabelle

Anzahl der Standards:

Kalibrier-Null-Standards:

Kalibrier-Standards:

Name	Einheit	Kal.-Null1	Kal.-Std.1	Kal.-Std.2	Kal.-Std.3	Kal.-Std.4	Kal.-Std.5
Position		101	102	103	104	105	106
Stock							
Verd.faktor							
Recal.							
Al396.152	µg/L	0	1	5	10	50	200
As188.979	µg/L	0	1	5	10	50	
As193.698	µg/L	0	1	5	10	50	
Cd214.441	µg/L	0	1	5	10	50	
Cd226.502	µg/L	0	1	5	10	50	
Cr267.716	µg/L	0	1	5	10	50	
Cu324.754	µg/L	0	1	5	10	50	200
Fe259.940	µg/L	0	1	5	10	50	200
Mn257.610	µg/L	0	1	5	10	50	

Markierte Spalte verschieben

inc.

OK

Fenster Kalibriertabelle

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Methode / Kalib.** auf **[Kalibriertabelle]**.
- ▶ Geben Sie in den Eingabefeldern zunächst die Anzahl Standards ein. In Abhängigkeit zum gewählten Kalibrierverfahren sind verschiedene Standards zu wählen.

Beim Standardverfahren sind die Anzahl der **Kalibrier-Standards** und **Kalibrier-Null-Standards** einzugeben. Es können dabei 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.

Für das **Standard-Additions-Verfahren** und das **Additions-Kalibrieren** muss jeweils die Anzahl **Add.-Standards** eingegeben werden.

- ▶ Für die Herstellung der Standards durch ein angeschlossenes Verdünnungssystem müssen Sie für jeden Kalibrierstandard in der Zeile **Stock** den verwendeten Stockstandard und der Zeile **Verd.faktor** den Verdünnungsfaktor wählen (→ "Stockstandards spezifizieren" S. 45).
Für die Verdünnung können folgende Faktoren gewählt werden: 1, 2, 5, 10, 15, 20, 25, 50, 75, 100, 200, 250, 500, 1000, 1500, 2000, 2500, 5000. Die Anzahl der Verdünnungsfaktoren wird entsprechend den Bereichseinstellungen im Fenster **Probengeber / Verdünnung** eingeschränkt (→ "Verdünnungsfunktion" S. 126). Für die Verdünnungsfaktoren 1 ... 100 erfolgt die Verdünnung einstufig, bei höheren Werten zweistufig.
- ▶ Wenn Sie die Kalibrierstandards manuell herstellen, können Sie die Konzentrationen der Kalibrierstandards ebenfalls durch Auswahl eines Stockstandards und Eingabe eines Verdünnungsfaktors berechnen lassen.
Alternativ geben Sie für jeden Standard in der Tabelle die Konzentration der einzelnen Elemente für jede Analyselinie ein.
- ▶ Bei manuell hergestellten Standards können Sie in der Zeile **Pos.** die Position der Standards im Probengeber festlegen.
Wird der Probengeber nicht verwendet, bleiben die Einträge in dieser Zeile unbe-

rücksichtigt.

Bei Probengeber mit Verdünnungsfunktion wird die Position des Stocks aus der Stock-Datenbank übernommen.

Die Belegung der Probengeberpositionen kann in der Sequenz eingegeben oder verändert werden.

- Für Rekalibrierungen, die als Sequenzaktion oder als Folge von QC-Aktionen spezifiziert wurden, müssen mindestens ein **Kalibrier-Null-Standard** und ein **Kalibrier-Standard** oder mindestens zwei **Kalibrier-Standards** in der Zeile **Recal.** ausgewählt werden. Werden mehr als zwei Rekalibrierstandards für eine Linie ausgewählt, dann wird jeweils der niedrigste und der höchste Rekalibrierstandard verwendet.

3.2.6 Statistische Auswertungen spezifizieren – Karte Statistik

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

Fenster Methode / Statistik

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 Wiederholmessungen

Option	Beschreibung
Wiederholungen/Probe	Anzahl Messwiederholungen je Probe
Wiederholungen/Kalib.-Probe	Anzahl Messwiederholungen je Kalibrierprobe
Wiederholungen/QC	Anzahl Messwiederholungen je QC-Messung (QC-Typen → "Qualitätskontrollproben für QC-Karten spezifizieren – Karte QCS" S. 49)
Pseudomessungen	Anzahl der Wiederholung von Pseudomessungen Pseudomessungen sind Messungen mit Probe, die vor der Statistikserie eingeschoben werden und nicht für die Berechnung des Ergebnisses herangezogen werden.

Grubbs-Ausreißertest

Für Mittelwert-Statistik mit mindestens 3 Messwiederholungen je Probe.

Status	Beschreibung
deaktiviert	Alle Werte der Statistikserie für die Berechnung des Mittelwerts heranziehen.
aktiviert	Ausreißer werden eliminiert und nicht zur Berechnung der Statistikgrößen herangezogen. Die so ermittelten Mittelwerte werden in der Ausgabetable mit "!" markiert.

Vertrauensbereichsberechnung

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

Einstellung	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** (wählbar zwischen 68,3 ... 99,9%) wird zur Berechnung des Vertrauensbereichs der Proben und der Prognosebänder der Kalibrierkurven benutzt.

3.2.7 Qualitätskontrollproben für QC-Karten spezifizieren – Karte QCS

Im Fenster **Methode / QCS** spezifizieren Sie die QC-Proben für die Qualitätskontrollkarten. Das System der QC-Kontrollkarten dient der Qualitätsüberwachung über einen längeren Zeitraum. Im Verlauf der Messung werden an vorbestimmten Stellen Kontrollmessungen mit Proben eingeschoben, die bekannte Messergebnisse liefern sollten. Dabei ist entweder der Absolutwert (Intensität oder Konzentration) oder die Konzentrationsdifferenz zur vorangegangenen Probe bekannt.

Die Ergebnisse der Kontrollmessungen werden auf sogenannten QC-Karten (auch Regelkarten oder Kontrollkarten) automatisch dokumentiert. Die Karten werden mit der Methode gespeichert und bei jeder weiteren Messung mit der Methode fortgeführt.

In einer Analyse können verschiedene Qualitätskontrollproben (QC-Proben) festgelegt werden. Die Eingaben zu den Konzentrationen dieser Proben sowie den Toleranzen nehmen Sie im Fenster **Methode / QCS** vor.

Nr.	Linie	Erw.Konz.-Zuw	Untere Abweich. [%]	Obere Abweich. [%]	QC-Karte	Reakt.!
1	Al396.152	9.5	10	10	-	-
2	As188.979	9.5	10	10	-	-
3	As193.698	9.5	10	10	-	-
4	Cd214.441	9.5	10	10	-	-
5	Cd226.502	9.5	10	10	-	-
6	Cr267.716	9.5	10	10	-	-
7	Cu324.754	9.5	10	10	-	-
8	Fe259.940	9.5	10	10	-	-
9	Mn257.610	9.5	10	10	-	-
10	Ni231.604	9.5	10	10	-	-

Fenster Methode / QCS

Elemente der Karte QCS

Elemente	Beschreibung
Typ	QC-Probentyp, deren Parameter (Fehlergrenzen und Verfahrensweisen) in der Linienliste angezeigt werden, auswählen. In der Liste können Sie eine der vereinbarten QC-Proben zur Ansicht und zum Editieren aufrufen.
Name	Name der angezeigten QC-Probe
Reaktion	Verfahrensweise auswählen, falls die Ergebnisse der QC-Probe die vereinbarten Fehlergrenzen über- bzw. unterschreiten.
[Neu/Ändern]	Neue QC-Probe definieren oder eine bereits vorhandene QC-Probe ändern.
[Löschen]	Angezeigte QC-Probe löschen.
Einheit	Angabe der Konzentrationseinheit

[Übersicht QC-Proben]	Eine Liste mit den linienspezifischen Parametern aller QC-Proben öffnen.
Tabelle	In der Tabelle werden die Parameter der im Listenfeld Typ ausgewählten QC-Probe angezeigt.

Parameter für QC-Proben eingeben

- ▶ Legen Sie mit **[Neu/Ändern]** einen neuen Parametersatz für einen QC-Probentyp an bzw. ändern Sie den aktuell angezeigten.
Es öffnet sich das Fenster **QC-Probentyp hinzufügen oder ändern**.
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** den Probentyp aus und vergeben Sie, falls Sie mehrere QC-Proben gleichen Typs definieren, im danebenstehenden Listenfeld eine Nummer (z. B. QC-Std.2). Folgende Probentypen stehen zur Verfügung:

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>Um einen gespeicherten Datensatz für die QC-Probe aus der Datenbank aufzurufen, aktivieren Sie die Option aus Datenbank und wählen Sie im danebenstehenden Listenfeld die betreffende QC-Probe aus (→ "Datenbanken für Stocks und QC-Proben verwalten" S. 143).</p> <p>Alternativ können Sie die Konzentrationen der QC-Probe direkt in die Tabelle im Fenster QCS eintragen. In diesem Fall aktivieren Sie die Option manuell eintragen.</p> <p>Max. Anzahl QC-Proben: 50</p>
QC-Std.	<p>Einen Standard als QC-Probe definieren.</p> <p>Als QC-Standard kann jeder in der Kalibriertabelle (Karte Kalib.) definierte Standard verwendet werden. Die Probengeber-Positionen werden aus der Kalibriertabelle übernommen.</p> <p>Die vergebene Nummer definiert auch gleichzeitig den verwendeten Kalibrierstandard, z. B. "QC-Std.2" – der zweite Kalibrierstandard wird als QC-Probe verwendet.</p> <p>Mögl. Anzahl QC-Standards = Anzahl Standards in der Kalibriertabelle (max. 65)</p>
QC-Blindwert	Die Blindprobe als QC-Probe definieren.
QC-Stock	<p>Eine aufgestockte Probe als QC-Probe definieren.</p> <p>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 wird die Konzentrationsdifferenz (Konz1 von Probe und QC-Stock-Probe) mit dem hier spezifizierten "Erwarteten Konzentrationszuwachs" verglichen und die Wiederfindungsrate berechnet.</p>

Stehen keine zertifizierten Kontrollproben zur Verfügung, 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. Zweckmäßigerweise sollten diese Kontrollproben am Anfang und Ende einer Probenreihe gemessen 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.

- In der Liste **Reaktion** wählen Sie die weitere Verfahrensweise bei Überschreitung der Fehlergrenze:

Für **QC-Probe**, **QC-Std.** und **QC-Stock**

Option	Beschreibung
nur markieren	Der gemessene Wert wird in der Probentabelle gekennzeichnet, das Messprogramm fährt mit der nächsten Probe fort.
rekalib. + fortsetzen	Es erfolgt eine Rekalibrierung. Anschließend wird die QC-Probe erneut 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 Kalibrierung. Anschließend wird die QC-Probe erneut 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 Rekalibrierung. Anschließend wird die QC-Probe erneut gemessen. Liegt die QC-Probe außerhalb des Bereichs wird das Messprogramm unterbrochen. Liegt sie im Bereich, werden alle Probe nach der letzten QC-Probe bzw. der letzten (Re-) Kalibrierung neu gemessen. Liegt die QC-Probe dann erneut außerhalb der Fehlergrenze, wird das Messprogramm unterbrochen.
kalib. + neu messen	Es erfolgt eine neue Kalibrierung. Anschließend wird die QC-Probe erneut 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-) Kalibrierung neu gemessen. Liegt die QC-Probe dann erneut außerhalb der Fehlergrenze, wird das Messprogramm unterbrochen.
nächste Methode	Das aktuelle Messprogramm wird abgebrochen und das Messprogramm der nächsten Methode gestartet, wenn die Sequenz eine weitere Methode enthält.
Stopp	Das aktuelle Messprogramm wird abgebrochen.

Für **QC-Blindwert** kann zwischen den oben beschriebenen Reaktionen **nur markieren**, **nächste Methode** und **Stopp** gewählt werden.

Für **QC-Stock** kann zwischen den oben beschriebenen Reaktionen **nur markieren**, **rekalib. + fortsetzen**, **kalib. + fortsetzen**, **nächste Methode** und **Stopp** gewählt werden.

Für **QC-Trend** und **QC-Matrix** ist keine Reaktion vorgesehen.

- Für **QC-Trend** und **QC-Matrix** ist optional eine Blindwertkorrektur vorgesehen. Aktivieren Sie zu diesem Zweck das Kontrollkästchen **Blindwert**.
- In der Liste definieren Sie in Abhängigkeit vom QC-Probentyp für jede Elementlinie die linienspezifischen Parameter:

Option	Beschreibung
Linie	Namen der Elementlinie
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 Wert entsprechend aufgestockter Menge und Konzentration der Aufstocklösung eingeben.
Erw. Intensität	Für QC-Blindwert Erwartete Intensität in QC-Blindwert
Unt.Bereich [%]	Unterer Bereich der Fehlergrenze in Prozent
Ob.Bereich [%]	Oberer Bereich der Fehlergrenze in Prozent
QC-Karte	Wenn mit "+" markiert, so wird das Ergebnis der Qualitätskontrolle für diese Linie auf der QC-Karte der Ergebnisliste ausgegeben.
Reakt.!	Wenn die Fehlerbereichsgrenze überschritten ist, so soll die in der Liste Reaktion ausgewählte Verfahrensweise zur Anwendung kommen. Sind mehrere Linien mit "+" markiert, so reicht es aus, dass für eine dieser Linien die Fehlergrenzen überschritten sind, um die Reaktion auszulösen (ODER-Logik).
Einheit	Einheit der erwarteten Konzentration (nur bei QC-Std.)

3.2.8 Qualitätskontrolle in der Sequenz spezifizieren – Karte QCC

Im Fenster **Methode / QCC** spezifizieren Sie die Parameter für die Qualitätskontrolle während einer Sequenz:

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

Sie können verschiedene Kontrollen mit verschiedenen Reaktionen gleichzeitig wählen.

Methode

Linien Plasma Probenzufuhr Auswertung Kalibrierung Statistik QCS QCC Ausgabe

RSD/RR%-Kontrolle: keine Reakt. ▾

Kalib.-Kontrolle: keine Reakt. ▾

Rekal.-Kontrolle: keine Reakt. ▾

Nr.	Linie	RSD/RR% <	RSD !	R ² (adj.) >	R ² !	Rek.Fakt. >	Rek.Fakt. <	Rek. !
1	AB96.152	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
2	As188.979	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
3	As193.698	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
4	Cd214.441	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
5	Cd226.502	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
6	Cr267.716	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
7	Cu324.754	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
8	Fe259.940	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
9	Mn257.610	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+
10	Ni231.604	3	+	0.99	+	0.9	1.2	+

☞ ☛ ☚

Öffnen... Speichern... OK Übernehmen Abbrechen

Fenster Methode / QCC

Arten der Qualitätskontrolle

Kontrolltyp	Beschreibung
RSD/RR%-Kontrolle	Kontrolle der relativen Standardabweichung bzw. relativen Spannweite (→ "Statistische Auswertungen spezifizieren – Karte Statistik" S. 47).
Kalib.-Kontrolle	Kontrolle des Bestimmtheitsmaßes der Kalibrierung
Rekal.-Kontrolle	Kontrolle des Rekalibrierfaktors

Reaktionen bei der Überschreitung von Fehlergrenzen

Reaktion	Beschreibung
keine	Betreffende Kontrolle nicht vornehmen.
nur markieren	Bei Überschreiten der Fehlergrenzen die betreffende Probe, Kalibrierung oder Rekalibrierung in der Probentabelle markieren.
wiederholen + fortsetzen	Nur RSD/RR%-Kontrolle Bei Überschreitung der seriellen Präzisionsgrenze die Messung der betreffenden Probe wiederholen, bevor die nächste Probe gemessen wird.
kalib.+ fortsetzen	Nur Kalib.-Kontrolle und Rekal.-Kontrolle Bei Überschreitung der Fehlergrenzen für die Kalibrierung bzw. des Rekalibrierfaktors eine neue Kalibrierung vornehmen und anschließend die Messung mit der nächsten Probe fortsetzen.
nächste Methode	Nur Kalib.-Kontrolle und Rekal.-Kontrolle Das aktuelle Messprogramm wird abgebrochen und das Messprogramm der nächsten Methode gestartet, wenn die Sequenz eine weitere Methode enthält.
Stopp	Nur Kalib.-Kontrolle und Rekal.-Kontrolle Bei Überschreitung der Fehlergrenzen die Messung der aktuell laufenden Methode beenden.

Linienspezifische Parameter der Qualitätskontrollen

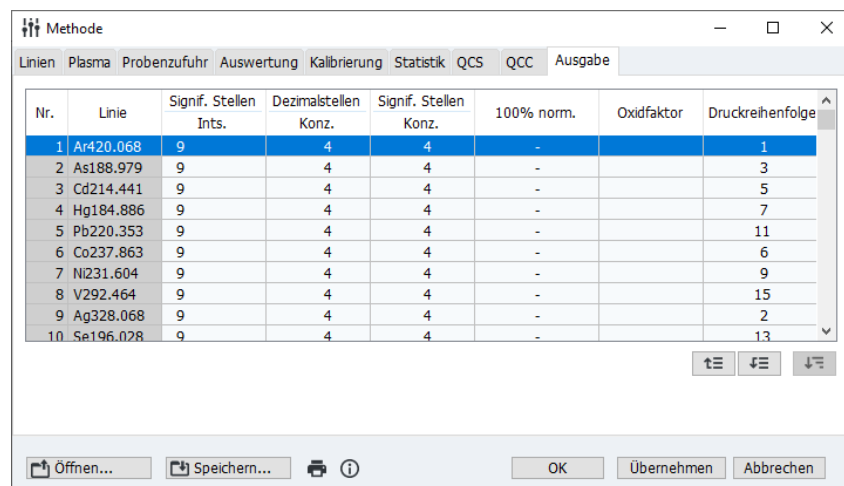
In der Tabelle tragen Sie die linienspezifischen Parameter der verschiedenen Qualitätskontrollen ein. Für jede analysierte Linie wird festgelegt, ob sie zur Kontrolle herangezogen wird. Überschreitet eine oder mehrere der kontrollierten Linien die Fehlergrenzen, so wird die oben vereinbarte Reaktion 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 R2(adj.) muss größer oder gleich dem eingegebenen Wert sein. Im anderen Fall wird mit der vereinbarten Verfahrensweise reagiert. R²! Bei mit "+" markierten Linien wird R2(adjust) kontrolliert.
Rekal.-Kontrolle	Rek.Fakt> Rek.Fakt<	Obere Grenze des Rekalibrierfaktors Untere Grenze des Rekalibrierfaktors. Bei Kalibrierfaktoren außerhalb dieser vorgegebenen Grenzwerte, wird die Reaktion ausgelöst. Rek.! Bei mit "+" markierten Linien wird der Rekalibrierfaktor geprüft.

3.2.9 Ausgabeformate für Ergebnisse spezifizieren - Karte Ausgabe

Auf der Karte **Ausgabe** spezifizieren Sie Dezimalstellenanzahl der Ergebnisse in der Anzeige auf dem Bildschirm und im Ausdruck, zusätzliche Ausgabetypen sowie die Linienfolge bei einer Mehrelementanalyse im Ausdruck.

Die Anzahl Dezimalstellen für die Anzeige und den Druck von Intensität und Konzentration sowie die Druckreihenfolge legen Sie in der Liste separat für jedes Element fest.



Fenster Methode / Ausgabe

Elemente	Beschreibung
Signif. Stellen (Ints.)	Anzahl der signifikanten Stellen der Intensitätswerte
Dezimalstellen (Konz.)	Anzahl der Nachkommastellen der Konzentrationswerte
Signif. Stellen (Konz.)	Anzahl der signifikanten Stellen der Konzentrationswerte
100% norm.	Die Ausgabekonzentration (Konz. 2) wird auf den Prozentanteil bezogen auf die Gesamtkonzentration umgerechnet. Die Gesamtkonzentration ist die Summe der Konzentrationen der mit "+" markierten Linien.
Oxidfaktor	Die Ausgabekonzentration (Konz. 2) wird auf die Konzentration/Gehalt des Oxids umgerechnet, wenn ein Oxid ausgewählt wurde. Der Oxidfaktor ist in Klammern angegeben, z. B. wird Ti durch Multiplikation mit 1.6681 in TiO ₂ umgerechnet.
Druckreihenfolge	Reihenfolge, in der die Linien im Report angezeigt werden.

4 Sequenzen


Die Sequenz enthält Proben und Aktionen in der abzuarbeitenden Reihenfolge innerhalb der Messung. Sie basiert auf einer geladenen Methode, welche die Informationen über Art der Kalibrierung, statistische Auswertungen, Qualitätskontrollen usw. enthält. Einige probenbeschreibende Daten wie Probenbezeichnung und Position auf dem Probenrack können ebenfalls direkt eingegeben werden. Diese Daten werden mit der Sequenz gespeichert.

Die Bedeutung der Schaltflächen und Symbole im Fenster **Sequenz**, die sich auch in anderen Fenstern wiederholen, sind im Abschnitt "Häufig verwendete Bedienelemente" S. 15 beschrieben.

4.1 Sequenzen erstellen, speichern, öffnen

Sequenzen werden wie Methoden in einer Datenbank gemeinsam gespeichert. Beim Speichern und Öffnen von Sequenzen wird das Datenbankfenster verwendet (→ "Methoden und Sequenzen verwalten" S. 135).

Neue Sequenz erstellen

- ▶ Zum Öffnen des Fensters **Sequenz** klicken Sie auf  in der Symbolleiste.
Alternativ können Sie die Menüpunkte **Datei | Neue Sequenz** oder **Methodenentwicklung | Sequenz** wählen.
- ▶ Nehmen Sie die Einstellungen entsprechend Abschnitt "Proben und Aktionsfolgen für die Sequenz zusammenstellen" S. 60 vor.
- ▶ Klicken Sie auf **[Übernehmen]**, um die Sequenz für die nachfolgende Messung freizuschalten oder speichern Sie die Sequenz.

Sequenz speichern

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Sequenz** auf **[Speichern]**.
Alternativ wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Speichern | Sequenz**.
- ▶ Geben Sie im Datenbankfenster im Feld **Name** den Namen für die Sequenz ein.
- ▶ Im Feld **Kat.** (Kategorie) können Sie optional mit drei Zeichen eine weitere Kennung eingeben, welche später die Suche von Sequenzen in der Datenbank erleichtert.
- ▶ Im Feld **Beschreibung** können Sie optional eine Information zur Sequenz eingeben.
- ▶ Speichern Sie die Sequenz mit **[Speichern]**.

Die Sequenz ist in der Datenbank gespeichert. Bei Verwendung eines vorhandenen Sequenznamens wird die vorhandene Sequenz nicht überschrieben, sondern eine neue Version in der Datenbank angelegt. Um Sequenzen aus der Datenbank zu entfernen, müssen sie explizit gelöscht werden (→ "Methoden und Sequenzen verwalten" S. 135)!

Sequenz speichern

Name: Kat.:

Name	Vers.	Datum	Zeit	Kat.	Anwender
Test_sequence	1	08.06.2020	16:36	LAB	User

Sortieren nach
 Aufsteigend
 Absteigend

Nur aktuelle Versionen anzeigen

Beschreibung:

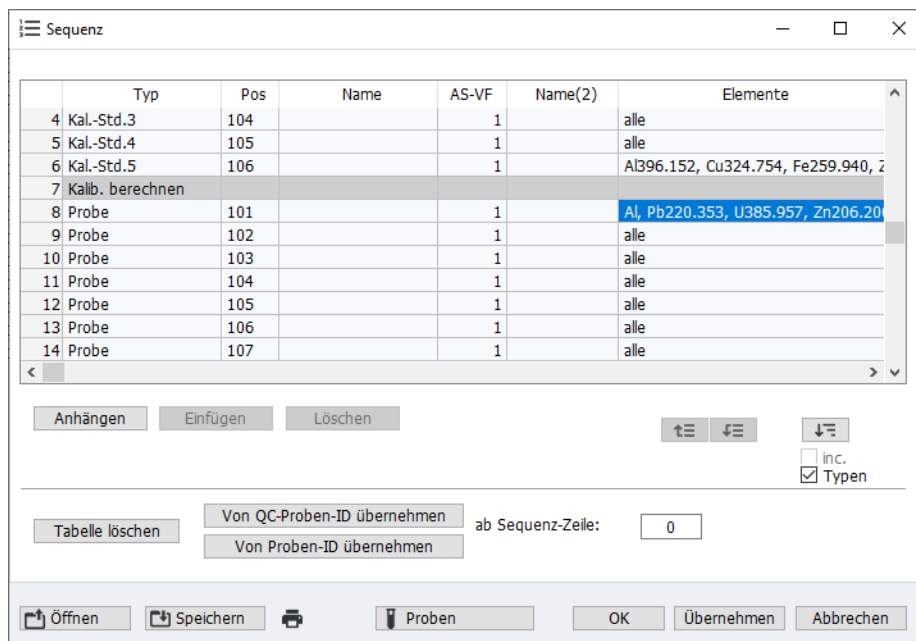
Datenbankfenster zum Speichern der Sequenz

Sequenz öffnen

- ▶ Öffnen Sie das Datenbankfenster mit einer der folgenden Alternativen:
 - Klicken Sie in der Werkzeugleiste auf das Ordner-Symbol neben dem Feld **Sequenz**
 - Wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Sequenz öffnen** oder
 - Klicken Sie im Fenster **Sequenz** auf **[Öffnen]**.
- ▶ Wählen Sie in der Liste die gewünschte Sequenz aus.
- ▶ Im Feld **Kat.** können Sie vereinbaren, dass nur Sequenzen einer der eingegebenen Kategorie angezeigt werden.
 Wenn Sie die Sequenzen aus allen Kategorien sehen möchten, löschen Sie den Eintrag im Feld **Kat.**
- ▶ Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Nur aktuelle Versionen anzeigen**, wenn Sie bei gleichnamigen Sequenzen jeweils nur die Sequenz mit der höchsten Versionsnummer sehen möchten.
- ▶ Öffnen Sie die ausgewählte Sequenz mit **[OK]**.

4.2 Dialogfunktionen im Fenster Sequenz

Nach einem Klick auf  öffnet sich das Fenster **Sequenz**.



Fenster Sequenz

Tabelle für Proben- und Aktionsfolgen

In der Tabelle sind die gewählten Proben- und Aktionsfolgen in der Reihe ihrer Abarbeitung angezeigt. Folgende Information werden dazu angezeigt:

Tabellenspalte	Erläuterung
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 Analysen- und QC-Proben können die Namen aus der Probeninformationsdatei übertragen werden.</p>
Name(2)	Weitere Bezeichnung zur Probenidentifikation (optional).
Elemente	<p>Elemente auswählen, die in einer Probe analysiert oder für die Sonderaktionen ausgeführt werden (→ "Elemente/Linien für eine Probenanalyse/Aktion auswählen" S. 63).</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ "keine" Aktuelle Auswahl wird gelöscht. ■ "alle" Alle in der Methode festgelegten Elemente werden bestimmt (Standardeinstellung). ■ Elementsymbol Nur die genannten Elemente werden bestimmt, z. B. "Cu, Pb". ■ Elementlinie (Symbol + Wellenlänge)

Nur die genannten Elementlinien werden bestimmt, z. B. "Mn 257.610, Ca 315.887".

- "nicht" Elementsymbol bzw. Elementlinie
Die genannten Elemente bzw. Elementlinien werden nicht bestimmt, z. B. "nicht Cu, Pb", "nicht Mn 257.610, Ca 315.887"


Schaltflächen im Fenster Sequenz

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

Schaltfläche	Erläuterung
[Anhängen]	Neue Zeile am Ende der Liste anhängen und das Fenster Sequenz bearbeiten öffnen.
[Einfügen]	Neue Zeile oberhalb des markierten Listenplatz einfügen.
[Löschen]	Markierte Zeilen löschen.
[Tabelle löschen]	Gesamte Sequenzliste löschen.
[Von QC-Proben-ID übernehmen]	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 Zeile festgelegt.
[Von Proben-ID übernehmen]	Informationen über Probenamen, Platz im Probengeber und die zu analysierenden Elemente aus dem Fenster Proben-ID / Probeninformation übernehmen. Die Informationen aus der Proben-ID-Tabelle werden in die Sequenztabelle eingetragen. Die erste Zeile mit neuer Probenidentifikation wird im Feld ab Zeile festgelegt.
[Proben]	Öffnet das Fenster Proben-ID .

Weitere Schaltflächen und Eingabemöglichkeiten sind im Abschnitt "Tabellen" S. 16 beschrieben.

4.3 Proben und Aktionsfolgen für die Sequenz zusammenstellen

- ▶ Laden oder erstellen Sie eine Methode.
- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Sequenz** mit einem Klick auf .
- ▶ Klicken Sie auf **[Anhängen]**. Das Fenster **Sequenz bearbeiten** erscheint.

Sequenz bearbeiten

Auswahl Tabellenplatz Nr.: 18

Proben
 QC
 Reag.-Blindwert
 Leerw.-NWG
 Kalibrierung
 Rekalibrierung
 IEC-Lösungen
 Sonderaktion
 Methode laden

Kalibrierverfahren: Standard-Verfahren
 Std.-Herstellung: Manuell hergestellt
 Anzahl der Std.: 5

Linie	f(x)	f(x=0)	w(x)	Prüf	Einheit
Al396.152	lin	+	C	-	µg/L
As188.979	lin	+	C	-	µg/L
As193.698	lin	+	C	-	µg/L
Cd214.441	lin	+	C	-	µg/L
Cd226.502	lin	+	C	-	µg/L
Cr267.716	lin	+	C	-	µg/L
Cu324.754	lin	+	C	-	µg/L
Fe259.940	lin	+	C	-	µg/L

Fenster Sequenz mit Auswahl der Kalibrierung

- Wählen Sie nacheinander die Option der Proben und Aktionen aus und übernehmen Sie diese mit **[Übernehmen]** in die Sequenzliste:

Probe/Aktion	Beschreibung
Proben	Die unter Anz. eingetragene Anzahl Proben messen.
QC-Proben	Eine QC-Probe messen und entsprechend der Spezifikation in der Methode auswerten. In der Liste wählen Sie eine in der Methode spezifizierte QC-Probe aus. Die Parameter der QC-Probe werden im danebenstehenden Feld angezeigt.
Blindwert	Den Blindwert messen.
Leerw.-NWG	Leerwert zur Bestimmung der Nachweis- und Bestimmungsgrenzen nach dem Leerwertverfahren messen.
Kalibrierung	Die Kalibrierproben messen und entsprechend der Spezifikation in der Methode die Kalibrierung vornehmen.
Rekalibrierung	Die für die Rekalibrierung vorgesehene Kalibrierprobe messen und eine Rekalibrierung vornehmen.
IEC-Lösungen	Nur für Peakkorrekturen mit IEC Die IEC-Lösungen messen.
Sonderaktionen	Aktionen, die nicht die Messung der Proben direkt betreffen, ausführen. Liste der möglichen Sonderaktionen (→ "Sonderaktionen in die Sequenz einfügen" S. 62).
Methode laden	Eine gespeicherte Methode laden, z. B. um innerhalb der Sequenz eine andere Elementanalyse zu starten. Mit [...] öffnen Sie das Datenbankfenster mit den gespeicherten Methoden (→ "Methode laden" S. 26). Wählen Sie eine der gespeicherten Methoden aus.

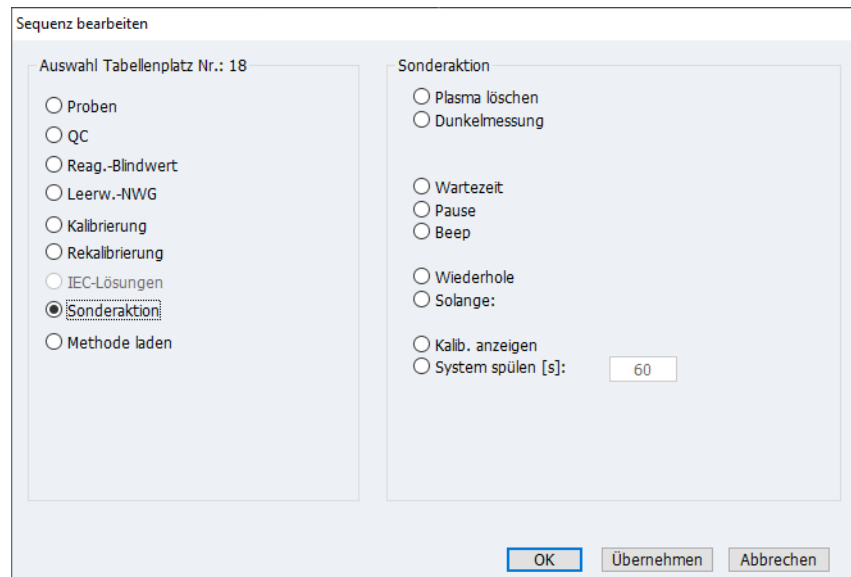
- Nachdem Sie die letzte Probe/Aktionen der Sequenz ausgewählt haben, übernehmen Sie diese mit **[OK]** und kehren damit in das Fenster **Sequenz** zurück.

- ▶ Als Voreinstellung der zu analysierenden Elemente ist eine Sequenztabelle für jede Probe/Aktion die Option **"alle"** gewählt. Mit einem Klick auf die Tabellenzelle **Elemente** der betreffenden Probe/Aktion können Sie diese Einstellung im Fenster ändern (→ "Elemente/Linien für eine Probenanalyse/Aktion auswählen" S. 63).
- ▶ Bei Verwendung des Probengebers:
Legen Sie die Position (**Pos.**) der Proben im Probenwechsler fest. Die Positionen von Kalibrier- und QC-Proben werden automatisch aus der Methode übernommen. Sie können jedoch hier die Positionen ändern, die in der Sequenz eingestellten Positionen haben immer Vorrang.

i Hinweis


Die Daten der zu untersuchenden Proben geben Sie am besten im Fenster **Proben-ID** ein und übertragen Sie anschließend in die Sequenzliste (→ "Informationsdaten für Proben und QC-Proben spezifizieren" S. 66).

4.3.1 Sonderaktionen in die Sequenz einfügen



Wählbare Sonderaktionen im Fenster Sequenz bearbeiten

Folgende Sonderaktionen können zusätzlich in den Messablauf eingefügt werden:

Aktion	Beschreibung
Plasma löschen	Plasma löschen.
Dunkelmessung	Zusätzliche Dunkelmessung ausführen. Bei dieser Messung des Dunkelstroms wird das Signal mit geschlossenem Shutter bestimmt. Die Dunkelmessung erfolgt immer auch automatisch, selbst wenn sie nicht in die Sequenz eingefügt wurde.
Wartezeit	Die im Feld eingegebene Zeit (in Minuten) warten und dann die Analyse fortsetzen. Bei Verwendung eines Probengebers bleibt die Kanüle in der Spülposition und es wird weiter Spülflüssigkeit angesaugt.
Pause	Die Analyse stoppen. Die Sequenz kann anschließend mit  oder dem Menüpunkt Routine Fortsetzen fortgesetzt werden.

Beep	Einen Signalton vom PC erzeugen lassen, z. B. um das Ende der Kalibrierung anzuzeigen. (Erfordert eine Soundkarte und Lautsprecher.)
Wiederhole / Solange	Eine Schleife (Wiederholung) in der Sequenz definieren. Der zwischen dem Startpunkt Wiederhole und dem Endpunkt Solange eingeschlossene Teil der Sequenz wird bis zum Erfüllen des Abbruchkriteriums wiederholt. Als Abbruchbedingung kann eine Anzahl von Schleifendurchläufen oder eine Zeit in Minuten angegeben werden. Bei einer Onlinemessung (im Rahmen einer Fernwartung) muss die Option autom. aktiviert werden. Dies verhindert im manuellen Betrieb die Nachfrage zur Probendosierung.
Kalib. anzeigen	Während der laufenden Sequenz die Kalibrierkurve anzeigen. In diesem Fall wird die Messung erst fortgesetzt, wenn die Kalibrierung mit [OK] bestätigt wurde.
System spülen	Probenwege bis zur Torch mit Spüllösung im Normallauf spülen. Spülzeit im Eingabefeld eingeben.

4.3.2 Elemente/Linien für eine Probenanalyse/Aktion auswählen

In der Sequenz sind alle Elemente für die Analyse von Proben oder das Ausführen von Aktionen in der Voreinstellung aktiviert. Möchten Sie Elemente für die Analyse einer Probe oder eine Aktion ausschließen, gehen Sie folgendermaßen vor:

- Klicken Sie im Fenster **Sequenz** auf die Tabellenzelle **Elemente** der entsprechenden Probe oder Aktion. Es erscheint das Fenster **Elemente und Linien auswählen**.

Als Voreinstellung sind alle in der Methode eingestellten Elemente/Linien aktiviert. In der Liste **Elemente** sind alle Elemente blau markiert.

Elemente und Linien auswählen

Elemente	Linien
Al	Al396.152
As	As188.979
Cd	As193.698
Cr	Cd214.441
Cu	Cd226.502
Fe	Cr267.716

Nicht (Auswahl invertieren)

Elemente/Linien der aktuell geladenen Methode anzeigen

Cu, Fe, As188.979, Cd226.502

Beispiele: (1) Cu123.56, 55, Cu, Fe123.34 (2) nicht Fe (3) alle

Elementlinien für die Analyse/Aktion auswählen

- Um ein Element völlig auszuschließen, entfernen Sie die Markierung mit einem Klick auf das entsprechende Element. Zur Aktivierung des Elements klicken Sie erneut auf das Element.
- Sind in der Methode für ein Element mehrere Linien eingestellt und möchten Sie davon nur ausgewählte Linien verwenden, markieren Sie in der Liste **Linien** die gewünschte Linie per Mausclick.

- ▶ Mit den Schaltflächen **[alle]** und **[keine]** aktivieren Sie jeweils alle Elemente bzw. schließen alle Elemente völlig für die Analyse/Aktion aus.
- ▶ Mit der Option **Nicht (Auswahl invertieren)** werden alle markierten Elemente/Linien von der Analyse/Aktion ausgeschlossen. Analysiert werden nur die nicht-markierten Elemente/Linien. Vor der Aufzählung der Elemente/Linien erscheint ein **"nicht"**.

Im Ausgabefeld werden alle ausgewählten Elemente/Linien aufgeführt. Die Elemente/Linien können nach der Rückkehr in das Sequenzfenster direkt in der Tabellenzelle editiert werden.

5 Probeninformationsdaten

Die Probeninformationsdaten (Proben-ID) enthalten für die aktuellen Analysenproben und die QC-Proben die spezifischen Daten wie Probenname, Position auf dem Probengeber, Einwaage, Verdünnung oder Konzentrationseinheit. Probennamen und Positionen können in die Sequenztabelle per Mausklick übernommen 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 PQ importiert werden.

Das Fenster mit den Probeninformationsdaten öffnen Sie mit einem Klick auf  in der Symbolleiste.

5.1 Probeninformationsdaten erstellen, speichern und öffnen

Einen neuen Satz Proben-ID erstellen

- ▶ Zum Öffnen des Fensters **Proben-ID** klicken Sie auf  in der Symbolleiste.

Alternativ öffnen Sie das Fenster **Proben-ID** mit den Menübefehlen **Methodenentwicklung | Proben-ID oder Datei | Neue Probeninformations-Daten**.

- ▶ Nehmen Sie die Einstellungen entsprechend Abschnitt "Informationsdaten für Proben und QC-Proben spezifizieren" S. 66 vor.
- ▶ Speichern Sie den Datensatz.

Proben-ID speichern

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Proben-ID** auf **[Speichern]**.

Alternativ wählen Sie den Menübefehl **Datei | Speichern | Probeninformationen**.

Es öffnet sich das Standardfenster **Speichern unter**.

- ▶ Geben Sie im Feld **Dateinamen** den Namen für die Probeninformation ein.
- ▶ Speichern Sie die Probeninformation mit **[Speichern]**.

Probeninformationsdaten öffnen


- ▶ Öffnen Sie eine Probeninformationsdatei mit einer der folgenden Alternativen:

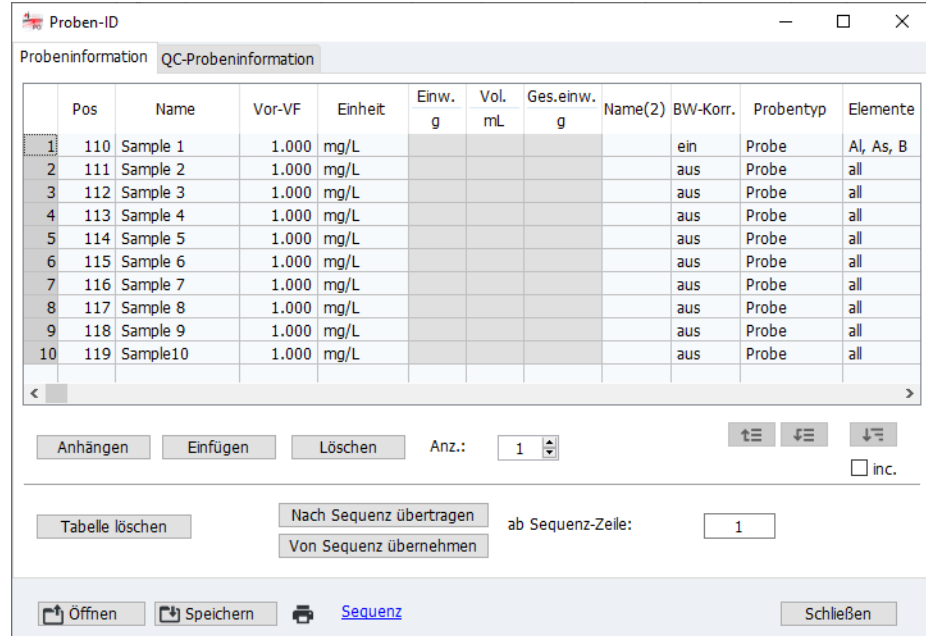
- Klicken Sie in der Werkzeugleiste auf das Ordner-Symbol neben dem Feld **Proben**.
- Wählen Sie den Menüpunkt **Datei | Probeninformations-Datei öffnen**.
- Klicken Sie im Fenster **Proben ID** auf **[Öffnen]**.

Es öffnet sich das Standardfenster **Öffnen**.

- ▶ Wählen Sie in der Liste die gewünschte Datei aus und öffnen Sie die Datei mit **[Öffnen]**.

5.2 Informationsdaten für Proben und QC-Proben spezifizieren

Nach einem Klick auf  erscheint das Fenster **Proben-ID**.



Fenster Proben-ID

Bei der Bewegung des Mauszeigers über den Tabellenkopf werden Tooltips zur Bedeutung der Tabellenspalten eingeblendet. Die Bedeutung der Schaltflächen und Symbole im Fenster **Proben-ID**, die sich auch in anderen Fenstern wiederholen, sind im Abschnitt "Häufig verwendete Bedienelemente" S. 15 beschrieben. Die Probeninformationsdaten müssen dann in die Sequenz übertragen werden.

5.2.1 Karte Probeninformation

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

Tabellenspalte	Beschreibung
Pos.	Probenposition im Probengeber
Name	Probenname Diese Eingabe ist optional. Max. Anzahl Zeichen: 20
Vor-VF	Für Einheitentyp flüssig und fest (→ "Einheiten spezifizieren" S. 143) Der Vorverdünnungsfaktor der Probe bezeichnet den Faktor, mit dem die Originalprobe verdünnt wurde, bevor sie im Probengeber platziert bzw. bei der Arbeit ohne Probengeber dem Plasma zugeführt wird. Der Faktor ist zur Berechnung der Konzentration der Originalprobe (Konz. 2) notwendig.
Einheit	Einheit für die Konzentration der Probe
Einw. [g]	Einwaage in Gramm (nur für den Einheitentyp fest) Masse der Originalprobe, die in der Probenvorbehandlung in Lösung gebracht wurde. Die Einwaage ist zur Berechnung der Konzentration der Originalprobe (Konz.2) notwendig.
Vol. [ml]	Gesamtvolumen bzw. Auffüllvolumen (nur für den Einheitentyp fest)

Ges.einw. [g]	Gesamteinwaage der Probe und des Lösungsmittels (nur für den Einheiten-typ flüssig grav. , z. B. für Öle).
Name(2)	Weiterer Probenname Diese Eingabe ist optional. Max. Anzahl Zeichen: 20
BW-korr.	Blindwertkorrektur (nur für Probentyp Proben) aus Es wird keine Blindwertkorrektur durchgeführt. ein Für Berechnung der Konzentration der Originalprobe wird der zuletzt in der Sequenz gemessene Blindwert subtrahiert.
Probentyp	Auswahl zwischen Probe und Blindwert
Elemente	In der Probe zu analysierende Elemente oder Linien Nach einem Klick auf die Tabellenzelle erscheint das Fenster Elemente und Linien auswählen , in dem diese Einstellungen vorgenommen werden (→ "Elemente/Linien für eine Probenanalyse/Aktion auswählen" S. 63.

Schaltflächen	Beschreibung
[Anhängen]	Anzahl neue Zeilen am Ende der Liste einfügen.
[Einfügen]	Anzahl neue Zeilen vor dem markierten Listenplatz einfügen.
[Löschen]	Markierte Zeile löschen.
Anz.:	Eingabefeld für die Anzahl einzufügender Zeilen.
[Tabelle löschen]	Die gesamte Liste der Probeninformationen löschen.
[Nach Sequenz übertragen]	Probennamen, Positionen im Probengeber und zu analysierende Elemente in die Sequenzliste übertragen. Die erste Zeile der Sequenzliste, ab welcher die Proben Daten zu übertragen sind, muss im Eingabefeld ab Sequenz-Zeile festzulegen.
[Von Sequenz übernehmen]	Probennamen, Positionen im Probengeber und zu analysierende Elemente aus der Sequenzliste in die Proben-ID-Tabelle übertragen. Die erste Zeile der Sequenzliste, ab welcher die Proben Daten zu übertragen sind, muss im Eingabefeld ab Sequenz-Zeile festgelegt werden.



5.2.2 Karte QC-Probeninformation

Analog zur Karte **Probeninformation** sind auf dieser Karte die QC-Proben aufgeführt.

Die Spalten sind analog zu denen der Karte **Probeninformation**. 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 in der Methode festgelegt und in der Spalte **BW-Korr.** zur Information (ein/aus) angezeigt.

Mit der Schaltfläche **[Nach Sequenz übertragen]** können die Daten in die Sequenzliste übertragen werden.





5.2.3 Probeninformationen spezifizieren

- ▶ Klicken Sie auf , um das Fenster **Proben-ID** zu öffnen.
- ▶ Geben Sie im Feld **Anz.** die Anzahl zu analysierender Proben ein. Klicken Sie anschließend auf **[Anhängen]**, um die entsprechenden Zeilen in die Liste einzufügen.
- ▶ Tragen Sie in der Tabelle für jede Probe die benötigten Informationen ein.
 - Sind die Eingaben in einer Spalte gleich, so können Sie mit  den Eintrag der markierten Zelle auf alle nachfolgenden Zellen der Spalte kopieren.
 - Wenn Sie das Kontrollkästchen **inc.** (steht für Inkrement) aktivieren, wird beim Übertragen der Information in die nächste Zelle der Wert jeweils um 1 erhöht. So können Sie auf einfache Weise z. B. aufeinanderfolgende Plätze im Probengeber belegen oder einen Probennamen fortlaufend nummerieren.
 - Texte aus Eingabefeldern können über die Menüpunkte **Bearbeiten | Kopieren** und **Bearbeiten | Einfügen** oder über die Tastenkombination [Strg+C] und [Strg+V] in die Windows-Zwischenablage kopiert und wieder eingefügt werden. Sie können den Text auch markieren und mit der rechten Maustaste das Kontextmenü zum Kopieren und Einfügen öffnen.
- ▶ Haben Sie alle Informationen eingetragen, so geben Sie im Feld **ab Sequenz-Zeile** die Zeile in der Sequenz an, ab welcher Sie die Probeninformationen in die Sequenz übernehmen möchten. Übertragen Sie die Information mit **[Nach Sequenz übertragen]**.

6 Analysen durchführen / Ergebnisse berechnen

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

Das Ausführen einer Sequenz wird mit den Symbolen der Werkzeugleiste oder über das Menü **Routine** gestartet.

Symbol	Menüpunkt	Funktion
	Routine Sequenz starten	Einen Analysenablauf starten.
	Routine Zeile(n) der Sequenz ausführen	Die markierte(n) Zeile(n) in der Sequenz ausführen. Mit Hilfe der Maus und gedrückter Strg- bzw. Umschalttaste können mehrere Zeilen markiert werden.
	Routine Stopp	Den Analysenablauf stoppen.
	Routine Fortsetzen	Setzt eine gestoppte Sequenz fort.

6.2 Plasma zünden/Plasma löschen

Plasma zünden

- ▶ Schalten Sie das ICP-OES Gerät am Netzschalter ein.
- ▶ Schalten Sie den PC am Netzschalter ein und starten Sie das Betriebssystem.
- ▶ Öffnen Sie die Gaszufuhr und achten Sie auf einen Vordruck von 6 bar.
- ▶ Schalten Sie die Absaugvorrichtung ein.
- ▶ Schalten Sie den Umlaufkühler am Netzschalter ein.
- ▶ Prüfen Sie, ob die Torch in der Start-Position ist. Dabei muss sich die Injektorspitze ca. 1 ... 2 mm unterhalb der Unterkante der Induktionsspule befinden.
- ▶ Schließen Sie die Tür zum Plasma-Raum.
- ▶ Überprüfen Sie die Pumpschläuche. Tauschen Sie die Schläuche aus, wenn sie nicht mehr elastisch sind oder starken Abrieb zeigen.
- ▶ Spannen Sie die Pumpschläuche jeweils zwischen den Stoppfern in die Pumpe am ICP-OES Gerät.

Legen Sie die Schlauchführungen über die Schläuche und befestigen Sie die Führungen mit den Andruckhebeln. Achten Sie darauf, dass die Andruckhebel einrasten!

Achtung!


Beachten Sie dabei die Pumprichtung. Diese Pumpe dreht sich entgegen dem Uhrzeigersinn.


- ▶ Stellen Sie sicher, dass für die Analyse genügend Spüllösung in der Flasche ist.

Hinweis:

Die Spüllösung sollte den gleichen Säuregehalt wie die Proben und Standards auf-


weisen. Wenn es keine anderen Vereinbarungen gibt, verwenden Sie 2%ige Salpetersäure.

- ▶ Überprüfen Sie den Füllstand der Abfallflasche und leeren Sie die Flasche, wenn nicht genügend Reservoir für die Analyse zur Verfügung steht.
- ▶ Beim manuellen Betrieb ohne Probengeber tauchen Sie den Probenansaugschlauch in die Spüllösung. Während des Zündvorgangs des Plasmas darf keine Luft nachströmen.
- ▶ Starten Sie das Programm ASpect PQ (→ "ASpect PQ starten" S. 7).
- ▶ War das System längere Zeit außer Betrieb oder die Zerstäuberkammer abgebaut, spülen Sie Zerstäuberkammer und Torch mit Zerstäubergas, um die Luft aus dem System zu treiben:
 - Öffnen Sie mit  das Fenster **Plasma / Kontrolle**.
 - Klicken Sie auf **[Sprühkammer spülen]**.
- ▶ Zünden Sie das Plasma:

Öffnen Sie mit  das Fenster **Plasma / Kontrolle** und klicken Sie auf **[Plasma zünden]**.
- ▶ Es folgt eine Anfangsphase, in der die Torch mit Argon gespült und die Sicherheitskreise des ICP-OES Gerätes geprüft werden. Dies dauert ca. 1 min. Wenn alles OK ist, wird das Plasma gezündet. Beobachten Sie, ob sich das Plasma richtig ausbildet hat, d. h. das Plasma ist kegelförmig, geht über die Induktionsspule hinaus und läuft nach oben spitz zu.


Bildet sich ein Ringplasma (Plasma bildet sich nur innerhalb der Induktionsspule aus) oder ertönt ein knatterndes Geräusch, betätigen Sie den roten Plasma-Aus-Knopf auf der linken Seite des Gerätes. Prüfen Sie vor dem nächsten Zündversuch, ob der Probenschlauch in die Spüllösung getaucht ist und die Gaszufuhr und die Umlaufkühlung in Ordnung sind.


 - ✓ Das Plasma zündet, die Schlauchpumpe und die Detektorkühlung starten. Das ICP-OES Gerät ist nach einer kurzen Einbrennzeit des Plasmas messbereit.

 Hinweis

Vor dem Zünden des Plasmas werden über interne Sicherheitskreise Gasfluss, Kühlung und Absaugung geprüft, sowie kontrolliert, ob sich die Torch in Arbeitsposition (in der Höhenverstellung geklemmt) befindet und die Probenraumtür geschlossen ist. Wird bei einer der Komponenten ein Fehler festgestellt, wird das Plasma nicht gezündet.

Plasma löschen und das ICP-OES Gerät ausschalten

- ▶ Nach Analysenende lassen Sie ca. 3 min Spüllösung und anschließend 1 min Wasser durch das System pumpen. Lassen Sie das Gerät danach trocken laufen. Falls Sie die Schläuche wechseln müssen, befindet sich dann keine Säure mehr in den Schläuchen!
- ▶ Löschen Sie das Plasma im Programm ASpect ICP mit einem Klick auf  in der Werkzeugleiste.

Alternativ öffnen Sie mit  das Fenster **Plasma** und klicken Sie auf **[Plasma löschen]**.
- ▶ Beenden Sie das Programm ASpect PQ mit **Datei | Beenden**.

- ▶ Quittieren Sie die Abfrage zum Abschalten des Spülgases für den Detektor mit **[Ja]**, wenn Sie das Spülgas abschalten wollen.
Wird die Arbeit nur für kurze Zeit unterbrochen (bis 30 min) oder arbeiten Sie im UV-Bereich, schalten Sie das Spülgas nicht ab. Dadurch ersparen Sie sich die Wartezeit beim Zündvorgang, bis der Detektor ausreichend gespült ist.
- ▶ Warten Sie, bis die Meldung erscheint, dass Gerät und Kühlung abgeschaltet werden können.
- ▶ Schalten Sie das ICP-OES Gerät und ggf. den Probengeber am jeweiligen Geräteschalter aus.
- ▶ Entspannen Sie die Pumpschläuche am ICP-OES Gerät.
 - Lösen Sie die Anpresshebel, sodass die Schlauchführung nicht mehr auf die Schläuche drückt.
 - Ziehen Sie die Schlauchstopper auf der linken Seite der Pumpe aus der Arretierung.
- ▶ Bei Verwendung des Probengebers entspannen Sie den Pumpschlauch auf die gleiche Weise wie bei der Schlauchpumpe am ICP-OES Gerät.
- ▶ Schließen Sie nach dem Ausschalten der Geräte die Gasversorgung.
- ▶ Schalten Sie den Umlaufkühler am Netzschalter aus.
- ▶ Schalten Sie die Absaugeinheit ab.
- ▶ Beenden Sie Windows und schalten Sie den PC aus.
 - ✓ Der Analysator ist damit ausgeschaltet.



Hinweis

Vor Ausschalten des ICP-OES Gerätes Abkühlphase abwarten!

Warten Sie nach Löschen des Plasmas noch mindestens 30 s, bevor Sie das Gerät am Netzschalter ausschalten.

6.3 Analyse starten

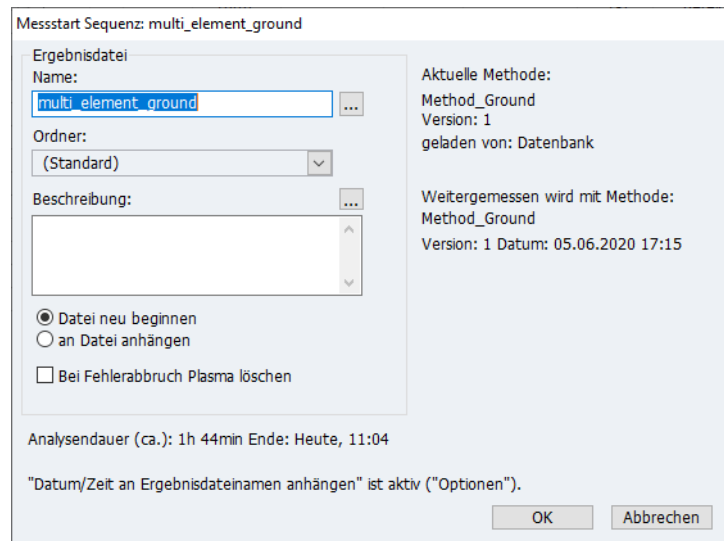
Nach Auswahl der Methode, der Sequenz und gegebenenfalls der Probeninformationsdaten sind alle Informationen vorhanden, um den Analysenablauf zu starten.

Das Gerät muss für die Messung vorbereitet sein:

- Das Plasma ist gezündet und brennt die für die Methode benötigte Einlaufzeit.
- Bei Verwendung des Probengebers: Die Proben stehen vorbereitet auf dem Probengeber.

Ergebnisdaten während des Analysenablaufs speichern

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



Fenster Messstart Sequenz

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	
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.
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 Analysenergebnissen gespeichert wird. Die Eingabe ist optional.
Bei Fehlerabbruch Plasma löschen	Löscht bei Abbruch der Messung durch eine Fehlermeldung das Plasma.

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 den Erweiterungen ".tps" (Methodenparameter, Intensitäten und Konzentrationen) und ".spk" (Spektrenrohdaten) gespeichert.

Messung starten

- ▶ Starten Sie die Messroutine mit einem Klick auf oder mit dem Menüpunkt **Routine | Sequenz starten**.
- ▶ Wählen Sie im Fenster **Messstart 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 manueller Probenzuführung ohne Probengeber folgen Sie den Anweisungen zur Probenbereitstellung auf dem Bildschirm.

Bei Verwendung des Probengebers läuft die Messung automatisch ab.


Anzeigen während des Analysenablaufs

Während der Messung werden die Ergebnisse in Echtzeit im Hauptfenster angezeigt. In der Sequenzliste des Hauptfensters wird der Messfortschritt dokumentiert. Die Zeilen mit den aufeinanderfolgenden Aktionen sind mit folgenden Symbolen in der Spalte gekennzeichnet:

Symbol	Bedeutung
-	Noch nicht gemessen / abgearbeitet.
○	Wird gerade gemessen.
+	Wurde bereits gemessen / abgearbeitet.




Ergebnisfenster anzeigen

Zusätzlich können optional die Fenster **Spektrendarstellung**, **Signalverlauf**, **Bargraph**, **Report-Fenster** und **Probenkonz. in Bezugskurve** mit dem aktuellen Ergebnis eingeblendet werden. Die Auswahl dieser Anzeigefenster nehmen Sie im Fenster **Optionen / Analysenablauf** (→ "Optionen zum Analysenablauf" S. 150) vor. Die Ergebnisfenster können während der Analyse ein- und ausgeblendet werden.

- ▶ Mit dem Menübefehl **Ansicht | Ergebnisanzeigen öffnen** oder der Funktionstaste F7 öffnen Sie die Fenster.
- ▶ Mit dem Menübefehl **Ansicht | Ergebnisanzeigen schließen** oder der Funktionstaste F8 blenden Sie die Fenster aus.
- ▶ Mit  können die Fenster auch während der Analyse geöffnet werden.



Schaltflächen in der Symbolleiste

In der Symbolleiste werden während der Messung größere Schaltflächen eingeblendet:

Schaltfläche	Beschreibung
 Anzeigefenster	Öffnet das Fenster Ergebnisanzeigen , in dem die einzelnen Ergebnisfenster unabhängig zu den Einträgen im Fenster Optionen / Analysenablauf aktiviert werden können. Aktivieren Sie die Optionen der Ergebnisfenster und schalten Sie die Fenster mit einem Klick auf [Ergebnisanzeigen] frei.
 Methode anzeigen	Methodenfenster einblenden. Methode kann nur gelesen, jedoch nicht geändert werden.
 Sequenz Proben	Sequenzfenster einblenden. Die Sequenz kann während der laufenden Analyse erweitert werden. Das Sequenzfenster enthält die Schaltfläche [Proben] mit dem das Fenster Proben-ID zur Ergänzung der Proben-ID-Daten geöffnet wird.

6.4 Analysenablauf unterbrechen/fortsetzen

Ein Analysenablauf kann unterbrochen und anschließend wieder fortgesetzt werden.

- ▶ Mit dem Menüpunkt **Routine | Stopp** oder  unterbrechen Sie den Analysenablauf sofort.
- ▶ Mit **Routine | Fortsetzen** oder  setzen Sie eine unterbrochene Routine fort.

Es öffnet sich das Fenster **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
Fortsetzen	Bei aktueller Probe, aktueller Linie und aktueller Statistikmessung fortsetzen.
Erste Statistik-Messung	Bei aktueller Probe, aktueller Linie und erster Statistikmessung fortsetzen.
Erste Linie	Bei aktueller Probe, erster Linie und erster Statistikmessung fortsetzen.
Ab Tabellenplatz	Sequenz ab dem nebenstehenden Tabellenplatz fortsetzen.

6.5 Aktionen der Sequenz wiederholen

Einzelne Aktionen in einer Sequenz können wiederholt werden.

- ▶ Markieren Sie im Hauptfenster auf der Karte **Sequenz** oder **Sequenz/Ergebnisse** die Zeile(n) mit der zu wiederholenden Aktion. Mehrfachmarkierungen nehmen Sie mit Mausclick auf die betreffenden Zeilen bei gedrückter Strg- oder Umschalttaste vor.
- ▶ Starten Sie die Messroutine mit einem Klick auf  oder mit dem Menübefehl **Routine | Zeile(n) der Sequenz ausführen**.
- ▶ Wählen Sie im Fenster **Messstart Sequenz** 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.

Danach startet die Wiederholung der ausgewählten Aktion.

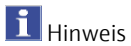
Hinweis

Falls zwischenzeitlich Änderungen in der Methode vorgenommen wurden, wird bei Wiederholung von Sequenz oder einzelner Zeilen die geänderte Methode verwendet und diese als neue Version mit den Ergebnissen gespeichert.

6.6 Analyseergebnisse Neuberechnen

Die Neuberechnung von Analyseergebnissen dient dazu, Änderungen der Auswertebedingungen, z. B. Änderung der Kalibrierfunktion oder Methodenänderungen, in der Analyse wirksam werden zu lassen. Die Änderung von Probeninformationsdaten, z. B. Probennamen, Verdünnungsfaktoren erfordert ebenfalls eine Neuberechnung, um sie in der Ausgabe der Analyseergebnisse zu berücksichtigen.

Die neuberechneten Daten können wahlweise an die aktuelle Ergebnisdatei angehängt oder in eine neue Datei gespeichert werden. Eine Manipulation der Ursprungsdaten ist ausgeschlossen. Wird in einer Ergebnisdatei die Neuberechnung mit verschiedenen Parametern mehrfach wiederholt, so wird bei jeder Neuberechnung auf die Ursprungsdaten der Ergebnisdatei zurückgegriffen.



Eingabeoptionen im Fenster Analyseergebnisse Neuberechnen

Mit jeder Neuberechnung wird eine neue Methodenversion gespeichert.

Analysenergebnisse Neuberechnen

Eingangsdaten

Name

Probeninformation geändert
 Ergebnisanzeigen aktualisieren

Ergebnisdatei (Ziel)

Ordner:

Name:

Datei neu beginnen
 an Datei anhängen

Beschreibung:

Einträge Neuberechnen

Zeilen (Methode):


alle
 Einträge auswählen ...

Linien der aktuell geladenen Methode:


Nr.	Linie
1	Al396.152
2	As188.979
3	As193.698
4	Cd214.441
5	Cd226.502
6	Cr267.716
7	Cu324.754
8	Fe259.940

in QC-Karte eintragen

Fenster Analyseergebnisse Neuberechnen

Option/Feld	Beschreibung
Eingangsdaten	<p>Auswahl der Eingangsdaten</p> <p>Name Anzeige des Namens der Ergebnisdatei, deren Daten Neuberechnet werden</p> <p>Probeninformation geändert Aktivieren, wenn Daten in der Probeninformationsdatei, z. B. der Verdünnungsfaktor, geändert wurden</p> <p>Ergebnisanzeigen aktualisieren Die Ergebnisfenster, z. B. Spektren darstellen, werden wie bei der Messung aktualisiert. Hinweis: Die Neuberechnung dauert hierdurch länger.</p>
Ergebnisdatei (Ziel)	<p>Ort wählen, an dem die Neuberechneten Ergebnisdaten abgelegt werden.</p> <p>Datei neu beginnen Ergebnisdaten in einer neuen Datei speichern Für die Ergebnisdatei wählen Sie unter Ordner und Name den Speicherort für die berechneten Daten. Die unter Beschreibung eingegebene Notiz wird die mit den Ergebnisdaten gespeichert.</p> <p>an Datei anhängen Die Neuberechneten Daten werden an die vorhandene Ergebnisdatei angefügt.</p>
Einträge Neuberechnen	<p>Zeilen, die Neuberechnet werden, auswählen.</p> <p>alle Alle Einträge in der Ergebnisliste Neuberechnen.</p> <p>Einträge auswählen Nur ausgewählte Sequenzzeilen Neuberechnen. Auf  und im Fenster Einträge auswählen alle Sequenzzeilen markieren, die Neuberechnet werden sollen.</p> <p>Linien der aktuell geladenen Methode In der Liste alle Linien markieren, die Neuberechnet werden sollen. Mit [Alle auswählen] werden alle Linien markiert. Mit [Auswahl aufheben] werden alle Markierungen in der Linienliste entfernt.</p>
[Temporäre Änderungen]	<p>Temporäre Änderungen für die Neuberechnung (Wellenlängenoffsets, Löschemarkierungen) speichern (Dateierweiterung ".rep"). Die Daten werden anschließend automatisch mit der zugehörigen (gleichnamigen) Ergebnisdatei geladen.</p>
in QC-Karte eintragen	<p>Wenn aktiviert, werden Ergebnisse von QC-Probentypen bei der Neuberechnung in die QC-Karte eingetragen (→"Qualitätskontrollproben für QC-Karten spezifizieren – Karte QCS" S. 49).</p>

Daten Neuberechnen


- ▶ Nehmen Sie die Änderungen in den Methodenparametern bzw. im Fenster **Proben-ID** vor.
- ▶ Klicken Sie auf  oder wählen Sie den Menüpunkt **Routine | Neuberechnen**.
Es öffnet sich das Fenster **Analysenergebnisse Neuberechnen**.
- ▶ Spezifizieren Sie die Eingangsdaten (Name, geänderte Probeninformation, geänderte Ergebnisanzeige), den Speicherort und den Namen der Zieldatei.
Hinweis: Wenn Sie die Neuberechnung aufgrund von Änderungen in der Probenin-

formation vornehmen, dann aktivieren Sie die Option **Probeninformation geändert**.
Sonst werden diese Änderungen nicht berücksichtigt.


- ▶ Wählen Sie die Zeilen/Linien für die Neuberechnung aus.
- ▶ Starten Sie die Neuberechnung mit **[OK]**. Bei nicht spezifizierter Zieldatei erscheint die Abfrage "Soll Neuberechnung ohne Speichern der Ergebnisdaten erfolgen?".

Einen Kalibrierstandard
ersetzen


Ein vorhandener Kalibrierstandard kann durch einen später gemessenen ersetzt werden.
Gehen Sie dazu folgendermaßen vor:

- ▶ Markieren Sie im Hauptfenster auf der Karte **Sequenz** oder **Sequenz/Ergebnisse** die Zeile des zu ersetzenden Kalibrierstandards.
- ▶ Starten Sie die Messung der Sequenzzeile mit einem Klick auf .
- ▶ Vereinbaren Sie im Fenster **Messstart Sequenz**, dass das Ergebnis an die bereits vorhandene Datei angehängt wird.

Danach startet Messung des Kalibrierstandards.

- ▶ Öffnen Sie mit einem Klick  auf das Fenster **Analysenergebnisse Neuberechnen**.
- ▶ Aktivieren Sie die Option **Einträge auswählen** und öffnen Sie mit einem Klick auf [...] das gleichnamige Fenster.
- ▶ Markieren Sie den zuletzt gemessenen Standard und verschieben Sie ihn mit den Pfeiltasten an die Position des Standards, der ersetzt werden soll.
- ▶ Markieren Sie alle Zeilen, die Neuberechnet werden sollen. Deaktivieren Sie dabei den alten Standard, der nicht mehr in die Berechnung einbezogen werden soll.
- ▶ Kehren Sie mit **[OK]** in das Fenster **Analysenergebnisse Neuberechnen** und spezifizieren Sie die Eingangsdaten, den Speicherort und den Namen der Zieldatei.
- ▶ Starten Sie die Neuberechnung mit **[OK]**.
 - ✓ Die Daten werden für die ausgewählten Zeilen Neuberechnet.

Alternativ können Sie den Standard auch auf folgende Weise ersetzen:


- ▶ Markieren Sie im Hauptfenster auf der Karte **Sequenz** oder **Sequenz/Ergebnisse** die Zeile des zu ersetzenden Kalibrierstandards.
- ▶ Starten Sie die Messung der Sequenzzeile mit einem Klick auf .
- ▶ Vereinbaren Sie im Fenster **Messstart Sequenz**, dass das Ergebnis an die bereits vorhandene Datei angehängt wird.

Danach startet Messung des Kalibrierstandards.

- ▶ Führen Sie in der Ergebnisliste einen Rechtsklick auf den Standard aus, den Sie ersetzen wollen. Wählen Sie im Kontextmenü den Punkt **Probeneinzelwerte**.
- ▶ Aktivieren Sie im Fenster **Probeneinzelwerte** das Kontrollkästchen **Ersetzen durch Eintrag** und geben Sie im Eingabefeld die Zeilennummer des zu ersetzenden Standards ein.
- ▶ Starten Sie die Neuberechnung wie oben beschrieben.
 - ✓ Die Daten werden für die ausgewählten Zeilen Neuberechnet.

6.7 Messungen parallel zur laufenden Analyse auswerten (Offline-Modus)

Im laufenden Messbetrieb kann keine weitere Ergebnisauswertung vorgenommen werden. Jedoch kann bei bereits laufender Anwendung 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 jedoch parallel zum laufenden Messbetrieb der ersten Programminstanz verwendet werden.

- ▶ Starten Sie ASpect PQ in der zweiten Programminstanz mit dem Menüpunkt **Datei | Offline-Programminstanz starten**.
- ▶ Öffnen Sie die Ergebnisdatei der aktuell laufenden Messung mit dem Menüpunkt **Datei | Ergebnisdatei öffnen**.
Bisher gemessene Ergebnisse werden in das Ergebnisfenster geladen.
- ▶ Weitere Ergebnisse aus der laufenden Messung laden Sie mit einem Klick auf  in der Werkzeugleiste oder dem Menüpunkt **Ansicht | Ergebnisliste aktualisieren**.

Die Ergebnisse können weiterbearbeiten werden.

Hinweis

Bei einer Neuberechnung werden die Neuberechneten Ergebnisse in einer neuen Datenbank gespeichert. Ein Zugriff auf die Ursprungsdatei ist nicht möglich.

6.8 Anzeige der Ergebnisse und des Analysenfortschritts im Hauptfenster

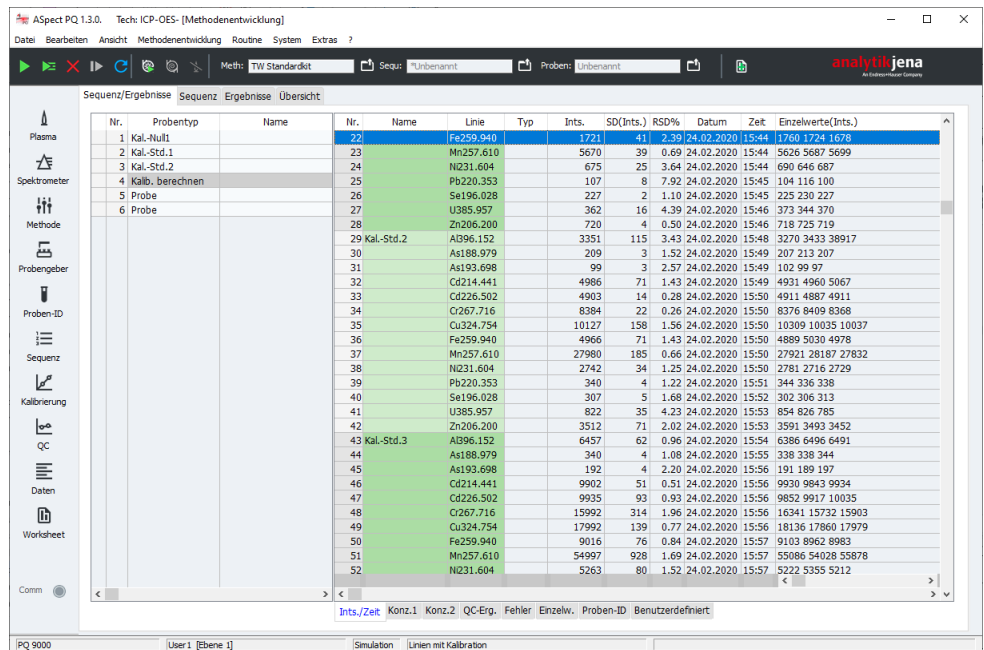
Die Messergebnisse und die Sequenz werden großflächig im Hintergrund der Arbeitsoberfläche im Hauptfenster angezeigt.

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)

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



Hauptfenster von ASpect PQ mit Ergebnisanzeige

6.8.1 Karte Sequenz/Ergebnisse

Die Karte **Sequenz/Ergebnisse** enthält die Daten der beiden Tabellen Sequenz und Ergebnis (→ "Karte Sequenz" S. 79 und "Karte Ergebnisse" S. 79).

6.8.2 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	Bedeutung
-	Noch nicht gemessen / abgearbeitet.
○	Wird gerade gemessen.
+	Wurde bereits gemessen / abgearbeitet.



Hinweis

Nach der Messung kann eine Neumessung einer ausgewählten Probe erfolgen. Dafür muss die Probenzeile in der Sequenz markiert und anschließend in der Werkzeugleiste betätigt werden.

6.8.3 Karte Ergebnisse

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

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

Tabelle Ints./Zeit

Die Tabelle enthält die Intensitäten und die statistischen Auswertungen entsprechend der Methodeneinstellungen (Fenster **Methode / QCC**).

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer in der Analysenfolge
Name	Name der Probe, des Standards oder der QC-Probe/Standard
Linie	Elementlinie
Typ	Interner Standard oder Analyt
Ints.	Mittelwert der gemessenen Einzelintensitäten der Probe
SD(Ints.)	Standardabweichung (Mittelwertstatistik)
RSD%	Relative Standardabweichung (Mittelwertstatistik)
Datum/Zeit	Messzeitpunkt der Messung
Einzelwerte Ints.	Einzelwerte der Intensitätsmessungen

Tabelle Konz.1

Die Tabelle **Konz.1** zeigt die analysierte Konzentration der Probe, wie sie dem ICP-OES Gerät zugeführt wurde, an. Als Einheit wird die in der Methode eingestellte Einheit der Kalibrierung verwendet.

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer in der Analysenfolge
Name	Name der Probe, des Standards oder der QC-Probe/Standard
Linie	Elementlinie
Typ	Interner Standard oder Analyt
Einheit	Konzentrationseinheit
Konz.1	Konzentration des Analyten in der Probe / Konzentration des Analyten im Standard
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	Vorverdünnungsfaktor der Probe Faktor, mit dem die Originalprobe verdünnt wurde, bevor sie im Probengeber platziert bzw. bei der Arbeit ohne Probengeber dem Plasma zugeführt wird
Bem.	Bemerkungen (→ "Übersicht über Markierungen in der Werteanzeige" S. 168)
Ints.	Mittelwert der gemessenen Einzelintensitäten der Messwiederholungen
SD(Ints.)	Standardabweichung der Intensität (Mittelwertstatistik)

Datum/Zeit	Messzeitpunkt
Einzelwerte (Ints.)	Einzelwerte der Intensitäten der Messwiederholungen

Tabelle Konz.2

Die Tabelle **Konz.2** zeigt die Konzentration der Originalprobe an. Bei der Berechnung von Konz.2 werden die Probeninformationsdaten berücksichtigt:

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

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer in der Analysenfolge
Name	Name der Probe, des Standards oder der QC-Probe/Standard
Linie	Elementlinie
Typ	Interner Standard oder Analyt
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
100 % norm.	Auf Prozentanteil normierte Konz. 2
Ints.	Mittelwert aus den ermittelten Einzelintensitäten
SD(Ints.)	Standardabweichung der Intensität (Mittelwertstatistik)
R(Ints.)	Spannweite der Intensität (Medianstatistik)
Datum/Zeit	Messzeitpunkt
Einzelwerte (Ints.)	Einzelwerte der Intensitätsmessungen

Tabelle QC-Erg.

In der Tabelle **QC-Erg.** werden die Ergebnisse der QC-Proben ausgegeben:

- Sollwert und Istwert der Konzentration
- Wiederfindungsraten (alle Typen außer Blindwert)
- Reaktionen auf eventuelle Abweichungen (alle Typen außer Blindwert).

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer in der Analysenfolge
Name	Name der Probe, des Standards oder der QC-Probe/Standard
Linie	Elementlinie
Typ	Interner Standard oder Analyt

QC (für Kalibrierfunktionen)	R2 (adj.) bzw. R (→ "Optionen zum Analysenablauf" S. 150) Anstieg BEC Background Equivalent Concentration
QC (für QC-Proben, nicht für QC-Blindwert)	Konz.1 Sollwert WFR Wiederfindungsrate Bei QC-Proben und QC-Std. 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 BG Bestimmungsgrenze
Bem.	Bemerkungen zu QC-Ereignisse (z. B. >Kal.) (→ "Übersicht über Markierungen in der Werteanzeige" S 168)
Ints.	Mittelwert der gemessenen Einzelintensitäten
SD	Standardabweichung der Intensität (Mittelwertstatistik)
Datum/Zeit	Messzeitpunkt
Einzelwerte (Ints.)	Einzelwerte der Intensitätsmessungen

Tabelle Fehler

Treten innerhalb der Messung Fehler auf, so werden die entsprechenden Messungen in allen Tabellen rot markiert. In der Tabelle **Fehler** wird der aufgetretene Messfehler inklusive Fehlernummer in Schriftform dokumentiert.

Tabelle Einzelwerte

Die Tabelle **Einzelwerte** enthält die gemessenen Einzelwerte der Intensität und die dazugehörige Untergrundintensität.

Tabelle Proben-ID

Die Tabelle **Proben-ID** enthält die Probeninformationsdaten (→ "Informationsdaten für Proben und QC-Proben spezifizieren" S. 66).

Spalte	Beschreibung
Nr.	Nummer in der Analysenfolge
Name	Name der Probe, des Standards oder der QC-Probe/Standard
Linie	Elementlinie
Pos.	Position der Probe im Probenwechsler
Vor-VF	Vorverdünnungsfaktor 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 notwendig.

Einw.[g]	Einwaage in Gramm Masse der Originalprobe, die in der Probenvorbehandlung in Lösung gebracht wurde (in g). Die Masse ist zur Berechnung der Konzentration der Originalprobe (Konz.2) notwendig.
Vol.[ml]	Volumen des Lösungsmittels, in dem die jeweilige Einwaage gelöst wurde (in mL). Der Wert ist zur Berechnung der Konzentration der Originalprobe (Konz.2) erforderlich.
Ges. Einw. [g]	Gesamteinwaage, beinhaltet Probe und Verdünnungsmittel (nur für Einheitentyp flüssig, gravimetrisch)
Name (2)	Weiterer Probenname aus der Probeninformationstabelle
AS-VF	Verdünnungsfaktor des Probengebers
BW-Korr.	Blindwertkorrektur aus Es wurde keine Blindwertkorrektur durchgeführt. ein Für Berechnung der Konzentration der Originalprobe wurde der zuletzt in der Sequenz gemessene Blindwert subtrahiert.

Tabelle Benutzerdefiniert

Auf der Karte **Benutzerdefiniert** können Sie die Parameter für die Ergebnisausgabe und deren Reihenfolge in der Tabelle selbst auswählen.

- ▶ Klicken Sie auf die Schaltfläche **[Spalten auswählen]** in der rechten unteren Ecke der Tabelle.
- ▶ 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.
- ▶ Nach der Rückkehr ins Hauptfenster werden die Ergebnisse angezeigt. Die Breite der Tabellenspalten können Sie verändern, in dem Sie den Mauszeiger auf die Tabellenspalte 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.

6.8.4 Karte Übersicht

Auf der Karte **Übersicht** werden die Analysenergebnisse zusammengefasst. Dabei kann zwischen verschiedenen Ausgaben gewählt werden:


- Konz.1-Konzentration 1
- Konz.1(RSD%)-Konzentration 1 (relative Standardabweichung)
- Konz.2-Konzentration 2

Wert	Beschreibung
------	--------------

Konz.2 (RSD%)	Konzentration 2 (relative Standardabweichung)
Ints.	Intensität
Ints.(RSD%)	Intensität (relative Standardabweichung)
Ints.(SD)	Intensität (Standardabweichung)
NWG	Nachweisgrenze
BG	Bestimmungsgrenze
WfR(Sollw.)	Wiederfindungsrate (Sollwert)
R2	Bestimmtheitsmaß
100% norm.	auf Prozentanteil normierte Konz. 2

Durch Aktivieren der Kontrollfelder können die folgenden Probenarten angezeigt werden:

- Probe
- QC-Proben
- Kal.-Std.
- Sonstige

Mit  öffnen Sie das Fenster **Drucken Übersicht**, aus dem Sie den Ausdruck der in der aktuellen Übersicht angezeigten Daten starten können (→ "Druckfunktionen in ASpect PQ" S. 128).

6.9 Probeneinzelwerte anzeigen und bearbeiten (Fenster Probeneinzelwerte)

- ▶ Führen Sie einen Rechtsklick auf die Zeile in der Ergebnistabelle aus und wählen Sie im Kontextmenü den Punkt **Probeneinzelwerte**.

Alternativ markieren Sie die Probenzeile und wählen Sie den Menübefehl **Ansicht | Probeneinzelwerte**.

Probeneinzelwerte - [Sample 1]

Cu324.754

Nr.	Ints.	Konz.1 µg/L	Bem.
1	543587	33.10	
2	527508	31.49	
3	535970	32.34	

Nr.:

Typ:

Name:

Datum/Zeit:

Ints.(Mw.):

SD:

RSD:

Fenster Probeneinzelwerte

Anzeige der Einzelwerte
(Tabelle)


Die Probeneinzelwerte werden in der Tabelle angezeigt.

Tabellenspalte	Beschreibung	
Nr.	Nummer des Einzelwertes innerhalb der Probenmessung	
Ints.	Intensität des Einzelwertes	
Konz. 1	Konzentration des Analyten in der analysierten Probe	
Bem.	keine	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.

Angabe zur Probe

Feld	Beschreibung
Nr.	Nummer der Messung in der Ergebnistabelle
Typ	Probentyp (Probe, Standard oder QC-Probentyp)
Name	Probenname
Datum / Zeit	Datum und Zeit der in der Tabelle markierten Messung
Ints.(Mw.)	Intensität 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).

Weitere Schaltflächen und
Optionen im Fenster
Probeneinzelwerte

Option / Schaltflächen	Beschreibung
[Löschen] / [Reakt.]	Probeneinzelwert aus der Mittelwertberechnung herausnehmen bzw. wieder für die Berechnung reaktivieren.
[Spektren bearbeiten]	Gemessenen wellenlängenabhängigen Linienspektren anzeigen (→ "Intensitätsspektren anzeigen und bearbeiten" S. 87).
Ersetzen durch Eintrag	Nur für Kalibrierstandards Aktuelle Probe soll bei einer Nachberechnung durch die Probe an Position Nr. der Ergebnistabelle ersetzt werden.
	Zwischen den Linien einzelner Proben und von einer Probe zur nächsten in der Ergebnistabelle wechseln.

Probeneinzelwerte ausschließen

Ein Einzelwert kann aus der Berechnung des Probenmittelwerts manuell ausgeschlossen werden.

- ▶ Markieren Sie den auszuschließenden Einzelwert in der Tabelle.
- ▶ Mit **[Löschen]** deaktivieren Sie den Wert für die Berechnung des Probenmittelwerts bei einer Nachberechnung der Ergebnisse.

- ▶ Mit **[Reakt.]** 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.

6.10 Intensitätsspektren anzeigen und bearbeiten (Fenster Spektren bearbeiten)

Die Darstellung der Intensitätsspektren nutzen Sie für folgende Aufgaben:

- Peaksschwerpunkt einer Analysenlinie ermitteln und in der Linien-datei speichern
- Untergrundkorrektur unter Berücksichtigung der Probenmatrix ermitteln und in die Methode übernehmen
- Spektrale Korrekturen erstellen
- Linien neben der Analysenlinie identifizieren

Zu jeder Messung im Ergebnisfenster können die Intensitätsspektren angezeigt und bearbeitet werden.

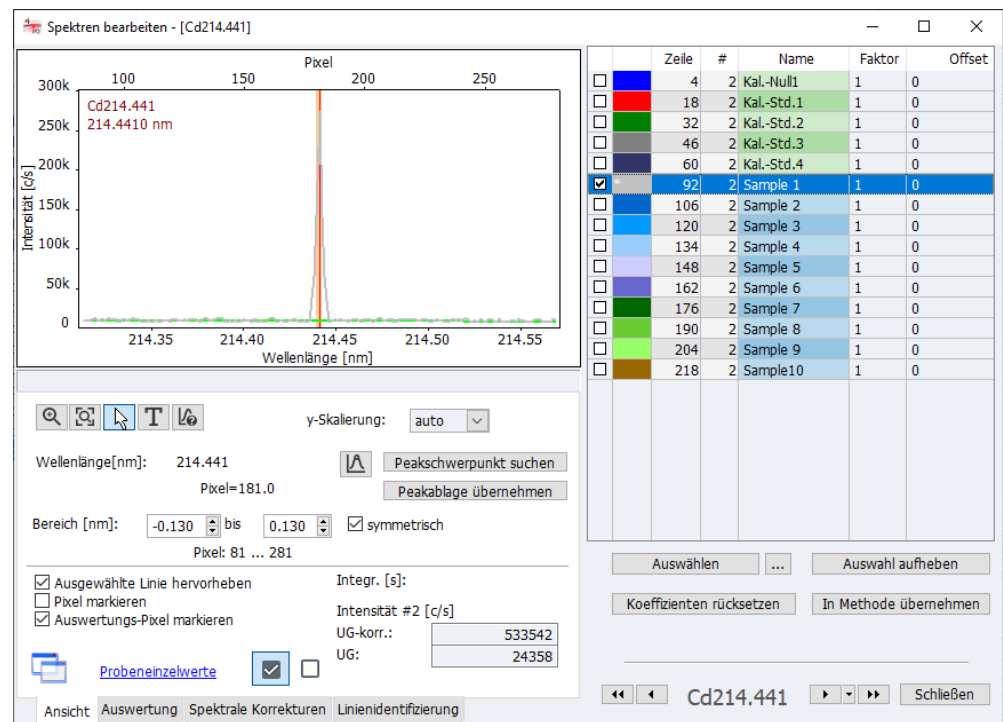
- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Spektren bearbeiten** durch einen Doppelklick auf die entsprechende Probenzeile in der Ergebnistabelle.

Alternativ führen Sie einen Rechtsklick auf die Zeile in der Ergebnistabelle aus. Im sich öffnenden Kontextmenü klicken Sie auf **Spektren bearbeiten** oder Sie markieren die Probenzeile und wählen den Menübefehl **Ansicht | Spektren bearbeiten**.

Im Fenster **Spektren bearbeiten** werden für jeweils eine Analysenlinie alle gemessenen Proben mit allen Einzelwerten aufgelistet. Zwischen den einzelnen Analysenlinien kann gewechselt werden.

Auf der linken Seite des Fensters **Spektren bearbeiten** befindet sich die grafische Darstellung des Intensitätsspektrums der gewählten Probe(n) und vier Registerkarten zur Auswertung und Bearbeitung des Spektrums. Auf der rechten Seite werden die anzuzeigenden Probeneinzelwerte in der Übersicht ausgewählt.

6.10.1 Spektren anzeigen – Karte Ansicht



Fenster Spektren bearbeiten / Ansicht

Spektren auswählen / Probenliste

In der Probenliste auf der rechten Seite werden alle Probeneinzelwerte der Analyselinie aufgelistet.

- ▶ Aktivieren Sie die Kontrollkästchen der Einzelwerte, die Sie in der Grafik anzeigen wollen.

Die Spektren der Probeneinzelwerte werden überlagert dargestellt. Den einzelnen Spektren ist dabei die Farbe des Feldes vorn in der Tabelle zugeordnet.

- ▶ Die mit der Maus markierte Einzelprobe (blauer Balken in der Tabelle) ist in der Grafik dick hervorgehoben, wenn die Option **Ausgewählte Linie hervorheben** in der linken unteren Ecke des Fensters aktiviert ist.

Die Anzeige der Proben/Wiederholmessungen in der Probenliste und die Auswahl für die grafische Anzeige der Spektren (Aktivierung des Kontrollkästchens in der Probenliste) können Sie mit den Schaltflächen unter der Tabelle filtern:

- ▶ Klicken Sie neben **[Auswählen]** auf **...**.
- ▶ Im Fenster **Auswahl** nehmen Sie folgende Einstellungen vor:

Option	Beschreibung
alle	Alle Zeilen der Ergebnisliste im Hauptfenster für die grafische Anzeige auswählen (Kontrollkästchen für die grafische Anzeige aktivieren).
von/bis	Nur die Spektren zwischen den eingestellten Zeilen von/bis der Ergebnisliste auswählen.

Wiederholmessungen	Probeneinzelwerte einer Probe auswählen: alle Alle Probeneinzelwerte einer Probe auswählen. Ordnungszahl, z. B. "2." Nur den ausgewählten Einzelwert einer Probe auswählen
nur ausgewählte Wiederholung(en) anzeigen	Wenn aktiv, werden in der Probenliste nur die Einträge für die ausgewählte Wiederholungsmessung angezeigt. Wenn inaktiv, werden alle Einzelspektren angezeigt und die oben ausgewählten Einträge (alle bzw. von/bis) des Hauptfensters geladen.





- ▶ Mit einem Klick auf **[Auswählen]** nehmen Sie die Spektrenanzeige und -auswahl mit den oben eingestellten Parametern vor.
- ▶ Mit **[Auswahl aufheben]** deaktivieren Sie alle Kontrollkästchen für die Anzeige der Einzelwerte.
- ▶ Für jedes Spektrum können Sie einen Faktor und/oder einen Offset in der Proben-tabelle eingegeben. Ein so manipuliertes Spektrum wird gespreizt/gestaucht und entlang der y-Achse verschoben.
- ▶ Mit einem Klick auf **[Koeffizienten rücksetzen]** werden der Faktor und der Offset wieder zurückgesetzt und das Spektrum in seinen Ausgangszustand dargestellt.

Faktor und Offset eingeben

Anzeige der Linienspektren

Auf der linken Seite werden die ausgewählten Spektren angezeigt. Dabei wird die Intensität in [c/s] gegen die Wellenlänge in [nm] aufgetragen. Am oberen Rand der Grafik ist die Pixelzuordnung abgebildet. Das Spektrometer ist so justiert, dass auf dem Messpixel, z. B. 180, der Peaksschwerpunkt abgebildet ist. Ablagen des Peaksschwerpunktes müssen für jede Analyselinie korrigiert werden, siehe unten.

Die Schaltflächen haben für die Spektrenansicht folgende Funktionen:

Option / Schaltfläche	Beschreibung
	Grafikzoom aktivieren. Nach Anklicken mit gedrückter linker Maustaste den zu vergrößernden Spektrenausschnitt markieren.
	Nach Zoom ursprüngliche Koordinaten wiederherstellen.
	Markierungsmodus in Darstellungen des Signalverlaufs oder Spektren aktivieren. Mit der linken Maustaste werden Messpunkte ausgewählt. Die Werte des ausgewählten Messpunkts werden im Ausgabefeld unter den Schaltflächen angezeigt.
	Textmodus aktivieren. Bei gedrückter linker Maustaste kann ein Bereich für ein Fenster ausgewählt werden, mit dem Text zur Grafik hinzugefügt werden kann. Ein Doppelklick auf bestehenden Text öffnet das Fenster, um Text zu ändern oder zu löschen. Mit Strg + rechte Maustaste kann bestehender Text verschoben werden.

	Modus zur Linien-Identifikation aktivieren. Durch Klicken oder Ziehen mit der Maus wird in einer Liniendatenbank nach Elementlinien bei der ausgewählten Wellenlängenposition gesucht. Die gefundene Linie wird unter der Grafik angezeigt (→ "Linien finden – Karte Linienidentifizierung" S. 96).
y-Skalierung	Skalierung der Grafik wählen: auto. Autoskalierung: Das Spektrum wird mit optimaler Ordinaten-Dehnung dargestellt. Wert Manuelle Skalierung. Die obere Ordinaten-grenze ist in der Liste auszuwählen.
Wellenlänge	Wellenlänge der Analyselinie anzeigen.
	Peakschwerpunkt manuell setzen.
[Peakschwerpunkt suchen]	Peak automatisch suchen und Ablage korrigieren.
[Peakablage übernehmen]	Peakablage in der Linienbibliothek speichern. Die Ablage wird ab diesem Zeitpunkt für jede Messung dieser Elementlinie verwendet.
Bereich [nm]	Wellenlängenbereich unter- und oberhalb der Analyselinie wählen. Dieser Wellenlängenbereich steht zur Spektralauswertung, z. B. der Untergrundkorrektur, zur Verfügung. Ist das Kontrollkästchen symmetrisch aktiviert, ist der Wellenlängenbereich unter- und oberhalb der Wellenlänge gleich groß. Unter den Eingabefeldern wird der entsprechende Pixelbereich angezeigt. Die Einstellungen zum Wellenlängenbereich der ausgewählten Linie übertragen Sie mit einem Klick auf [In Methode übernehmen] in die aktuelle Messmethode. Dieser Bereich wird für die dynamische Untergrundanpassung (oder automatische Untergrundkorrektur) zur Berechnung verwendet. Die Daten werden auch im Methodenfenster auf der Karte Auswertung geändert
[Ausgewählte Linie hervorheben]	Das in der rechten Übersicht markierte Einzelspektrum wird mit einer dicken Linie in der Grafik hervorgehoben.
[Pixel markieren]	Pixel werden in der Spektrengrafik mit einem Kreis markiert.
[Auswertungs-Pixel markieren]	Der zentrale Auswertungs-Pixel am Peakschwerpunkt wird mit einer roten Linie hervorgehoben. Werden mehrere Pixel zur Auswertung herangezogen, ist deren Bereich hellrot markiert.
Anzeige der Intensitäten	UG (korr.) untergrundkorrigierte Intensität UG Intensität des Untergrundes
Probeneinzelwerte	Link zum Fenster Probeneinzelwerte
	Wenn das Symbol auf diese Weise markiert ist, wird die Linie in der Methode verwendet (→ "Auswahl der Analyselinien – Karte Linien" S. 27). Auf diese Weise können Sie im Fenster Spektren bearbeiten während der Methodenentwicklung geeignete Linien auswählen.





Linie nicht in der Methode verwenden.

Peakschwerpunkt automatisch setzen

Während der Methodenentwicklung müssen Sie gerätebedingte Peakablagen und Ablagen, die durch die Linieninterferenzen verursacht werden, z. B. Dubletten, korrigieren.

- ▶ Klicken Sie auf **[Peakschwerpunkt suchen]**. Mit der automatischen Bestimmung des Peakschwerpunkts können die meisten Peaks sehr gut bestimmt werden.

Alternativ klicken Sie auf  und markieren den Peakschwerpunkt manuell im Spektrum.

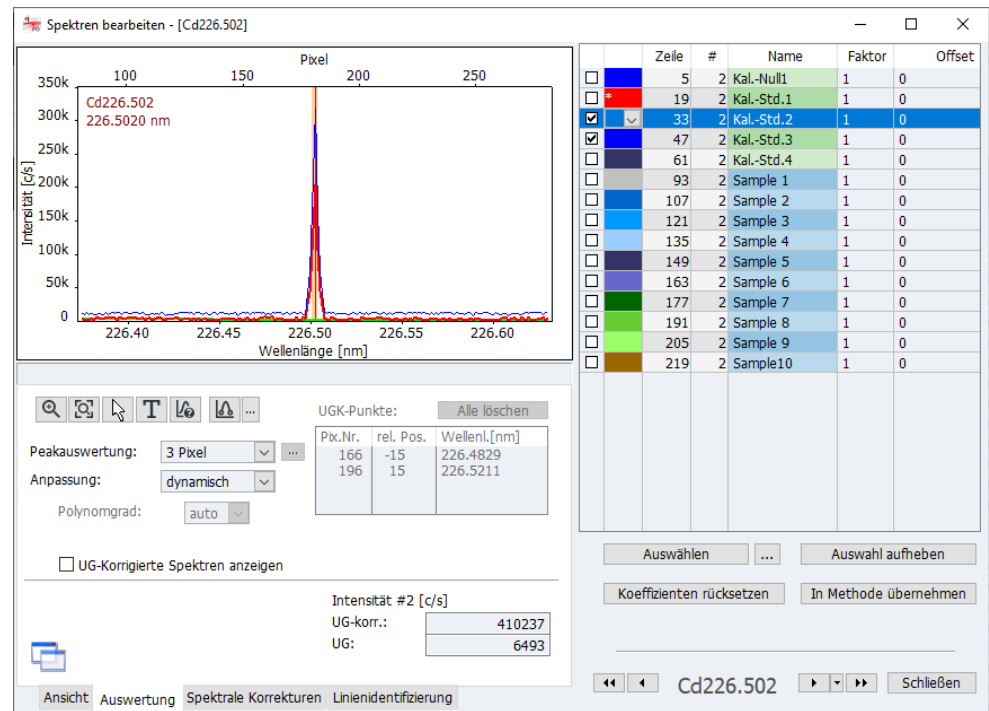
- ▶ Optional können Sie die Ergebnisse neu berechnen, um die neue Peaklage zu beurteilen.
 - Wechseln Sie zum Ergebnisfenster und klicken Sie auf .
 - Verfahren Sie weiter wie unter "Analyseergebnisse Neuberechnen" S. 75 beschrieben.
- ▶ Speichern Sie die gefundene Peakablage mit **[Peakablage übernehmen]** in die Linien/Wellenlängendatei des Gerätes.
 - ✓ Die Daten stehen nun für jede weitere Auswertung der Analyselinie zur Verfügung.

6.10.2 Peak auswerten und Untergrundkorrektur bestimmen – Karte Auswertung

Kontinuierliche Untergrundemissionen, die Intensitätsschwankungen über einen breiten spektralen Bereich um eine Analyselinie verursachen, können mit der Untergrundkorrektur kompensiert werden. Dabei werden Pixel (Untergrundkorrektur-Punkte) auf beiden Seiten der Analyselinie ausgewählt, eine Regression durch die Punkte berechnet und die Regressionskurve für die Untergrundkorrektur verwendet.

Im statischen Verfahren zur Auswahl der Untergrundkorrektur-Punkte werden die Punkte manuell gesetzt und der Polynomgrad der Regressionskurve selbst bestimmt. Im dynamischen Verfahren wird die Regressionskurve mit dem ABC-Algorithmus (ABC = automatic baseline correction) automatisch berechnet.

Eine diskontinuierliche Untergrundstörung, z. B. durch Linienüberlagerung mit einem Matrixelement kann mit Hilfe von Korrekturspektren minimiert werden (→ "Spektrale Störungen beseitigen – Karte Spektrale Korrekturen" S. 93).





Fenster Spektren bearbeiten / Auswertung

Übersicht der Elemente zur Peakauswertung und Untergrundkorrektur

Die Schaltflächen zur Spektrenansicht, einige Wertausgaben sowie die Auswahl der Probeneinzelwerte sind im Abschnitt "Spektren anzeigen – Karte Ansicht" S. 88 beschrieben.

Option/ Schaltfläche	Beschreibung
Peakauswertung	Anzahl Pixel für die Peakauswertung einstellen.
1	Das Messsignal wird nur am Pixel ermittelt, auf dem der Peakschwerpunkt liegt (→ "Spektren anzeigen – Karte Ansicht " S. 88).
Wert > 1	Anzahl Pixel, über welche das Messsignal ermittelt wird. Die Einzelsignale der Pixel werden summiert. Das Ergebnis ist daher größer als das Peakmaximum. Der Pixel mit dem Peakschwerpunkt liegt in der Mitte des Bereiches.
Höhe	Die Peakhöhe wird zur Auswertung herangezogen.
Benutzerdef.	Der Auswertebereich wird vom Nutzer festgelegt. Diese Option wird bevorzugt für die Auswertung von Dubletten verwendet. Nach einem Klick auf ☰ aktivieren Sie in der Liste alle Pixel, die zur Auswertung herangezogen werden.

Anpassung	<p>Art der Untergrundkorrektur wählen:</p> <p>dynamisch Die Untergrundkorrektur wird automatisch mit einem mathematischen Algorithmus berechnet. Weitere Einstellungen sind bei dieser Option nicht nötig.</p> <p>statisch Die Untergrundkorrektur-Punkte werden manuell per Mausclick im Spektrum gesetzt. Für die Korrekturfunktion ist zusätzlich der Polynomgrad auszuwählen.</p>
	<p>Bei statischer Anpassung die Untergrundkorrektur-Punkte setzen bzw. löschen.</p> <p>Beim Überfahren der Spektrengrafik mit der Maus wird ein Kreuz angezeigt. Ein Klick auf  öffnet die Funktionsliste:</p> <p>Untergrundkorrektur-Punkte setzen Setzen Sie per Mausclick die Korrekturpunkte an die gewünschte Wellenlänge auf das Spektrum. Wenn Sie mit gedrückter Maustaste über einen Bereich fahren, markieren Sie den gesamten Bereich.</p> <p>Untergrundkorrektur-Punkte löschen Ein Klick auf einen bereits ausgewählten Punkt löscht den betreffenden Untergrundkorrektur-Punkt. Durch Ziehen mit der Maus können Bereiche gelöscht werden.</p> <p>Alle Untergrundkorrektur-Punkte löschen Löscht alle ausgewählten Punkte.</p>
UGK-Punkte: [Alle löschen]	Alle manuell gesetzten Untergrundkorrektur-Punkte löschen.
Tabelle	Anzeige der manuell gesetzten Untergrundkorrektur-Punkte.
Polynomgrad	<p>Polynomgrad für die Regression der Untergrundkorrektur-Kurve wählen.</p> <p>Bei der Option auto wird die Regression automatisch gewählt.</p>
UGK-Punkte markieren	Untergrundkorrektur-Punkte mit einem Quadrat markieren.
UG-korrigierte Spektren anzeigen	<p>Untergrundkorrigierte Spektren darstellen.</p> <p>Der angepasste Untergrund (grüne Linie) wird vom Probenspektrum subtrahiert. Der Untergrund entspricht damit der Nulllinie.</p>

Daten in die Methode übernehmen

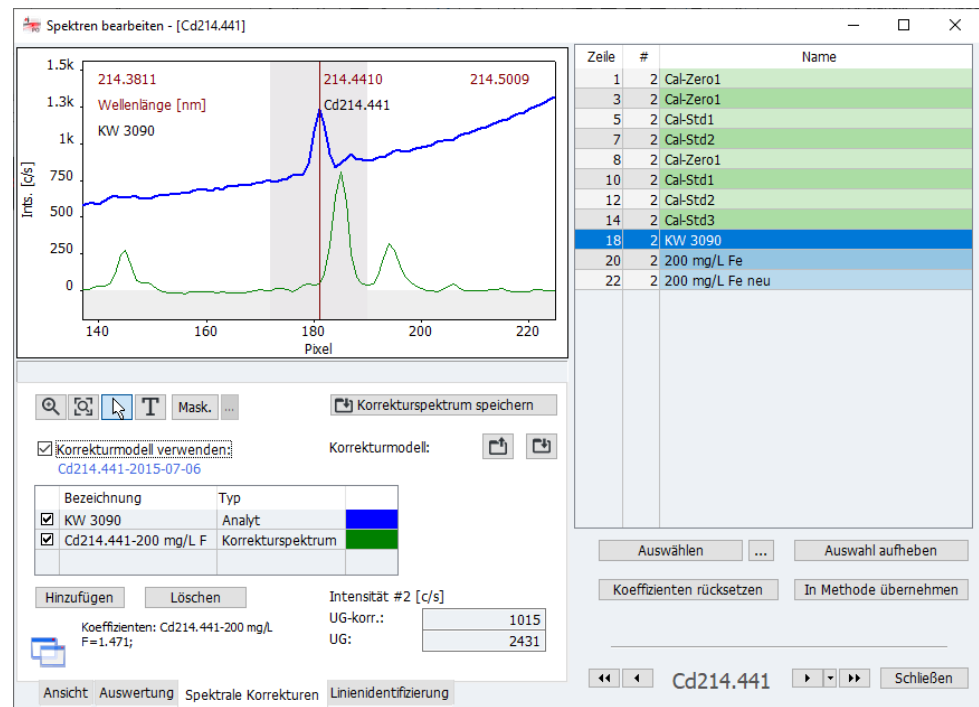
Die Einstellungen zur Peakauswertung und zur Untergrundkorrektur der ausgewählten Linie übertragen Sie mit einem Klick auf **[In Methode übernehmen]** in die aktuelle Messmethode. Die Daten werden auch im Methodenfenster auf der Karte **Auswertung** geändert.

6.10.3 Spektrale Störungen beseitigen – Karte Spektrale Korrekturen



In der Routine wird versucht, möglichst Linien für die Analyse zu wählen, die ungestört sind und/oder einen einfach zu korrigierenden Untergrund besitzen. Sollte das nicht möglich sein, können mit Hilfe von Korrekturspektren die diskontinuierlichen Störungen,

z. B. verursacht durch Linienüberlagerungen mit einem oder mehreren Matrixelementen, beseitigt werden. Die Korrekturspektren einer Matrix werden jeweils in einem Modell zusammengefasst und können dann mit der Linie in der Methode verknüpft werden.

Die Funktionen zum Speichern der einzelnen Korrekturspektren und zum Zusammenfassen des Korrekturmodells befinden sich im Fenster **Spektrale Korrekturen**.



Fenster **Spektrale Korrekturen**

Option/Schaltfläche	Beschreibung
[Korrekturspektrum speichern]	Spektrale Reinkomponenten einer Matrix als Korrekturspektren speichern.
Korrekturmodell verwenden	Wenn aktiviert, wird das Korrekturmodell auf den Analyten angewendet.
Korrekturmodell	 Das aktuelle Korrekturmodell speichern.  Ein vorhandenes Korrekturmodell laden.

In der Linientabelle werden der Analyt und die im Modell verwendeten Korrekturspektren aufgelistet. Durch Aktivieren der Kontrollkästchen werden die einzelnen Spektren in der Grafik angezeigt. Mit [Hinzufügen] wird das Korrekturmodell um weitere Spektren ergänzt. Mit [Löschen] wird das mit der Maus markierte Spektrum aus dem Modell gelöscht.

Hinweis:

Alle Korrekturspektren in der Linientabelle werden im Modell für die Berechnung herangezogen, unabhängig davon ob das Kontrollkästchen zur Anzeige aktiviert ist oder nicht. Soll ein Korrekturspektrum nicht berücksichtigt werden, muss es gelöscht werden.

6.10.3.1 Ein Korrekturmodell für spektrale Korrekturen erstellen

Für die Erstellung und Verwendung eines Korrekturmodells für eine Analyselinie müssen Sie folgende Schritte ausführen:

1. Identifizieren Sie mögliche Interferenzen.
2. Erstellen und speichern Sie die Korrekturspektren.
3. Erstellen Sie ein Korrekturmodell.
4. Übernehmen Sie die Parameter der Analyselinie mit Korrekturmodell in die Methode.

Schritt 1: Interferenzen identifizieren

- ▶ Erstellen Sie eine Methode mit der Analyselinie.
- ▶ Messen Sie den Analyt in der Matrix und laden Sie das Spektrum in das Fenster **Spektren bearbeiten** (Doppelklick auf die Probenzeile im Hauptfenster).
- ▶ Identifizieren Sie im Fenster **Spektren bearbeiten / Linienidentifizierung** die möglichen Störlinien.

Schritt 2: Korrekturspektren messen und speichern

- ▶ Fügen Sie der Sequenz die Messung der störenden Matrixkomponenten, die spektrale Überlagerung verursachen, hinzu und messen Sie diese Komponenten in Einzellementlösungen.


Hinweis:

Die Konzentrationen der Matrixkomponenten müssen nicht mit denen in den Proben übereinstimmen, sondern müssen lediglich so hoch sein, dass die Spektren deutliche Intensitätswerte aufweisen. Für eine richtige Spektrenkorrektur messen Sie jeweils nur eine Komponente als Reinsubstanz.

- ▶ Laden Sie ein Spektrum einer Matrixkomponente in das Fenster **Spektren bearbeiten / Spektrale Korrekturen**.
- ▶ Klicken Sie auf **[Korrekturspektrum speichern]**.
Das Datenbankfenster zum Speichern der Korrekturspektren erscheint.
- ▶ Vergeben Sie einen Namen und schließen Sie den Vorgang mit **[Speichern]** ab.
- ▶ Speichern Sie auf diese Weise die Spektren der anderen Matrixkomponenten.

Schritt 3: Korrekturmodell erstellen

- ▶ Laden Sie erneut das Spektrum des Analyten in der Matrix.
- ▶ Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Korrekturmodell verwenden**.
- ▶ Öffnen Sie mit der **[Hinzufügen]** die Auswahl der bereits abgespeicherten Korrekturspektren.
- ▶ Markieren Sie ein Korrekturspektrum in der Liste und klicken Sie auf **[Laden]**.
- ▶ Fügen Sie auf diese Weise alle Korrekturspektren hinzu.
- ▶ Überprüfen Sie in der Spektrenansicht, ob das resultierende Probenspektrum nun frei von Überlagerungen ist.

- ▶ Mit der Schaltfläche **[Mask.]** können Sie mit gedrückter Maustaste Bereiche maskieren, die nicht zur Berechnung des Korrekturmodells herangezogen werden sollen.
Standardmäßig ist bereits der Bereich der Analysenlinie (± 9 Pixel) maskiert. Eine Maskierung weiterer Bereiche kann notwendig werden, wenn zur Aufnahme keine Reinsubstanzen zur Verfügung standen und diese Verunreinigungen in veränderlichen Anteilen vorkommen können.
- ▶ Zum Speichern des Korrekturmodells klicken Sie auf  und vergeben Sie einen Namen für das Modell. Schließen Sie den Vorgang mit **[Speichern]** ab.
- ▶ Übertragen Sie die Parameter der Analysenlinie mit dem Korrekturmodell mit **[In Methode übernehmen]** in die aktuelle Methode.
 - ✓ Im Fenster **Methode / Auswertung** ist die Analysenlinie in der Spalte **Korrektur** mit **LSM** (Least Square Model) gekennzeichnet.

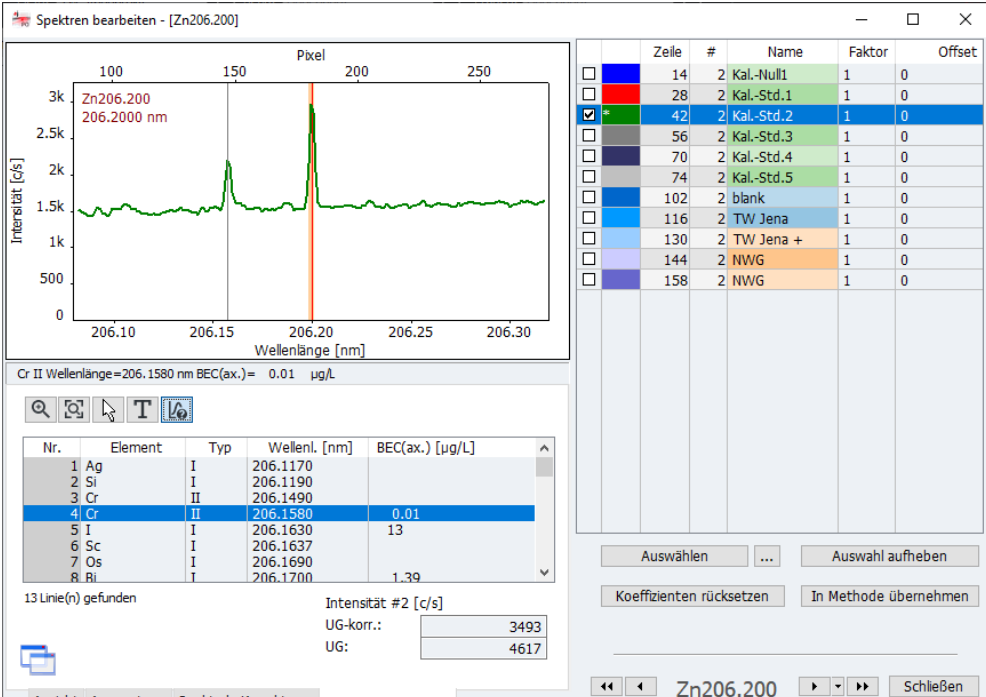
Schritt 4: Analysenlinie mit Korrekturmodell in die Methode übernehmen

Nach dem Speichern der Methode werden die zukünftigen Messungen mit dieser Methode mit dem erstellten Korrekturmodell durchgeführt. Bereits erfolgte Messungen können mit der neuen Methodenversion nachberechnet werden, sodass eine Wiederholung der Messung nicht nötig ist.

Die spektralen Korrekturmodelle und Korrekturspektren werden mit den Ergebnisdaten gespeichert. Werden die Ergebnisdaten auf einen anderen Computer übertragen, auf welchem die Korrekturmodelle nicht gespeichert sind, so werden die Modelle nach Rückfrage importiert.

6.10.4 Linien finden – Karte Linienidentifizierung

Linien in den gemessenen Spektren werden basierend auf der Liniendatenbank identifiziert.



The screenshot shows the 'Spektrale Korrekturen' software interface. The main window displays a spectrum plot with 'Wellenlänge [nm]' on the x-axis (ranging from 206.10 to 206.30) and 'Intensität [c/s]' on the y-axis (ranging from 0 to 3k). A prominent peak is labeled 'Zn206.200' at '206.2000 nm'. Below the plot, a table lists identified lines:

Nr.	Element	Typ	Wellenl. [nm]	BEC(ax.) [µg/L]
1	Ag	I	206.1170	
2	Si	I	206.1190	
3	Cr	II	206.1490	
4	Cr	II	206.1580	0.01
5	I	I	206.1630	13
6	Sc	I	206.1637	
7	Os	I	206.1690	
8	Ri	I	206.1700	1.39


Below the table, it indicates '13 Linie(n) gefunden' and 'Intensität #2 [c/s]' with values for 'UG-korr.: 3493' and 'UG: 4617'. On the right side, there is a table of calibration standards:

Zeile	#	Name	Faktor	Offset
14	2	Kal.-Null1	1	0
28	2	Kal.-Std.1	1	0
42	2	Kal.-Std.2	1	0
56	2	Kal.-Std.3	1	0
70	2	Kal.-Std.4	1	0
74	2	Kal.-Std.5	1	0
102	2	blank	1	0
116	2	TW Jena	1	0
130	2	TW Jena +	1	0
144	2	NWG	1	0
158	2	NWG	1	0

At the bottom, there are buttons for 'Auswählen', 'Auswahl aufheben', 'Koeffizienten rücksetzen', and 'In Methode übernehmen'. The current analysis is for 'Zn206.200'.

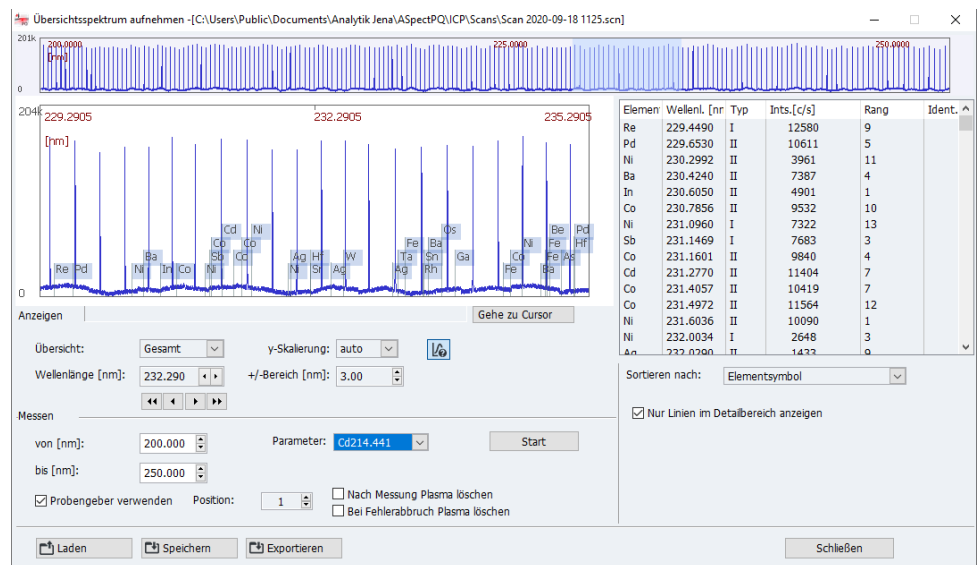
Fenster Spektren / Linien-Identifizierung

In der Tabelle unter dem Spektrum werden alle im Spektrumsabschnitt identifizierten Linien angezeigt.

- ▶ Aktivieren Sie die Schaltfläche .
- ▶ Klicken Sie auf die interessierenden Peaks im Spektrum.
Die nächste gelegene Linie wird unter dem Spektrum angezeigt und in der Tabelle markiert.
- ▶ Umgekehrt können Sie auch eine Linie in der Tabelle wählen, die dann im Spektrum angezeigt wird.

6.11 Übersichtsspektrum aufnehmen

Mit dem Menüpunkt **Methodenentwicklung | Übersichtsspektrum aufnehmen** können Sie in einem vorgegebenen Wellenlängenbereich ein Übersichtsspektrum aufnehmen.



Fenster Übersichtsspektrum

- ▶ Wählen Sie den Menüpunkt **Methodenentwicklung | Übersichtsspektrum aufnehmen**.
- ▶ Geben Sie im Bereich **Messen** den gewünschten Wellenlängenbereich (**von / bis**) ein.
- ▶ Wenn Sie eine Methode aktiviert haben, können Sie die Parameter einer Linie der Methode für den Spektren-Scan wählen. Wenn keine Methode geladen ist, werden voreingestellte Parameter verwendet.
- ▶ Stellen Sie die Probe bereit. Wenn Sie mit einem Probengeber arbeiten möchten, aktivieren Sie die Option **Probengeber verwenden** wählen Sie die Position der Probe auf dem Probengeber aus.
- ▶ Starten Sie den Scan mit **[Start]**.

- ✓ Nach Abschluss des Scans wird das Übersichtsspektrum im oberen Bereich des Fensters angezeigt.
- ▶ Wenn Sie auf einen Abschnitt im Übersichtsspektrum klicken, wird ein Detailbereich mit der gewählten Linie in der Grafik angezeigt. Die Breite des Detailbereichs stellen Sie in der Liste **+/-Bereich** ein.
- ▶ Die gefundenen Linien werden in der Tabelle auf der rechten Seite ausgegeben. Die Anzeige können Sie auf den gezeigten Spektralbereich mit der Option **Nur Linien im Detailbereich anzeigen** eingrenzen.

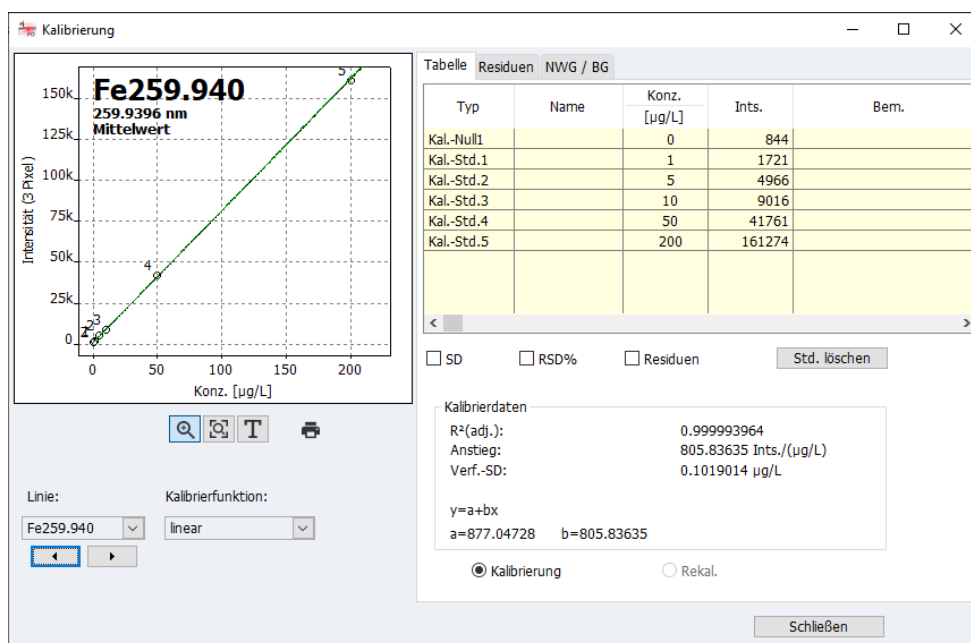
7 Kalibrierung

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

► Öffnen Sie das Fenster **Kalibrierung** mit einem Klick auf  in der Symbolleiste.

Alternativ führen Sie einen Doppelklick auf eine der Sequenzzeilen "Kalib. berechnen" aus oder wählen Sie den Menüpunkt **Methodenentwicklung | Kalibrierung**.

Das Fenster **Kalibrierung** zeigt die unter Berücksichtigung der Kurvenparameter berechnete Kalibrierkurve.



Fenster Kalibrierung

Das Fenster enthält für jede in der Sequenz vereinbarten Analysenlinien

- grafische Darstellung der Kalibrierkurve
- Kalibriertabelle
- Parameter
- Residuen
- Nachweis- und Bestimmungsgrenze.

Linie auswählen

Im Listenfeld **Linie** wählen Sie die Analysenlinie für die Anzeige der Kalibrierung aus. Mit den Pfeiltasten unter der Liste wechseln Sie zwischen den Anzeigen der einzelnen Linien.

Kalibrierfunktion wählen

In der Liste **Kalibrierfunktion** können Sie zwischen den möglichen Regressionsberechnungen der Kalibrierkurve wählen:

Kalibrieroption	Beschreibung
linear	Linearer Verlauf der Kalibrierfunktion $y = a + bx$
nichtlinear ratio.	Nichtlinearer Verlauf der Kalibrierfunktion beschrieben durch eine gebrochenrationale Funktion $y = \frac{a + bx}{1 + cx}$
nichtlinear quadr.	Nichtlinearer Verlauf der Kalibrierfunktion beschrieben durch eine quadratische Funktion $y = a + bx + cx^2$
automatisch	Für die Kalibrierung wird jeweils eine lineare und eine nichtlineare Funktion berechnet. Anschließend erfolgt ein Mandel-Test, bei welchem die Summen der quadrierten Residuen verglichen werden. Ist die Summe für die nichtlineare Funktion signifikant geringer als jene für die lineare Funktion, wird der nichtlineare Verlauf der Kalibrierkurve gewählt, anderen Falls wird der lineare Verlauf der Kalibrierkurve verwendet. Die nichtlineare Funktion wird im Fenster Optionen / Analysenablauf gewählt (→ "Optionen zum Analysenablauf". S. 150). Als Standardeinstellung ist hier die gebrochen rationale Funktion vorgesehen.

7.1 Darstellung der Kalibrierkurve

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**. Der Kalibriernullpunkt ist mit Z (Zero) gekennzeichnet.

Farbige Kennzeichnung

Messpunkte sind auf folgende Weise gekennzeichnet:

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





Die Kurven sind ebenfalls farbig markiert:

Kurvenfarbe	Bedeutung
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

Hinweis zum Prognose- bzw. Konfidenzbereich

Die Lage des Prognosebandes ist abhängig von der gewählten statistischen Sicherheit und ein Maß für die Güte der Kalibrierung, 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 (→ "Statistische Auswertungen spezifizieren – Karte Statistik" S. 47). Zur Auswahl zwischen Prognose und Konfidenzband siehe "Optionen zum Analysenablauf" S. 150.

- Kalibrierkurve vergrößern Nach einem Klick auf  kann mit gedrückter linker Maustaste ein Grafikbereich vergrößert werden.  macht die Vergrößerung wieder rückgängig.
- Notiz einfügen In die Grafik kann ein Textfeld für eine Notiz eingefügt werden.
- ▶ Klicken Sie auf .
 - ▶ Ziehen Sie mit gedrückter linker Maustaste den Rahmen für das Textfeld auf der Grafik auf.
 - ▶ Wählen Sie im geöffneten Eingabefenster unter **[Font]** den Schriftfont.
 - ▶ Geben Sie den Text ein und klicken Sie auf **[OK]**.
 - ✓ Der Text wird auf der Grafik angezeigt.
- Kalibrierkurve drucken Die Kalibrierkurve und die Kalibrierdaten werden nach einem Klick auf  auf dem Drucker ausgegeben. Weitere Einzelheiten zum Drucken sind im Abschnitt "Ergebnisdaten drucken" S. 128 beschrieben.

7.2 Anzeige der Kalibrierergebnisse

7.2.1 Kalibrierung – Karte Tabelle

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

Wurden die Standards mehrfach gemessen und eine statistische Auswertung in der Methode definiert, können durch Aktivieren der entsprechenden Kontrollfelder die Standardabweichung (SD) und die relative Standardabweichung (RSD%) bzw. 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.

Unter der Messwerttabelle erfolgt die Anzeige der Kalibrierdaten, soweit sie sinnvoll berechenbar sind:

Parameter	Bedeutung
R^2 (adj.)	Bestimmtheitsmaß
Anstieg	Anstieg der Kalibrierfunktion
Verf.-SD	Verfahrensstandardabweichung
BEC	Der BEC-Wert (background equivalent concentration) ist die Konzentration des Analyten, die eine dem Untergrund äquivalente Intensität erzeugt. Ein kleinerer Wert entspricht damit einer höheren Empfindlichkeit.

7.2.2 Kalibrierung – Karte Residuen

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

7.2.3 Kalibrierung – Karte NWG/BG

Die Nachweis- und Bestimmungsgrenzen des ICP-OES Gerätes können auf Basis der aktuellen Kalibrierergebnisse bestimmt werden.

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

Parameter	Bedeutung
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	nur bei Leerwert-Verfahren gemessene Standardabweichung des Leerwerts (IDL-Probe)

Mit **[Berechnen]** starten Sie die Berechnung der Nachweis- und Bestimmungsgrenzen.

Kalibrierkurven-Verfahren

Für die Berechnung von Nachweis- und Bestimmungsgrenze nach dem Kalibrierkurvenverfahren ist eine lineare Kalibrierkurve erforderlich. Die Kalibrierung sollte im unteren Konzentrationsbereich erfolgen. Für das Rechenergebnis wesentliche Parameter der Kalibrierung 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 (→ "Proben und Aktionsfolgen für die Sequenz zusammenstellen" S. 60).


Für das Leerwert-Verfahren wird folgenden Berechnungsvorschrift verwendet:

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

7.3 Kalibrierkurve verändern

Eine vorhandene Kalibrierkurve können Sie modifizieren:

- Verwendete Kalibrierfunktion wechseln
 - Standards aktivieren/deaktivieren
 - Einen gemessenen Standard ersetzen
-
- ▶ 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.
 - ▶ Die geänderten Kalibrierparameter werden auf die Ergebnisse angewendet, wenn Sie den Menüpunkt **Routine | Neuberechnen** aufrufen oder in der Werkzeugleiste auf  klicken (→ "Analyseergebnisse Neuberechnen" S. 75).
 - ▶ Ein Standard kann ebenfalls nachgemessen und die Ergebnisse Neuberechnet werden (→ "Analyseergebnisse Neuberechnen" S. 75).

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 definiert, die in einer Sequenz mitgeführt werden.

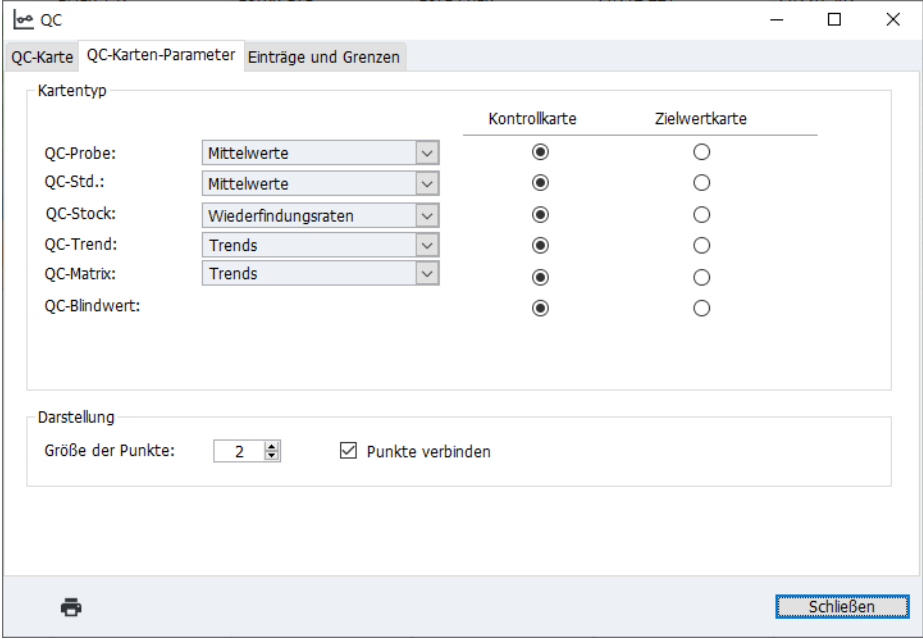
Die Auswertung wird auf Qualitätskontrollkarten (QC-Karten) ausgegeben und mit der Methode gespeichert. Mit jedem Aufruf der Methode stehen die QC-Karten zur Verfügung und werden beim nächsten Messstart aktualisiert.

Den Typ der QC-Proben und deren Parameter vereinbaren Sie im Fenster **Methode / QCS** (→ "Qualitätskontrollproben für QC-Karten spezifizieren – Karte QCS" S. 49) und in der Sequenz das Mitführen der QC-Probe (→ "Proben und Aktionsfolgen für die Sequenz zusammenstellen" S. 60).

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.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **QC** mit einem Klick auf  in der Symbolleiste oder wählen Sie den Menüpunkt **Methodenentwicklung | QC**.

8.1 Parameter der QC-Karten



Kartentyp		Kontrollkarte	Zielwertkarte
QC-Probe:	Mittelwerte	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>
QC-Std.:	Mittelwerte	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>
QC-Stock:	Wiederfindungsraten	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>
QC-Trend:	Trends	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>
QC-Matrix:	Trends	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>
QC-Blindwert:		<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>

Darstellung

Größe der Punkte: 2 Punkte verbinden

Schließen

Fenster QC / QC-Karten-Parameter

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-Standard	Mittelwerte (normiert) – nicht für die Zielwertkarte Wiederfindungsraten
	QC-Stock	Wiederfindungsraten
	QC-Trend	Trends
	QC-Matrix	Spannweiten – nicht für die Zielwertkarte Präzisionen – nicht für die Zielwertkarte
	Blindwert	Keine Auswahl vorgesehen. Es wird die Intensität der Blindwerte angezeigt.

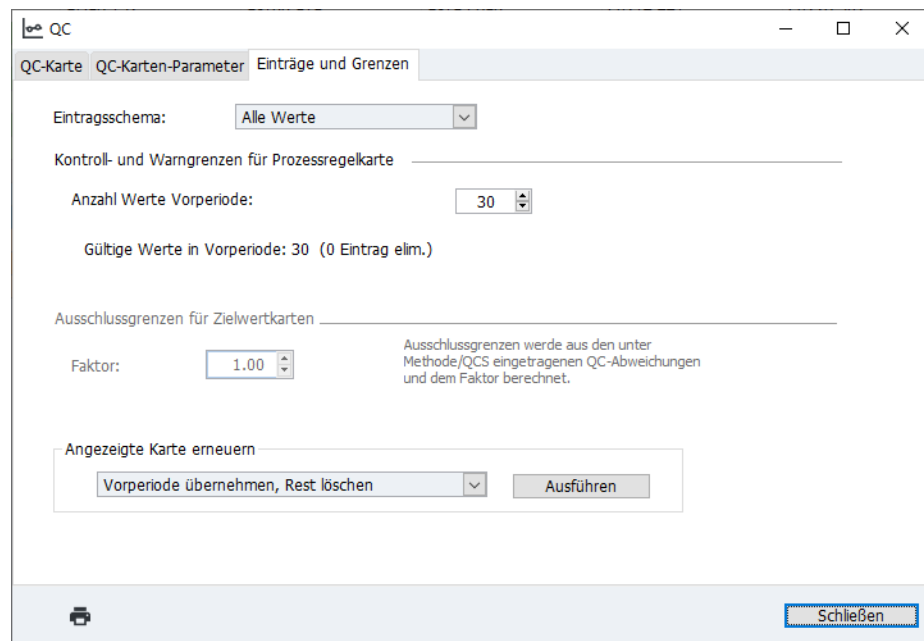
Für den Kartentyp Kontrollkarte (Prozessregelkarte) werden die Zielparameter und die Kontroll- (K) und Warngrenzen (W) aus dem Mittelwert und der Streuung der Werte der Vorperiode ermittelt. Für den Typ Zielwertkarte werden die Zielgrößen und Ausschlußgrenzen aus dem spezifizierten Erwartungswerten und Grenzen der Qualitätskontrollproben ermittelt (→ "Qualitätskontrollproben für QC-Karten spezifizieren – Karte QCS" S. 49).

Darstellung 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.

8.2 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.



Fenster QC/Einträge und Grenzen

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>Hinweis 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 der Vorperiode	Nur Kontrollkarte / Prozessregelkarte: 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.
Ausschlussgrenzen für Zielwertkarten / Faktor	Nur Zielwertkarte: Die Ausschlussgrenzen werden aus den für die Qualitätskontrollproben spezifizierten Grenzen multipliziert mit dem Faktor (Voreinstellung ist 1) berechnet.

Karten erneuern

Treffen Sie eine Festlegung, wie mit (fast) vollen Karten weiter verfahren wird. Wählen Sie dazu eine der Optionen aus der Liste aus:

Option	Beschreibung
Vorperiode übernehmen, Rest löschen	Nur Kontrollkarte: Die Vorperiode wird übernommen und bildet die Vorperiode der neuen Karte.


Letzte Werte -> neue Vorperiode	Nur Kontrollkarte: 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. Nur Kontrollkarte: Neue Messwerte füllen zuerst die Vorperiode.

Mit einem Klick auf **[Ausführen]** erneuern Sie die QC-Karten entsprechend oben gewählter Option.

8.3 QC-Karten anzeigen

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

Optionen/Anzeigen

Optionen/Anzeigen	Beschreibung
Typ	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
Gespeicherte Werte	Gesamtanzahl der Einträge auf der aktuellen QC-Karte und Datum des ersten und letzten Wertes
x(max)	Anzahl Einträge einstellen, welche in der Grafik dargestellt werden sollen.
y-Skalierung	EINTRÄGE Maximum der y-Achse wird nach dem höchsten Eintrag skaliert. KONTROLLGRENZEN Maximum der y-Achse wird nach der Kontrollgrenze bzw. Ausschlussgrenze skaliert.
	QC-Grafik einschließlich der alphanumerischen Daten und Messwerte drucken.

Grafikbereich

Farbe/Markierung	Bedeutung
Gelber Bereich	Nur Kontrollkarte: Vorperiode
Hellgraue waagerechte Linie	Nur Kontrollkarte: Mittelwert, berechnet aus der Vorperiode Nur Zielwertkarte: Zielwert
Rote waagerechte Linien	Nur Kontrollkarte: Obere und untere Kontrollgrenze (K), berechnet aus der Vorperiode (3 Sigma) Nur Zielwertkarte: Obere und untere Ausschlussgrenze (AO, AU) entsprechend den Grenzen der Qualitätskontrollprobe
Grüne waagerechte Linien	Nur Kontrollkarte: Berechnete Warngrenzen (W; 2 Sigma)

kleine Kreise	Messpunkte (Schwarz: aktiver Messpunkt; Grau: inaktiver Messpunkt)
----------------------	--

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 / Uhr-zeit	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

9 Gerät und Zubehör steuern und kontrollieren

9.1 Spektrometer

Das Fenster **Spektrometer** dient zur Überprüfung der Spektrometerfunktionen und Einstellung der Spektrometerparameter.

Folgende Daten können eingestellt bzw. abgefragt werden:

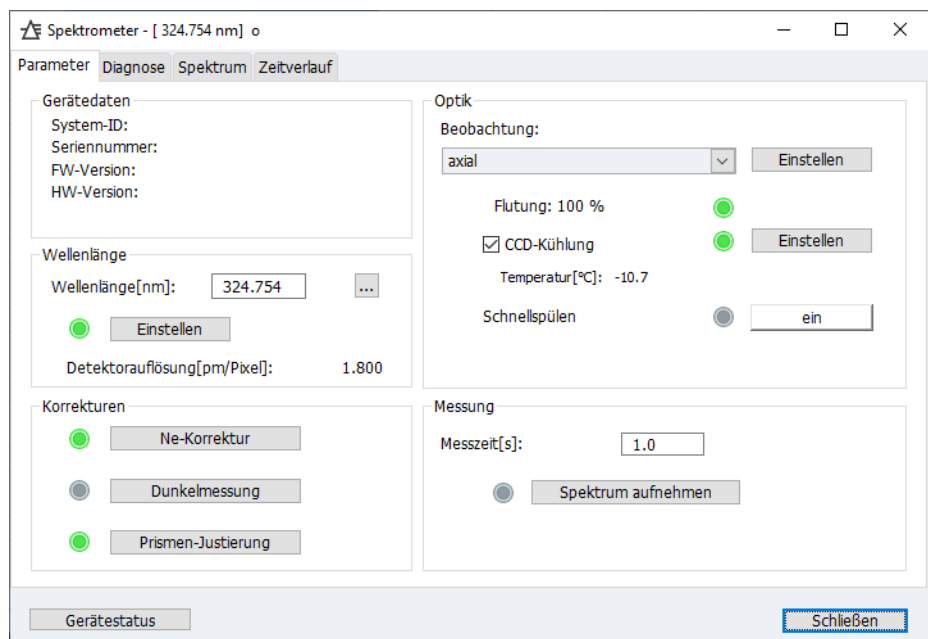
- Gerätedaten
 - Anzeige der Ausleseparameter des Detektors
 - Messungen für die Geräteoptimierung starten
- Öffnen Sie das Fenster **Spektrometer** mit einem Klick auf  oder wählen Sie den Menüpunkt **Methodenentwicklung | Spektrometer**.

Mit **[Gerätstatus]** wird eine Grafik des Gerätes angezeigt, auf der Meldungen der Sicherheitssensoren des ausgegeben werden. Treten Probleme mit dem Plasma auf, können Sie hier Fehlermeldungen der Sensoren einsehen.

9.1.1 Spektrometerparameter einstellen und Funktionen testen


Das Fenster **Spektrometer / Parameter** beinhaltet folgende Funktionen:

- Grundlegende Gerätefunktionen kontrollieren
- Automatische Korrekturen am optischen System starten
- Eine Testmessung an einer ausgewählten Wellenlänge starten




Fenster Spektrometer/Parameter

Elemente des Fensters
Spektrometer / Parameter:

Parameter	Beschreibung
Gerätedaten	In der Gruppe Gerätedaten werden verschiedene Service- und Versionsnummern angezeigt, die für den Geräteservice benötigt werden.
Wellenlänge	Im Feld Wellenlänge wird die ausgewählte Wellenlänge angezeigt. Eine Wellenlänge kann nach einem Klick auf  im Fenster Element/Linie auswählen eingestellt werden (→ "Analysenlinien in die Linientabelle einfügen" S. 29). Mit [Einstellen] wird das Spektrometer auf die gewählte Wellenlänge gefahren.
[Ne-Korrektur]	Wellenlängenkalibrierung des Detektors ausführen.
[Dunkelmessung]	Dunkelsignal korrigieren.
[Prismen-Justierung]	Abbildung der Dispersionsordnung auf den Detektor durch Prismenjustierung optimieren (Justierung auf Energiemaximum).
Beobachtung	Beobachtungsrichtung des Plasmas im Listenfeld wählen (axial – von oben, radial – von der der Seite).
CCD-Kühlung	Wenn das Kontrollkästchen aktiviert ist, kann mit [Einstellen] die Kühlung des CCD-Detektors gestartet werden. Bei Deaktivierung des Kontrollkästchens wird die Kühlung gestoppt. Die CCD-Kühlung wird automatisch mit dem Zünden des Plasmas gestartet. Eine manuelle Steuerung ist nur in Ausnahmefällen, z. B. nach einer Fehlermeldung beim automatischen Starten, notwendig. Im Feld Temperatur wird die aktuelle Temperatur des CCD-Detektors angezeigt.
[Schnellspülen]	Spektrometer mit erhöhtem Argonfluss spülen.
Messung	Für den Start einer Messung an der ausgewählten Wellenlänge ist unter Messung die Gesamtmesszeit einzugeben. Mit [Spektrum aufnehmen] wird die Messung gestartet. Für die Messung werden die Voreinstellungen für das Plasma verwendet. Die Probe muss manuell zugeführt werden. Der Probengeber wird nicht verwendet.

Spektrumpic an einer
ausgewählten Analysenlinie
messen

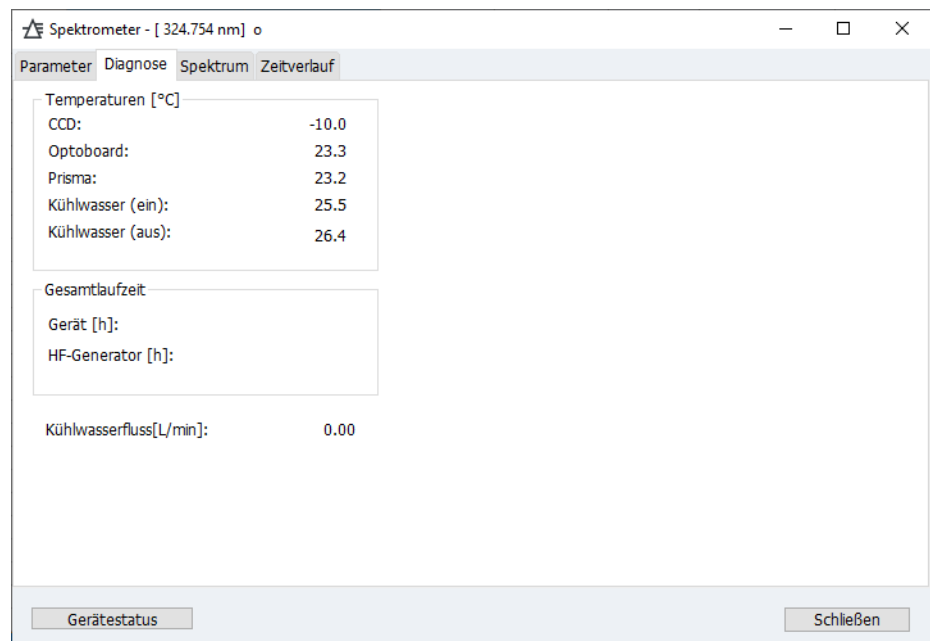
Eine Testmessung an einer ausgewählten Analysenlinie starten Sie im Fenster **Spektrometer / Parameter**.

- ▶ Zünden Sie das Plasma.
- ▶ Öffnen Sie im Bereich **Wellenlänge** mit  das Fenster **Element/Linie auswählen** und stellen Sie die gewünschte Linie ein.
Alternativ geben Sie direkt in das Eingabefeld **Wellenlänge** den Wert ein.
- ▶ Fahren Sie mit **[Einstellen]** das Spektrometer auf die gewünschte Wellenlänge.
Ist die Einstellung erfolgreich beendet, erscheint die Markierung neben der Einstellung grün.
- ▶ Starten Sie die Dunkelstrommessung mit **[Dunkelmessung]**.
- ▶ Wählen Sie die für die anschließende Messung die Beobachtungsrichtung **axial** oder **radial**.
- ▶ Stellen Sie die **Messzeit [s]** ein.

- ▶ Stellen Sie die Probe bereit und tauchen Sie den Ansaugschlauch in die Probe.
- ▶ Warten Sie die Zeitdauer ab, bis die Probe stabil zerstäubt wird. Starten Sie die Messung mit **[Spektrum aufnehmen]**.
 - ✓ Die Messung erfolgt und die Messergebnisse werden im Fenster **Spektren bearbeiten** angezeigt (→ "Intensitätsspektren anzeigen und bearbeiten (Fenster Spektren bearbeiten)" S. 87).

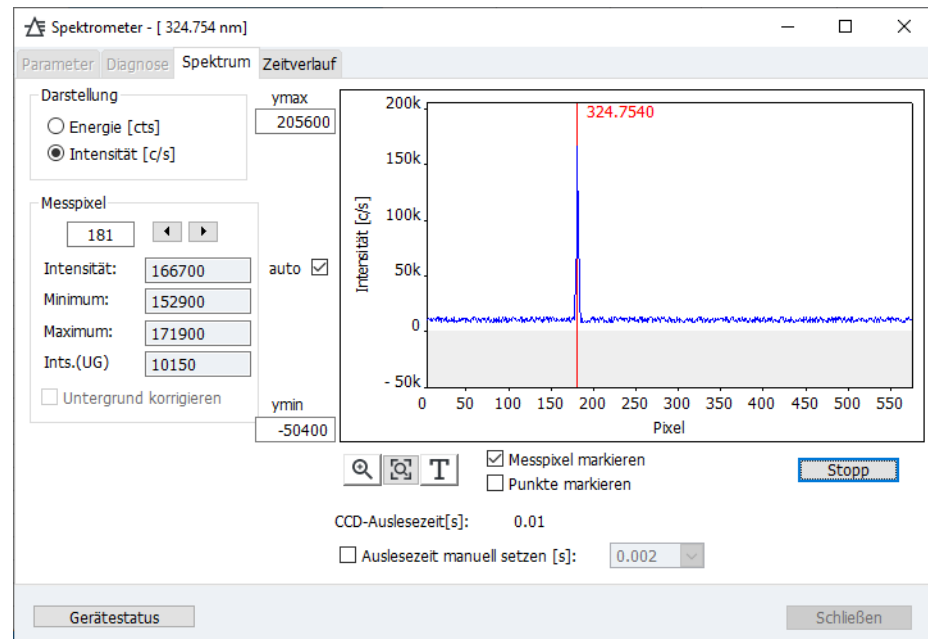
9.1.2 Diagnose von Geräteparametern

Im Fenster **Spektrometer / Diagnose** werden Service relevante Parameter angezeigt.



Fenster Spektrometer/Diagnose

9.1.3 Peakmessung kontinuierlich ausführen



Fenster Spektrometer / Spektrum

Im Fenster **Spektrometer / Spektrum** starten Sie eine kontinuierliche Messung an einer vorgegebenen Wellenlänge.



Die kontinuierlichen Messungen werden im Service-Fall für die Geräteoptimierung verwendet.

- ▶ Stellen Sie im Fenster **Spektrometer / Parameter** die Wellenlänge und die Beobachtungsrichtung ein.
- ▶ Wechseln Sie auf die Karte **Spektrum**.
- ▶ Starten Sie die kontinuierliche Messung mit **[Start]**.

Die Messwerte werden mit den eingestellten Parametern aufgenommen und kontinuierlich bis zum Betätigen von **[Stopp]** wiederholt.

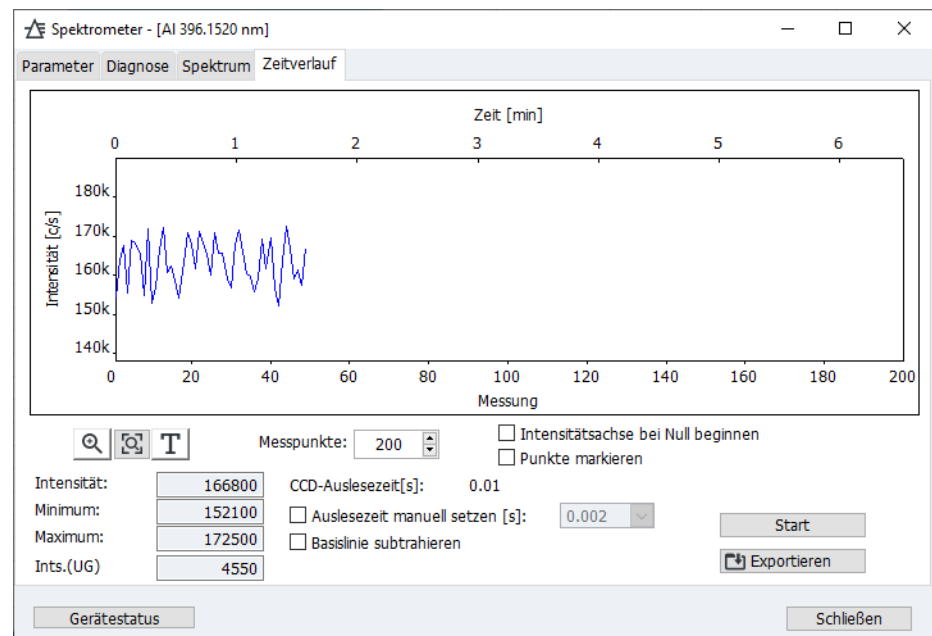
Grafische Darstellung und digitale Auswertung

Option	Beschreibung
Darstellung	Optionen für die Darstellung des Spektrums:
Energie	Anzeige des Energiespektrums, Maßeinheit: cts (Counts) Um möglichst rauscharme Messergebnisse zu erhalten, werden die Integrationszeiten für den Detektor so gewählt, dass das Energiemaximum bei ca. 30000 cts liegt.
Intensität	Darstellung der Energie pro Zeiteinheit, Maßeinheit: cts/s (Counts pro Sekunde) An Hand der Intensität können verschiedene Peaks unabhängig von der Integrationszeit verglichen werden.

Messpixel	Auswahl des Pixels, dessen Werte fortlaufend im Feld Energie bzw. Intensität angezeigt wird. In den Feldern Maximum und Minimum werden die entsprechenden Ergebnisse der kontinuierlichen Messung angezeigt.
Messpixel markieren	Den eingestellten MESSPIXEL in der Grafik durch eine senkrechte rote Linie markieren.
Punkte markieren	Messwerte für jeden Pixel in der Grafik durch einen Punkt markieren.
Auslesezeit manuell setzen	Auslesezeit für den CCD-Detektor aus dem Listenfeld auswählen. Längere Auslesezeiten führen zu höheren Energiewerten. Die Voreinstellung für die Auslesezeit des CCD-Detektors beträgt 0,01 s.
Skalieren der Grafik	Werte für Start- und Endpunkt der Ordinate in den Eingabefeldern an den Achsen direkt eingeben. Alternativ nach Aktivieren des Zoom-Modus  den anzuzeigenden Bereich mit gedrückter linker Maustaste auswählen (→ "Häufig verwendete Bedienelemente" S. 15). Skalierung mit Aktivieren der Option auto oder einem Klick auf  rückgängig machen.

9.1.4 Signalverlauf aufzeichnen



Im Fenster **Spektrometer / Zeitverlauf** zeichnen Sie den Signalverlauf der Intensität für die aktuell im Spektrometer eingestellte Wellenlänge über eine ausgewählte Anzahl Messpunkte auf.



Fenster Spektrometer / Zeitverlauf


Neben der grafischen Darstellung werden die digitalen Werte der aktuellen Intensität, das erreichte Intensitätsmaximum und -minimum der Intensität sowie die Intensität des Untergrundes ausgegeben.

Folgende Parameter können Sie für die Aufzeichnung des Signalverlaufs einstellen:

Option	Beschreibung
Skalierung	Nach Aktivieren des Zoom-Modus  den anzuzeigenden Bereich mit gedrückter linker Maustaste auswählen (→ "Häufig verwendete Bedienelemente" S. 15). Skalierung mit einem Klick auf  rückgängig machen.
Intensitätsachse bei Null beginnen	Die Skalierung der y-Achse nicht automatisch einstellen, sondern bei "0" beginnen lassen.
Messpunkte	Anzahl Messpunkte aus der Liste wählen.
Punkte markieren	Messpunkte werden in der Grafik mit einem Punkt markiert.
Auslesezeit manuell setzen	Auslesezeit des CCD-Detektors aus dem Listenfeld wählen.
Basislinie subtrahieren	Untergrundkorrigierte Intensitätswerte werden angezeigt.

9.2 Plasma

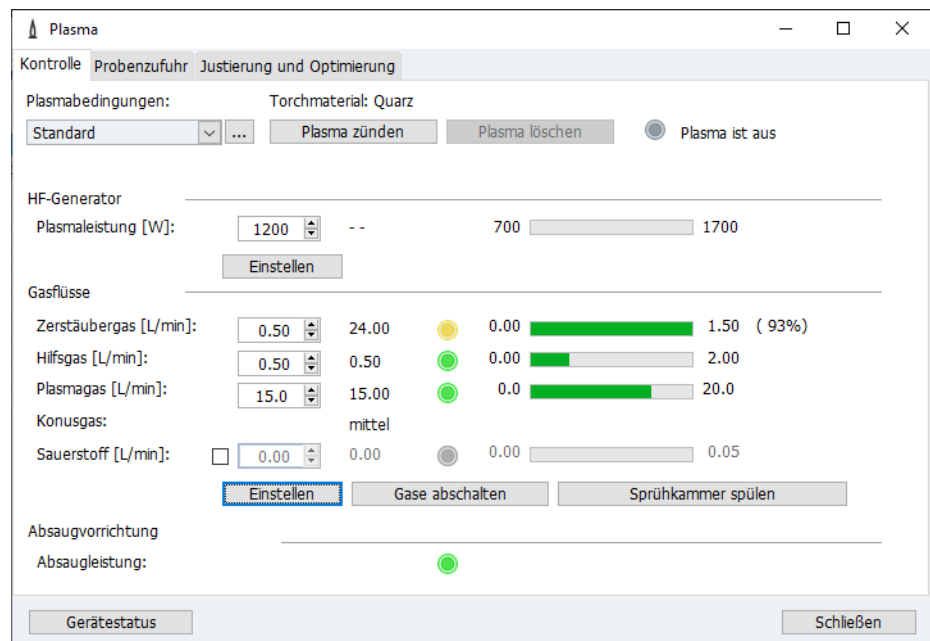
Das Fenster **Plasma** beinhaltet folgende Funktionen:

- Plasma zünden/löschen
- Kontrolle des HF-Generators
- Einstellung der Gasflüsse
- Kontrolle der Pumpe des Analysators
- Justierung der Transferoptik
- Automatische Optimierung von Zerstäubergasfluss und Plasmaleistung
- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Plasma** mit einem Klick auf  oder wählen Sie den Menüpunkt **Methodenentwicklung | Plasma**.

Mit **[Gerätestatus]** wird eine Grafik des Gerätes angezeigt, auf der Meldungen der Sicherheitssensoren des ICP-OES Gerätes ausgegeben werden. Treten Probleme mit dem Plasma auf, können Sie hier Fehlermeldungen der Sensoren einsehen.

9.2.1 Plasma zünden und Plasmabedingungen einstellen

Im Fenster **Plasma / Kontrolle** zünden/löschen Sie das Plasma und stellen die Gasflüsse im Gerät ein.



Fenster Plasma / Kontrolle

Funktionen im Fenster
Plasma / Kontrolle

Option	Beschreibung										
Plasmabedingungen	Plasmabedingungen (Plasmaleistung und Gasflüsse) auswählen.										
[Plasma zünden] / [Plasma löschen]	Plasma zünden und löschen, wenn das ICP-OES Gerät vorbereitet ist (→ "Plasma zünden/Plasma löschen" S. 69).										
HF-Generator	Effektive Plasmaleistung einstellen. Die Plasmaleistung definiert die Plasmatemperatur. Über die Firmware des Gerätes wird der Strom des Generators so geregelt, dass die effektive Plasmaleistung erreicht wird.										
Gasflüsse	Gasflüsse einschalten und einstellen. <table border="0" style="width: 100%;"> <tr> <td style="vertical-align: top;">Plasmagas</td> <td>Das Plasmagas strömt am äußeren Rohr entlang und dient zur Erzeugung des Plasmas.</td> </tr> <tr> <td style="vertical-align: top;">Zerstäubergas</td> <td>Das Zerstäubergas zerstäubt die Probe und transportiert das Probenaerosol in das Plasma. Es ist am Zerstäuber angeschlossen. Der Prozentwert in der Zeile des Zerstäubergases gibt Auskunft, wie durchlässig/sauber der Zerstäuber ist (siehe unten)</td> </tr> <tr> <td style="vertical-align: top;">Hilfsgas</td> <td>Das Hilfsgas drückt das Plasma vom Injektor weg und strömt zwischen inneren Rohr und Injektor.</td> </tr> <tr> <td style="vertical-align: top;">Konusgas</td> <td>Das Konusgas entfernt den "kalten" Plasmaweiß, um Interferenzen aufgrund von Rekombination im Plasma in der axialen Beobachtungsrichtung zu beseitigen. Gleichzeitig unterstützt das Konusgas die Kühlung des Konus.</td> </tr> <tr> <td style="vertical-align: top;">Sauerstoff</td> <td>Sauerstoff kann als Zusatzgas bei ausgewählten Applikationen dem Zerstäubergas zugesetzt werden. Der Sauerstofffluss muss mit</td> </tr> </table>	Plasmagas	Das Plasmagas strömt am äußeren Rohr entlang und dient zur Erzeugung des Plasmas.	Zerstäubergas	Das Zerstäubergas zerstäubt die Probe und transportiert das Probenaerosol in das Plasma. Es ist am Zerstäuber angeschlossen. Der Prozentwert in der Zeile des Zerstäubergases gibt Auskunft, wie durchlässig/sauber der Zerstäuber ist (siehe unten)	Hilfsgas	Das Hilfsgas drückt das Plasma vom Injektor weg und strömt zwischen inneren Rohr und Injektor.	Konusgas	Das Konusgas entfernt den "kalten" Plasmaweiß, um Interferenzen aufgrund von Rekombination im Plasma in der axialen Beobachtungsrichtung zu beseitigen. Gleichzeitig unterstützt das Konusgas die Kühlung des Konus.	Sauerstoff	Sauerstoff kann als Zusatzgas bei ausgewählten Applikationen dem Zerstäubergas zugesetzt werden. Der Sauerstofffluss muss mit
Plasmagas	Das Plasmagas strömt am äußeren Rohr entlang und dient zur Erzeugung des Plasmas.										
Zerstäubergas	Das Zerstäubergas zerstäubt die Probe und transportiert das Probenaerosol in das Plasma. Es ist am Zerstäuber angeschlossen. Der Prozentwert in der Zeile des Zerstäubergases gibt Auskunft, wie durchlässig/sauber der Zerstäuber ist (siehe unten)										
Hilfsgas	Das Hilfsgas drückt das Plasma vom Injektor weg und strömt zwischen inneren Rohr und Injektor.										
Konusgas	Das Konusgas entfernt den "kalten" Plasmaweiß, um Interferenzen aufgrund von Rekombination im Plasma in der axialen Beobachtungsrichtung zu beseitigen. Gleichzeitig unterstützt das Konusgas die Kühlung des Konus.										
Sauerstoff	Sauerstoff kann als Zusatzgas bei ausgewählten Applikationen dem Zerstäubergas zugesetzt werden. Der Sauerstofffluss muss mit										

	dem Kontrollkästchen vor der Gaseinstellung aktiviert werden, bevor er geändert werden kann.
[Gase abschalten]	Alle Gasventile schließen.
[Sprühkammer spülen]	Das Zerstäubergas wird 1 Minute eingeschaltet, um Luft aus der Sprühkammer auszutreiben. Dadurch wird das Zünden des Plasmas nach einer Betriebsunterbrechung erleichtert. Währenddessen wird ein Countdown angezeigt.
Absaugleistung	Ein Sicherheitskreis überprüft, ob die Leistung des angeschlossenen Abzugs für den Betrieb des ICP-OES Gerätes ausreichend ist. Ist dies der Fall, so leuchtet die Anzeigelampe grün.

Mit den Schaltflächen **[Einstellen]** stellen Sie die geänderten Parameter (Plasmaleistung und Gasflüsse) am ICP-OES Gerät ein.

Zerstäuberfunktion beurteilen

Der Zerstäuber muss gereinigt werden, wenn er sich durch Probenpartikel in der Probe oder durch hohe Salzlasten in der Probe zugesetzt hat. Ein Indiz dafür, dass sich der Zerstäuber zusetzt, ist ein erhöhter Druck des Zerstäubergases.

Vergleichen Sie den aktuellen Prozentwert (Druck) des Parameters **Zerstäubergas** mit dem Wert der nach Einbau des neuen oder gereinigten Zerstäubers erreicht wurde.

Reinigen Sie den Zerstäuber wie in der Betriebsanleitung des ICP-OES Gerätes beschrieben, wenn der Prozentwert stark angestiegen ist (um mehr als die Hälfte des Ausgangswertes), spätestens jedoch bei einem Wert von 75 %.

Plasmabedingungen auswählen

Die Liste **Plasmabedingungen** enthält gespeicherte Plasmaparameter für unterschiedliche Probenmatrices und, wenn eine Methode geladen ist, die linienspezifischen Parameter der Methode.

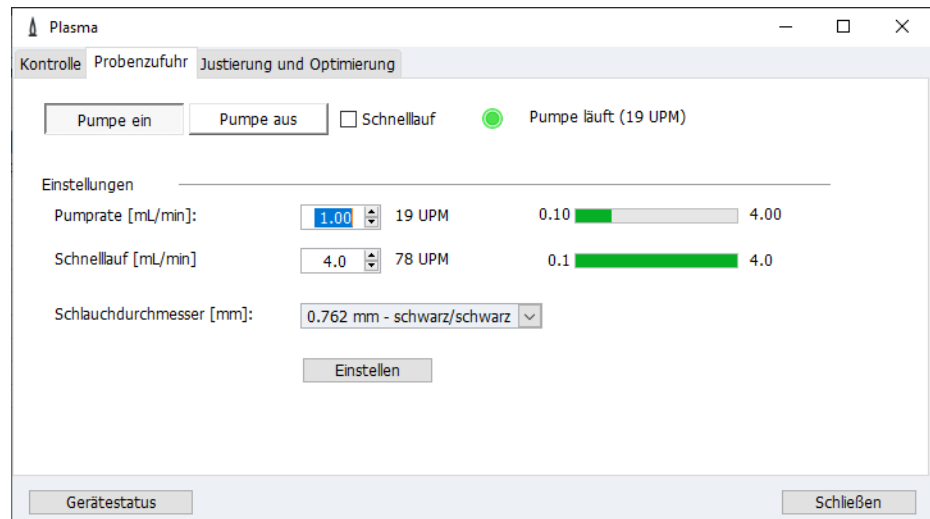
Mit einem Klick auf **☰** wird ein Kontextmenü mit Funktionen zur Verwaltung der in der Liste ausgewählten Parameter geöffnet:

Funktion	Beschreibung
Aktuelle Plasmabedingungen speichern	Eingestellte Plasmabedingungen (Plasmaleistung und Gasflüsse) speichern und der Liste hinzufügen.
Eintrag löschen	Ausgewählten Eintrag löschen. Die Voreinstellungen Standard, Kerosin und Hydrid können nicht gelöscht werden.
Plasmabedingungen einstellen	Plasmaparameter des ausgewählten Eintrags am ICP-OES Gerät einstellen.
Nach Methodenlinie kopieren	Verfügbar, wenn in der Liste eine Methodenlinie ausgewählt ist. Überträgt die Plasmabedingungen in die Methodenparameter der ausgewählten Linie.
Nach allen Methodenlinien kopieren	Verfügbar, wenn in der Liste eine Methodenlinie ausgewählt ist. Überträgt die Plasmabedingungen in die Methodenparameter aller Linien.

Als Methodenvorgabewerte speichern	Die aktuellen Plasmabedingungen als Vorgabewerte für neu in die Methode eingefügte Linien speichern (gilt nicht für Linienfavoriten).
---	---

9.2.2 Probenzufuhr der Pumpe kontrollieren

Im Fenster **Plasma / Probenzufuhr** kontrollieren Sie die Funktion der Schlauchpumpe am ICP-OES Gerät.



Fenster Plasma / Probenzufuhr

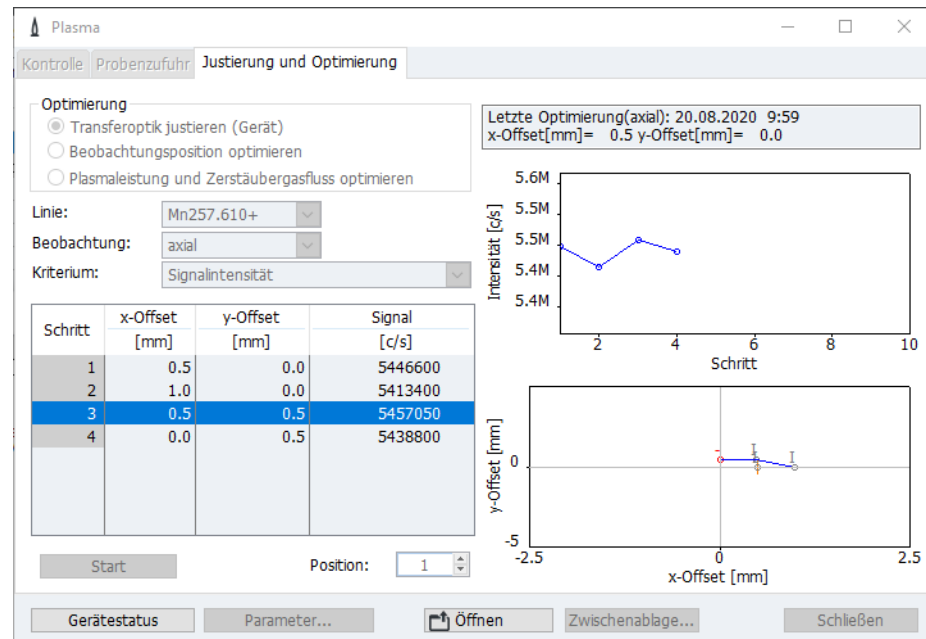
Funktionen im Fenster Plasma / Probenzufuhr

Funktion / Parameter	Beschreibung
[Pumpe ein]/ [Pumpe aus]	Pumpe ein- und ausschalten. Im Grundzustand nach Einschalten des ICP-OES Gerätes ist die Pumpe eingeschaltet.
Schnellauf	Pumpe manuell in den Schnellauf schalten. Die Funktion kann genutzt werden, um das Probenzufuhrsystem manuell zu spülen. Nach erfolgtem Spülen muss das Kontrollkästchen deaktiviert werden, um die Pumpe wieder auf den Probentransport umzuschalten.
Pumpen- geschwindigkeit	Aktuelle Pumpengeschwindigkeit wird mit der Einheit UPM (Umdrehung pro Minute) angezeigt.
Pumprate [ml/min]	Pumprate für den Probentransport während der Messung einstellen.
Schnellauf [ml/min]	Pumprate für den Schnellauf einstellen. Mit dem Schnellauf wird die Transportzeit bei einem Wechsel der Probe bzw. die Transportzeit der Spüllösung zum Zerstäuber optimiert.
Schlauch- durchmesser	In der Liste den verwendeten Schlauch auswählen. Aus der Information von Pumpengeschwindigkeit und Schlauchdurchmesser wird die transportierte Probenmenge (Pumprate) berechnet. Die Schläuche sind mit den farbigen Stoppfern kodiert. Wählen Sie aus der Liste die Stopperkombination des verwendeten Schlauchs.
[Einstellen]	Einstellungen übernehmen.

9.2.3 Justierung und Optimierung des Plasmas

Im Fenster **Plasma / Justierung und Optimierung** nehmen Sie folgende Justierungen vor:

- Ausrichtung der Transferoptik auf die optischen Achsen des Spektrometers
- Ermittlung der Offset-Werte der Transferoptik für eine Analysenlinie aus der Methode
- Plasmaleistung und Zerstäubergasfluss optimieren



Fenster Transferoptik justieren

Für Justierung und Optimierung stehen zwei verschiedene Verfahren zur Verfügung, die unter **[Parameter]** gewählt werden können:

Verfahren	Beschreibung
Gittersuche	Der Bereich wird nach einem Raster gescannt. Aus der Anzahl der Messpunkte wird derjenige mit der höchsten Intensität ermittelt. Die Justierung ist genau, dauert aber durch die Ermittlung einer hohen Anzahl Messpunkte lange.
Simplexverfahren	Das Energiemaximum wird iterativ ermittelt. Von einem Startmesspunkt wird der Messpunkt mit dem höchsten Wert im Umkreis ermittelt. Ausgehend von diesem Messpunkt wird wieder der Messpunkt mit der höchsten Energie ermittelt. Der Vorgang wird fortgeführt, bis das Energiemaximum gefunden ist. Dieses Verfahren ist schneller als die Gittersuche, aber etwas unsicherer. In den verschiedenen heißen Zonen des Plasmas können mehrere Energiemaxima auftreten und so bei ungünstigem Startpunkt das falsche Energiemaximum gefunden werden. Für das Simplexverfahren muss ein Abbruchkriterium als Prozentwert festgelegt werden. Wenn 3 aufeinanderfolgende Werte sich nicht um mehr als diesen Prozentwert voneinander unterscheiden, wird die Justierung beendet.

Wenn **Mit optimierten Einstellungen starten** aktiv ist, werden die optimierten Parameter der letzten Justierung/Optimierung als Startwerte für die aktuelle Optimierung verwendet.

Für die **Justierung der Transferoptik (Gerät)** wird als Kriterium die **Signalintensität** verwendet.

Das Kriterium für die Optimierung wird in Abhängigkeit der Wellenlänge der Analysenlinie automatisch eingestellt, es kann jedoch manuell geändert werden:

Kriterium	Wellenlängenbereich der Analysenlinien
Signalintensität	< 200 nm
Signal/Untergrund	200 bis 350 nm
Signal/Wurzel des Untergrundes	> 350 nm

Transferoptik auf optische Achsen (Plasmamittelpunkte) justieren

Die Justierung der Transferoptik auf die optischen Achsen erfolgt mit einer Mn-Lösung. Stellen Sie für die Justierungen Mn-Lösungen mit folgender Konzentration bereit:

Beobachtungsrichtung	Mn-Lösung
axial	1 mg/L
radial	10 mg/L

- ▶ Aktivieren Sie die Option **Transferoptik justieren (Gerät)**.

Automatisch wird die Mn-Analysenlinie in der Liste **Linie** eingestellt.

- ▶ Wählen Sie unter **[Parameter]** das Justierverfahren (siehe oben).
- ▶ Wählen Sie die Beobachtungsrichtung:

Option	Beschreibung
axial	Beobachtung von oben
radial	Beobachtung von der Seite
geschwächt axial	Beobachtung der abgeschwächten Energie von oben
geschwächt radial	Beobachtung der abgeschwächten Energie von der Seite
geschlossen	Beobachtung bei geschlossenem Shutter (für Service-Zwecke)

- ▶ Tauchen Sie den Ansaugschlauch in die Probe. Bei Verwendung eines Probengebers stellen Sie die Position auf dem Proben-Rack ein.
- ▶ Klicken Sie auf **[Start]**.
Die Justierung der Transferoptik läuft automatisch ab. Am Ende der Justierung werden die neuen Daten angezeigt.
- ▶ Übernehmen Sie die neuen Justierwerte mit einem Klick auf **[OK]**.

Beobachtungsposition für eine Analysenlinie der aktivierten Methode optimieren

Das Plasma hat unterschiedlich heiße Zonen. Bei dieser Optimierung wird der Beobachtungspunkt im Plasma ermittelt, bei dem der Analyt die höchste Signalintensität aufweist. Die Werte werden als **Offset** in der Methode gespeichert.

- ▶ Wählen Sie in der Liste **Linie** die Analysenlinie aus der Methode.
- ▶ Aktivieren Sie die Option **Beobachtungsposition optimieren**.
Automatisch wird die Angabe zur Beobachtungsrichtung aus der Methode übernommen und das Kriterium für die Optimierung eingestellt (siehe oben).
- ▶ Wählen Sie unter **[Parameter]** das Justierverfahren (siehe oben).
- ▶ Tauchen Sie den Ansaugschlauch in die Probe. Bei Verwendung eines Probengebers stellen Sie die Position auf dem Proben-Rack ein.
- ▶ Klicken Sie auf **[Start]**.
Die Optimierung der Beobachtungsposition läuft automatisch ab. Am Ende werden die optimierten Offset-Werte angezeigt.
- ▶ Übernehmen Sie die neuen Offset-Werte mit einem Klick auf **[OK]** in die Methode.

Plasmabedingungen für eine Probe optimieren

Nach dem Sie die Beobachtungsposition der Analyten in einer Probe bestimmt haben, können Sie die Plasmabedingungen (Plasmaleistung und Zerstäubergasfluss) optimieren.

- ▶ Aktivieren Sie die Option **Plasmaleistung und Zerstäubergasfluss** optimieren.
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Linie** die Analysenlinie aus der Methode.
Automatisch werden die bisherigen Plasmabedingungen aus der Methode übernommen und das Kriterium für die Optimierung eingestellt (siehe oben).
- ▶ Wählen Sie unter **[Einstellen]** das Justierverfahren (siehe oben).
- ▶ Tauchen Sie den Ansaugschlauch in die Probe. Bei Verwendung eines Probengebers stellen Sie die Position auf dem Proben-Rack ein.
- ▶ Klicken Sie auf **[Start]**.
Die Optimierung der Plasmaleistung und des Zerstäubergasflusses läuft automatisch ab. Am Ende werden die optimierten Werte angezeigt.
- ▶ Übernehmen Sie die neuen Werte mit einem Klick auf **[OK]** in die Methode.


9.3 Probengeber

Der Probengeber ist ein optionales Zubehör. Der Probengeber wird bei der Initialisierung im Fenster Voreinstellung nach Start des Programms ASpect PQ erkannt.

Das Fenster **Probengeber** beinhaltet folgende Funktionen:

- Angeschlossenen Probengeber-Typ anzeigen
- Probengeber konfigurieren
- Probengeber justieren
- Probenwege zusätzlich spülen
- Probengeber erneut initialisieren
- Selbsttest durchführen

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

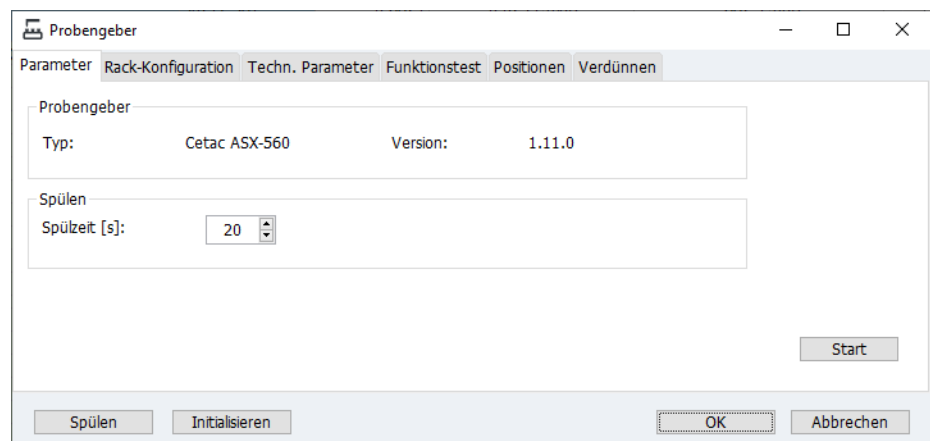
- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Probengeber** mit einem Klick auf  in der Symbolleiste oder wählen Sie den Menüpunkt **Methodenentwicklung | Probengeber**.

- Probengeber initialisieren** Der Probengeber wird grundsätzlich beim Einschalten des Netzschalters initialisiert. Eine erneute Initialisierung könnte notwendig sein, wenn der Probengeber seine Orientierung verloren hat, z. B. durch einen mechanischen Stoß. Dabei wird die Verbindung zwischen Probengeber, ICP-OES Gerät und PC wiederhergestellt.
- ▶ Mit einem Klick auf **[Initialisieren]** können Sie den Probengeber bei Bedarf ohne Neustart des Programms ASpect PQ erneut initialisieren.
- Probengeber erkennen** Wurde der Probengeber erst nach Starten von ASpect PQ eingeschaltet, muss die Verwendung des Probengebers im Programm angemeldet werden.
- ▶ Klicken Sie dazu auf **[Erkennen]** und anschließend auf **[Initialisieren]**.
- Hinweis:** Wenn der Cetac ASX-560 mit Verdünnungssystem verwendet wird, ist die Schaltfläche **[Erkennen]** ausgeblendet.
- Probenwege spülen**
- ▶ Stellen Sie im Fenster **Probengeber / Parameter** die **Spülzeit** ein. Die Voreinstellung für die Spülzeit wird aus der aktuellen Methode übernommen.
 - ▶ Klicken Sie auf **[Spülen]**.
- Alternativ wählen Sie den Menüpunkt **Routine | Spülen**.
- ✓ Die Probenwege (Schläuche-Zerstäuber-Sprühkammer-Torch) werden die angegebene Spülzeit unter Schnelllauf der Pumpe gespült.

9.3.1 Angeschlossenen Probengeber anzeigen

Im Fenster **Probengeber / Parameter** werden folgende Parameter angezeigt bzw. konfiguriert:

- Probengebertyp
- Spülparameter



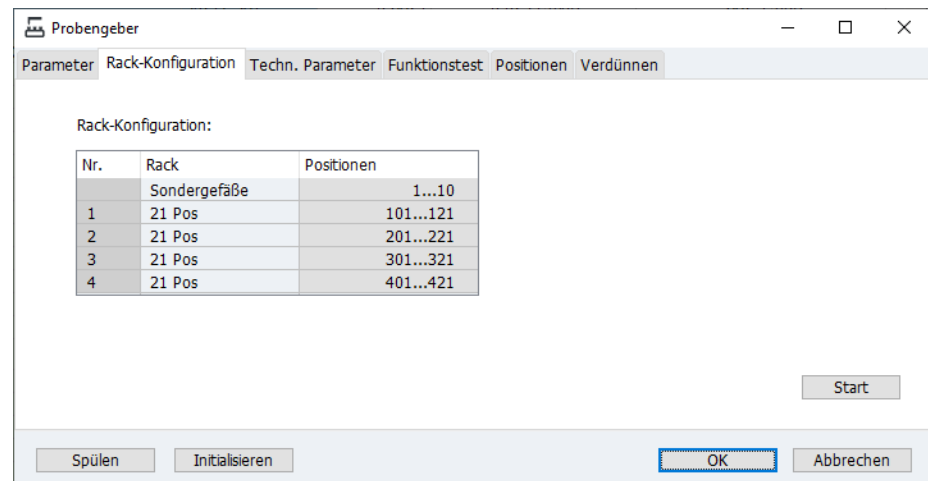
Fenster Probengeber / Parameter

Probengebertyp Im Fenster **Probengeber/Parameter** werden der bei der Initialisierung erkannte Probengebertyp und die Firmware-Version des Probengebers angezeigt.

Spülparameter Die Systemspülzeit vom Probengefäß bis zur Torch wird aus der aktuellen Methode übernommen (→ "Einstellungen zum Probenransport – Karte Probenzufuhr" S. 35). Änderungen im Fenster **Probengeber / Parameter** haben umgekehrt keinen Einfluss auf die Einträge in der Methode. Während der Systemspülung unter Verwendung des Probengebers wird die Spüllösung dabei aus dem Spülgefäß des Probengebers entnommen.

9.3.2 Probengeber-Rack konfigurieren

Im Fenster **Probengeber / Rack-Konfiguration** stellen Sie die auf dem Probengeber verwendeten Probenracks ein:



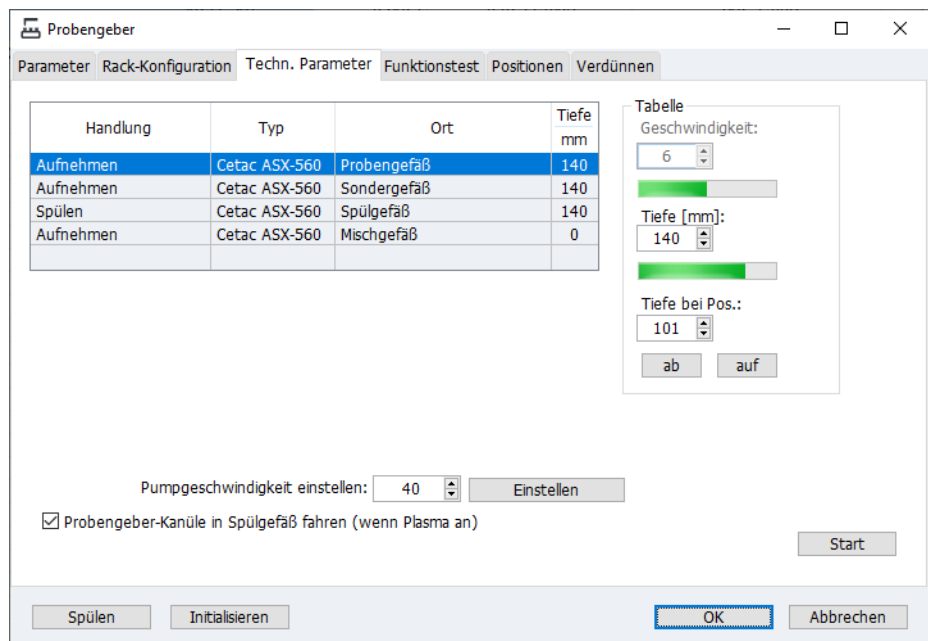
Fenster Probengeber / Rack-Konfiguration

In Abhängigkeit vom verwendeten Probengeber können verschiedene Proben-Racks und Racks mit Sonderproben positioniert werden.

In der Tabelle wählen Sie die Proben-Racks. Für die variablen Proben-Racks sind dreistellige Nummern als Positionsnummern vorgesehen. Die erste Ziffer bezeichnet die Lage des Proben-Rack auf dem Probengeber, die beiden anderen die Position auf dem Proben-Rack. So kennzeichnet z. B. die Nummer 113 die Position 13 auf dem Proben-Rack 1. Das variable Proben-Rack 1 befindet sich auf dem Probengeber vor dem Spülgefäß, danach folgen die Proben-Racks 2 und 3.

9.3.3 Technische Parameter des Probengebers

Im Fenster **Probengeber / Techn. Parameter** spezifizieren Sie die Eintauchtiefe der Kanüle in die verschiedenen Gefäße.



Fenster Probengeber / Funktionstest

Für die einzelnen Gefäßtypen werden folgende Handlungen berücksichtigt:

Gefäß	Handlung
Probengefäße	Proben durch Schlauchpumpe ansaugen.
Sondergefäße	Sonderproben durch Schlauchpumpe ansaugen.
Spülgefäß	Kanüle und Ansaugweg spülen.

Elemente der Handlungstabelle

Option	Beschreibung
Handlung	Mögliche Handlungen: Aufnehmen Probe aus dem Gefäß zum Transport zur Torch aufnehmen. Spülen Spüllösung aufnehmen.
Typ	angeschlossener Probengebertyp
Ort	Gefäß, auf das sich die Handlung bezieht
Tiefe [mm]	Eintauchtiefe der Kanüle in mm

Bereich Tabelle

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

Option	Beschreibung
Tiefe [mm]	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.

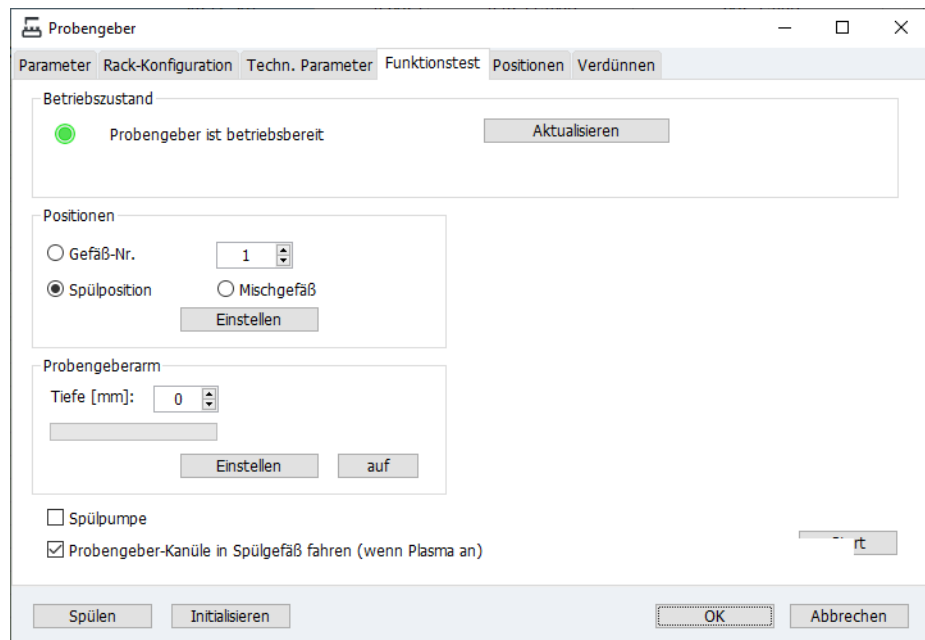
Einstellen Wenn aktiviert, bewegt sich der Probengeberarm über das Gefäß, zu dem die Positionierung zu ändern ist. Bei Proben- und Sondergefäßen ist das die unter **Tiefe bei Pos.** eingestellte Probenposition.
 Wenn nicht aktiviert, wird die Eintauchtiefe und Geschwindigkeit geändert, ohne dass sich der Probengeberarm über ein Gefäß bewegt.

Weitere Optionen

Ist die Option **Probengeber-Kanüle ins Spülgefäß fahren** aktiviert, wird die Kanüle nach Schließen des Fensters automatisch ins Spülgefäß getaucht.

Nur ASX-560: Einstellen der Geschwindigkeit der Spülpumpe (Stufen: 0...99). Mit **Speichern** wird dieser Wert permanent im Probengeber gespeichert.

9.3.4 Probengeberfunktionen testen



Fenster Probengeber / Funktionstest

Folgende Funktionen des Probengebers werden geprüft:

Funktion	Beschreibung
Betriebszustand	Betriebsbereitschaft prüfen. Mit [Aktualisieren] wird die Betriebsbereitschaft erneut überprüft.
Positionen	Nach einem Klick auf [Einstellen] fährt der Probengeber eine ausgewählte Position an. Gefäß-Nr. Probengeber fährt die in der Liste ausgewählte Position an. Spülposition Probengeber fährt zum Spülgefäß.
Probengeberarm	Probengeberarm auf die im Listenfeld eingestellte Tiefe absenken.
Spülpumpe	Spülpumpe ein- und ausschalten.

Probengeber-Kanüle in Spülgefäß fahren

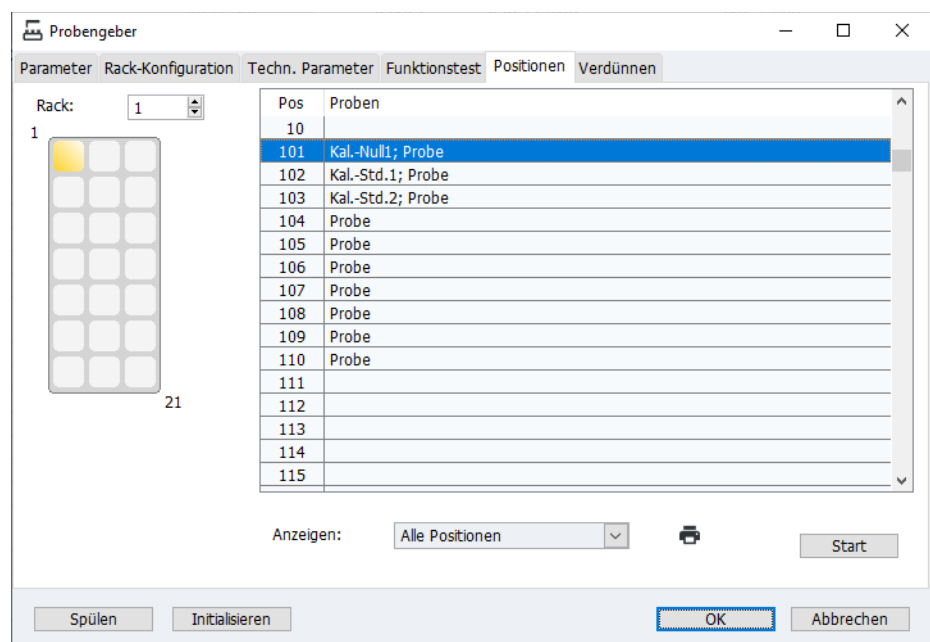
Wird das Kontrollkästchen Probengeberkanüle ins Spülgefäß fahren aktiviert, so taucht die Kanüle nach Schließen des Fensters Probengeber in das Spülgefäß.

9.3.5 Probenpositionen auf dem Probengeber anzeigen

Im Fenster **Probengeber / Positionen** werden die in der aktuellen Sequenz verwendeten Probenteller-Positionen angezeigt.

Für die Anzeige kann zwischen den Optionen **Alle Positionen**, **Nur Probengefäße** und **Nur Sondergefäße** gewählt werden.

Neben der Tabelle ist eine schematische Darstellung des Proben-Racks mit der aktuell markierten Probenposition abgebildet. Die Probenposition kann sowohl im Schema als auch in der Tabelle markiert werden.



Fenster Probengeber / Positionen

9.3.6 Verdünnungsfunktion

Die Parameter für die Probenverdünnung bei Verwendung des Probengebers Cetac ASX 560 mit dem Cetac SDX_{HPLD} werden im Fenster **Probengeber / Verdünnen** angezeigt.

Verdünnungssystem: CETAC Technologies ASX-560 Standard

Einstellungen: ASX-560/SDX

Parameter	Bereich	Wert
Max. Verdünnungsfaktor	2...5000	5000
Min. Verdünnungsfaktor	2...5000	2
Spüzyklen Mischgefäß	1...4	2
Vortexergeschwindigkeit	500...3000 rpm	2500
Volumen Luftsegment	50...200 µL	50
Aufnahme Verdünnungsmittel	50...3500 µL/s	1800
Aufnahme Probe	50...3500 µL/s	170
Abgabegeschwindigkeit	50...3500 µL/s	600
Verzögerung Spritzenpumpe	500...5000 ms	1000

Service:

Fenster Probengeber / Verdünnen

Einstellungen

Die Parameter im Bereich **Einstellungen** enthalten Voreinstellungen, die gute Ergebnisse für die Probenverdünnung liefern. Sie können die Parameter für eine Methodenoptimierung innerhalb der Einstellbereiche variieren.

Service

In der Liste **Service** können Sie Service-Funktionen am SDX_{HPLD} wählen und mit **[Start]** ausführen:

Option	Funktion
Spritzenpumpe und Vortexer vorbereiten	Verdünnungsflüssigkeit wird mit der Spritzenpumpe durch das System gepumpt und in den Vortexer abgegeben. Dadurch werden Luftblasen aus dem System entfernt und der Vortexer konditioniert.
Spritzenpumpe in Ausbauposition	Wenn die Spritzenpumpe im Rahmen einer Wartung ausgebaut werden muss, muss der Spritzenkolben mit dieser Funktion vorher in die richtige Position gebracht werden.
ASXpress+ initialisieren (nach Zerlegen und Reinigen)	Nur wenn der ASXpress+ installiert ist: Nach Installation oder Wartung den ASXpress+ initialisieren.

9.4 Umlaufkühler

Im Kühlkreislauf wird im ICP-OES Gerät ein Ventil geschaltet, das den Kreislauf öffnet und schließt. Der Wechsel des Kühlwassers wird deshalb mit einem Wizard unterstützt.



Hinweis

Beachten Sie die Hinweise zur Wartung des Umlaufkühlers und zur Zubereitung des Kühlwassers in der Betriebsanleitung des ICP-OES Geräte.

- ▶ Wählen Sie den Menüpunkt **Extras | Wartung**.
- ▶ Klicken Sie im Fenster **Wartung** auf Kühlmittel wechseln.
- ▶ Folgen Sie den Anleitungen des Wizards.

10 Datenmanagement

In diesem Abschnitt finden Sie Informationen zu

- Druckoptionen
- Verwaltung von Methoden und Sequenzen
- Verwaltung von Ergebnisdaten
- Definieren von Einheiten für Konzentrationen und Gehalte
- Verwaltung von Daten zu häufig verwendeten Stocklösungen und QC-Proben

10.1 Druckfunktionen in ASpect PQ

ASpect PQ verfügt bei der Datenausgabe über eine große Anzahl Ausgabeformate. Neben der Ausgabe auf dem Drucker können die Daten in das Excel-, PDF-, HTML-, XML- oder Textformat exportiert oder als Bitmap oder skalierbare Grafiken gespeichert werden.

Für die Ausgabe von Analyseergebnissen und Fensterinhalten (z. B. der Fenster **Methode** oder **Sequenz**) 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 Ergebnisdaten drucken

ASpect PQ bietet verschiedene Möglichkeiten, Messergebnisse auszudrucken:

- Das Gesamtprotokoll ausdrucken. Das Gesamtprotokoll einer Analyse enthält die Methodenparameter, die Kalibrierung und Analyseergebnisse 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 Analysenlinien und Ergebnisse in einem Dialogfenster wählen.

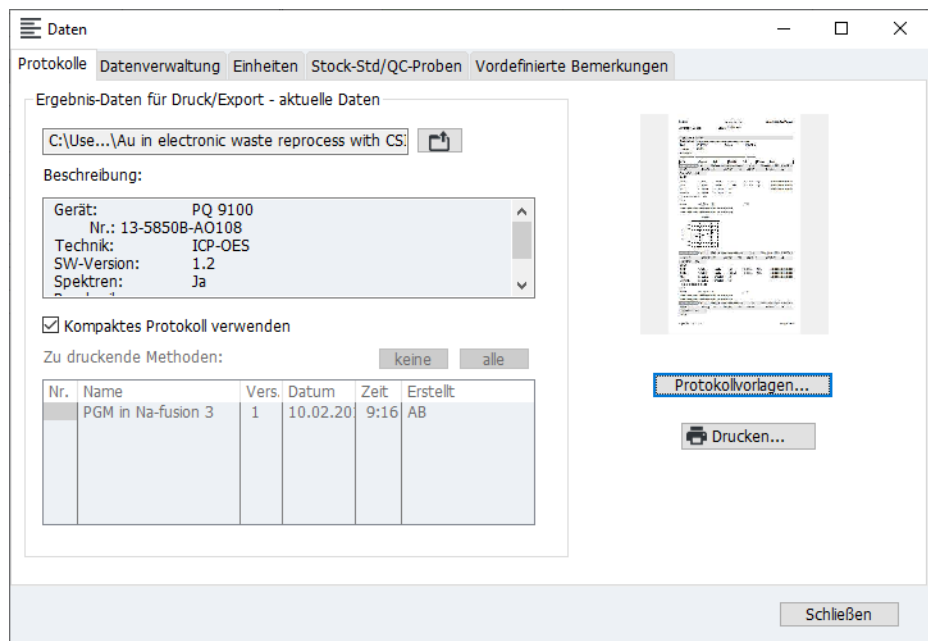
Gesamtprotokoll ausdrucken

Das Gesamtprotokoll einer Analyse enthält die Methodenparameter, die Kalibrierung und Analyseergebnisse 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 dem Symbol .

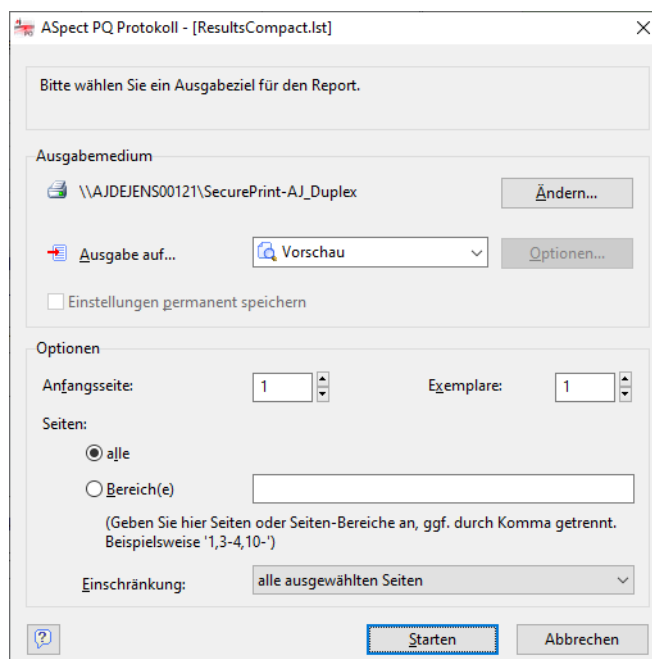
Alternativ öffnen Sie das Fenster mit dem Menübefehl **Extras | Datenverwaltung** oder dem Menübefehl **Datei | Drucken | Protokoll**.

Angezeigt werden der Name der aktuellen Datei, Dateiinformatoren (Liste **Beschreibung**), sowie alle Methodenversionen, die zur Erzeugung der aktuellen Ergebnisdatei herangezogen wurden.



Fenster Daten / Protokolle mit Auswahl der Ergebnisdaten für den Druck

- ▶ Wenn Sie eine gespeicherte Datei drucken wollen, rufen Sie mit  das Standardfenster **Öffnen** auf und wählen Sie die gewünschte Datei aus.
- ▶ Markieren Sie in der Tabelle alle Methodenversionen, die ausgedruckt werden sollen. Klicken Sie mit gedrückter Umschalt- oder Strg-Taste auf die Methodenversion, die Sie markieren möchten. Mit der Schaltfläche **[alle]** markieren Sie alle Versionen, mit **[keine]** entfernen Sie alle Markierungen.
- ▶ Öffnen Sie mit **[Drucken]** das Fenster **ASpect PQ Protokoll**.



Fenster ASpect PQ Protokoll mit Auswahl des Ausgabeformats

- ▶ Ändern Sie dort gegebenenfalls in der Liste **Ausgabe auf** das Ausgabeformat und stellen Sie mit **[Optionen]** spezielle Parameter des Ausgabeformats ein.

- ▶ Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Einstellungen permanent speichern**, wenn Sie das gewählte Ausgabemedium zur Voreinstellung für diese Druckvorlage machen möchten.
- ▶ Starten Sie den Ausdruck mit **[Starten]**.

i Hinweis

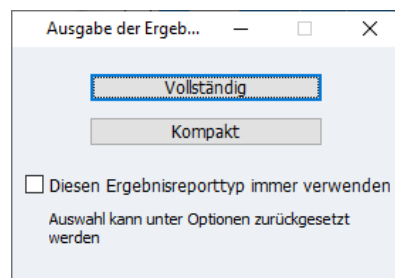
Nutzen Sie für den Ausdruck die Einstellung **Vorschau**. Mit einem Klick auf **[Starten]** werden die zu druckenden Seiten zunächst in der Druckvorschau angezeigt. So kann vor der Ausgabe auf dem Drucker geprüft werden, ob alle gewünschten Daten oder auch unnötige Daten ausgegeben werden.

Aktuelle Ergebnisse drucken

Die im Hauptfenster angezeigten Ergebnisse können gedruckt werden:

- ▶ Aktivieren Sie die Ergebniskarte im Hauptfenster, deren Inhalt Sie ausdrucken wollen.
- ▶ Starten Sie den Ausdruck mit dem Menübefehl **Datei | Drucken | Aktives Fenster**.

Das Fenster **Ausgabe der Ergebnisse** erscheint.




Fenster Ausgabe der Ergebnisse

- ▶ Klicken Sie auf **[Vollständig]**, wenn Sie die Ergebnisse mit den Signalgrafiken ausdrucken wollen. Wählen Sie **[Kompakt]** für den Druck der Ergebnisse in einer kompakten Übersicht.

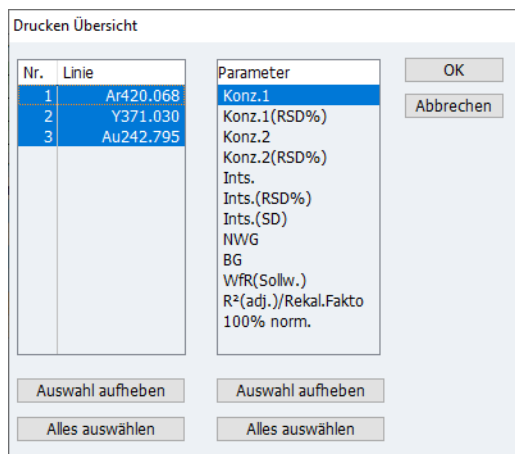
Wenn Sie im Fenster Ausgabe der Ergebnisse das Kontrollkästchen **Diesen Ergebnisreporttyp immer verwenden** aktivieren und anschließend auf **[Vollständig]** oder **[Kompakt]** klicken, erscheint dieses Fenster beim nächsten Ergebnisdruck nicht mehr, es wird automatisch der letzte Ergebnisreporttyp verwendet. Diese Einstellung können Sie im Fenster **Optionen / Ansicht** wieder zurücksetzen (→ "Ansichtsoptionen" S. 147).

- ▶ Verfahren Sie weiter wie bei "Gesamtprotokoll ausdrucken" oben beschrieben.

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.




Fenster Drucken Übersicht mit Auswahl des Ergebnisdrucks



- ▶ Markieren Sie alle gewünschten Linien und Parameter für den Ausdruck und bestätigen Sie die Auswahl mit [OK].
Das Fenster **ASpect PQ Protokoll** erscheint.
- ▶ Verfahren Sie weiter wie bei "Gesamtprotokoll ausdrucken" oben beschrieben.

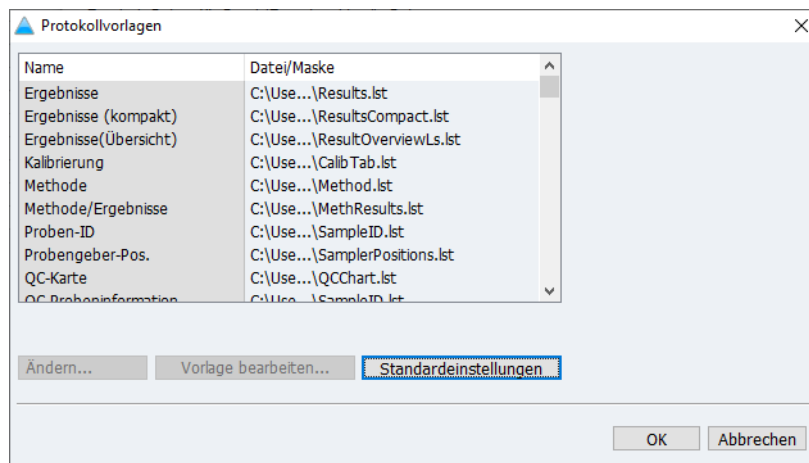
10.1.2 Weitere Analysenparameter und Einstellungen drucken

Folgende Parameter und Einstellungen der Analyse können aus dem jeweiligen Fenster gedruckt werden:

- Methode
 - Sequenz
 - Ergebnisdaten auf der Karte **Übersicht** im Hauptfenster
 - Proben-ID
 - QC (Qualitätskontrollkarten)
 - Kalibrierung
 - Probengeberpositionen
- ▶ Aktivieren Sie das Fenster, dessen Inhalt Sie drucken möchten, auf der Arbeitsfläche von ASpect PQ.
 - ▶ Starten Sie den Druck der Parameter mit einem Klick auf  im Fenster.
Alternativ rufen Sie den Menübefehl **Datei | Drucken | Aktives Fenster**.
Das Fenster **ASpect PQ Protokoll** erscheint.
 - ▶ Ändern Sie 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

Protokollentwurfsmodus nutzen	<p>Die standardmäßig installierten Protokollvorlagen können individuell angepasst werden. Zur besseren Übersicht können Protokollansichten mit realen Werten editiert werden.</p> <ul style="list-style-type: none">▶ Aktivieren Sie den Menüpunkt Datei Protokollentwurfsmodus.▶ Öffnen Sie das Fenster, dessen Protokollvorlage Sie ändern wollen.▶ Klicken Sie dort, falls vorhanden auf . Anderenfalls wählen Sie den Menübefehl Datei Drucken Aktives Fenster.▶ Bestätigen Sie die Abfrage zur Bearbeitung der Reportvorlage mit [Ja]. Es erscheint der Reportdesigner.▶ Nehmen Sie die gewünschten Änderungen vor und speichern Sie die geänderte Protokollvorlage.▶ Verknüpfen Sie die Protokollvorlage mit dem entsprechenden Druckinhalten (siehe unten "Protokollvorlagen verwalten").
Kurze Einführung in den Reportdesigner	<p>Die einzelnen Bestandteile der Reportvorlage heißen Objekte. Eine Tabelle kann bspw. aus je einem Objekt für die Kopfzeile, den Listenwerten und einer Grafik bestehen.</p> <p>Diese Objekte wiederum enthalten die zu druckenden Informationen und tragen die zugehörigen Layouteigenschaften wie Schriftarten, Ausrichtungen, Umbrüche, Farben, etc.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>Weitere Informationen zur Bedienung und zu den Funktionen des Reportdesigners finden Sie im Handbuch "designer_deu.pdf" / "designer_eng.pdf" auf der ASpect PQ-CD.</p>
Das Fenster Protokollvorlagen	<p>Im Fenster Protokollvorlagen werden die Vorlagen editiert und den Fenstern von ASpect PQ zugeordnet. Einem Fenster können unter Verwendung einer Dateimaske mehrere Vorlagen zugeordnet werden, aus denen bei Druckstart die gewünschte Vorlage gewählt wird.</p> <ul style="list-style-type: none">▶ Öffnen Sie mit dem Symbol  das Fenster Daten / Protokolle.▶ Klicken Sie auf [Protokollvorlagen].




Fenster Protokollvorlagen

Für folgende Fenster muss eine Protokollvorlage bereitstehen:

Name	Beschreibung
Ergebnisse	Inhalt der Karte Ergebnis im Hauptfenster
Ergebnisse (kompakt)	Kompakte Übersicht der Ergebnisse
Ergebnisse (Übersicht)	Inhalt der Karte Übersicht im Hauptfenster
Kalibrierung	Kalibrierung der Analyse – Fenster Kalibrierung
Methode	Methodenparameter – Fenster Methode
Methode/Ergebnisse	Gesamtprotokoll (→ "Ergebnisdaten drucken" S. 128)
Probengeber-Pos.	Belegung des Probengebers – Fenster Probengeber-Positionen
Proben-ID	Probeninformationsdaten – Fenster Proben-ID - Probeninformation
QC-Karte	Daten der QC-Karten – Fenster QC
QC-Probeninformation	Informationsdaten der QC-Proben - Fenster Proben-ID – QC-Probeninformation
Sequenz	Sequenzfolge – Fenster Sequenz

Zuordnung ändern

- ▶ Markieren Sie im Fenster **Protokollvorlagen** das Fenster, dessen Protokollvorlage geändert wird.
- ▶ Öffnen Sie mit **[Ändern]** das Dialogfenster zum Zuordnen der Dateien.
- ▶ Soll nur eine Protokollvorlage zugeordnet werden, aktivieren Sie die Option **Vorlagendatei verwenden** (*.lst) und wählen Sie dann nach Klick auf  die gewünschte Datei aus.
- ▶ Sollen mehrere Vorlagen gleichzeitig bei Druckstart angeboten werden, aktivieren Sie die Option **Dateiauswahl zulassen**. Geben Sie den Masken-Namen unter Verwendung von Wildcards im Eingabefeld ein.
- ▶ Bestätigen Sie die Einstellungen mit **[OK]**.

Protokollvorlage editieren

- ▶ Markieren Sie im Fenster **Protokollvorlagen** das Fenster, dessen Protokollvorlage

editiert wird.

- ▶ Öffnen Sie mit **[Bearbeiten]** das Fenster des **Reportdesigners**.

Standardeinstellungen wiederherstellen

- ▶ Zum Herstellen des Zustands nach der Installation des Programms ASpect PQ betätigen Sie **[Standardeinstellungen]**.

10.2 Datenverwaltung für alle Datentypen in ASpect PQ


ASpect PQ verwaltet auf verschiedene Art und Weise die anfallenden Daten.

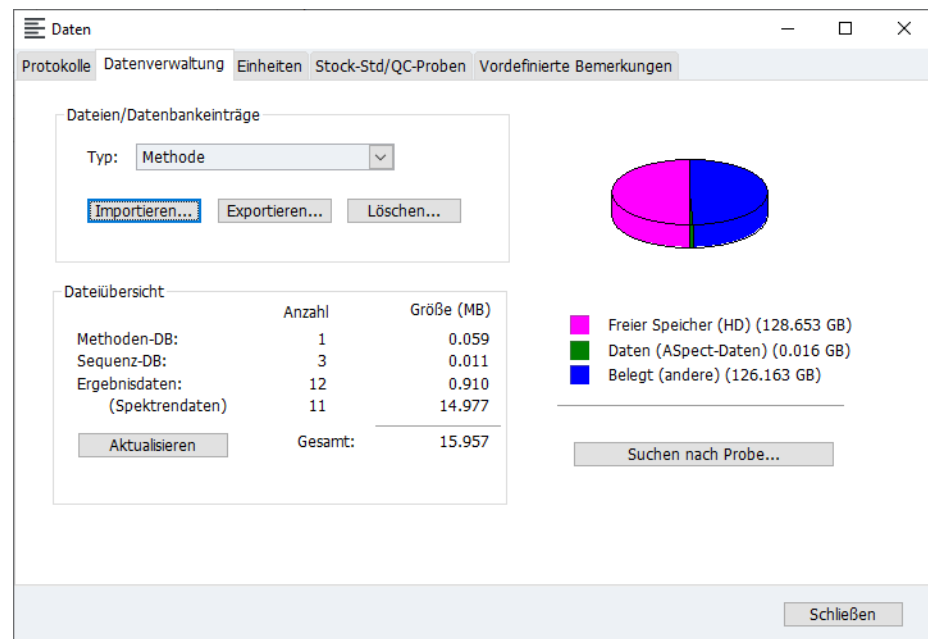
Methoden, Sequenzen und Korrekturmodelle werden getrennt in einer Datenbank gespeichert. Die Methodendatenbank trägt den Namen "method.tps". Die Datenbank mit den Sequenzen ist mit "sequ.tps" bezeichnet.

Für die Ergebnisdaten einer Messung werden jeweils eigene Datenbanken angelegt. Weitere Ergebnisse können in der Datenbank durch Messung angehängt werden. Es ist jedoch nicht möglich, einzelne Proben aus der Datenbank zu löschen. Die Datenbanken der Ergebnisdaten haben die Erweiterung ".tps".

Die Probeninformationsdaten werden in einem für Tabellenkalkulationsprogramme, z. B. Excel, lesbaren Format mit der Erweiterung ".csv" gespeichert.

Methoden, Sequenzen und Ergebnisdaten können im Fenster **Daten/Datenverwaltung** organisiert werden. Die gleichen Dialogfunktionen für die Verwaltung der Methoden und Sequenzen werden auch beim Öffnen und Speichern dieser Daten verwendet.

Das Fenster **Daten / Datenverwaltung** erscheint nach einem Klick auf mit  oder nach Wahl des Menübefehls **Extras | Datenverwaltung**.



Fenster Daten / Datenverwaltung

In diesem Fenster verwalten Sie folgende Daten:

- Methoden

- Sequenzen
- Ergebnisdaten
- Linien-/Wellenlängendatei
- Korrekturmodelle
- Korrekturspektren
- Protokollvorlagen
- Linienfavoriten
- Worksheets

Im Feld **Typ** wählen Sie den gewünschten Datentyp aus.

10.2.1 Methoden und Sequenzen verwalten

Das Datenbankfenster für Methoden und Sequenzen

Methoden und Sequenzen werden in der Datenbank gespeichert. Beim Speichern, Öffnen, Löschen und Im- oder Export von Methoden oder Sequenzen werden Datenbankfenster mit gleichen Elementen geöffnet.

Name	Vers.	Datum	Zeit	Kat.	Anwender	Status
Example Multiline Ev	1	08.06.2020	15:10	INS	User	Entwicklung
Mehrlinienauswertung	1	08.06.2020	13:39		User	Entwicklung
Method_Ground	1	05.06.2020	17:15	INS	User	Entwicklung
TW Standardkit	1	08.06.2020	12:34		User	Entwicklung
USP_232/233	1	30.08.2019	14:02		AJ	Entwicklung

Datenbankfenster

Anzeigen und Eingabefelder

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. Wollen Sie die Methoden/Sequenzen von allen Kategorien anzeigen lassen, löschen Sie den Eintrag im Feld Kat..

Methodenliste/ Sequenzliste	Gespeicherte Methoden/Sequenzen mit Name, Version, Datum, Zeit, Kategorie und Anwender anzeigen.
Sortieren nach	Die Liste der Methoden/Sequenz nach verschiedenen Merkmalen wie Name/Version oder Datum/Zeit sortieren. Das Sortieren kann je nach Auswahl der Option Aufsteigend oder Absteigend vorgenommen werden.
Beschreibung	Zusätzlichen Notizen, z. B. zur Verwendung der Methode/Sequenz eintragen bzw. anzeigen.
Nur aktuelle Versionen anzeigen	Sind mehrere Versionen einer Methode/Sequenz mit gleichen Namen angelegt, so wird nur die Methode/Sequenz mit der höchsten Versionsnummer angezeigt.


In der Software ASpect PQ werden Methoden/Sequenzen mit gleichen Namen nicht überschrieben. Vielmehr 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. Methoden und Sequenzen werden im weiteren Text dieses Abschnitts als "Datensätze" bezeichnet.

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 dem Menübefehl **Extras | Datenverwaltung** oder dem Symbol .
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** den zu bearbeitenden Datensatztyp: **Methode** oder **Sequenz**.

Datensätze exportieren

Durch Exportieren stellen Sie Datensätze anderen Geräten/Computern zur Verfügung. Es können mehrere Datensätze gleichzeitig in eine gemeinsame Datei exportiert werden. Exportdateien erhalten folgende Erweiterungen: Methodendatensätze - ".met", Sequenzdatensätze - ".seq".

- ▶ Öffnen Sie mit **[Exportieren]** das Datenbankfenster.
- ▶ Wählen Sie die Datensätze aus und klicken Sie auf **[Exportieren]**.
- ▶ Geben Sie im Standardfenster **Speichern unter** einen Dateinamen ein und bestätigen Sie diesen mit **[Speichern]**.

Es wird das Datenbankfenster mit den exportierten Dateien angezeigt.

- ▶ Verlassen Sie das Datenbankfenster mit **[Schließen]** und kehren Sie in das Fenster **Daten** zurück.

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 ausgewählt werden.

- ▶ Öffnen Sie mit **[Importieren]** das Fenster **Zu importierende Datei auswählen** mit den Standardfunktionen zum Öffnen von Dateien.

- ▶ Wählen Sie die zu importierende Datei.
- ▶ Bestätigen Sie die Auswahl mit **[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.
- ▶ Wählen Sie im Datenbankfenster die zu importierenden Datensätze aus 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 der Methode angelegt. Im Datenbankfenster erscheinen die aktuellen Versionen der vorhandenen Datensätze.
- ▶ Verlassen Sie das Datenbankfenster mit **[Schließen]** und kehren Sie in das Fenster **Daten** zurück.

Datensätze löschen

Mit der Löschfunktion löschen Sie dauerhaft komplette Datensätze aus der Datenbank.

- ▶ Öffnen Sie mit **[Löschen]** das Datenbankfenster.
- ▶ Wählen Sie die zu löschenden Datensätze aus.
- ▶ Klicken Sie auf **[Löschen]**.
 - ✓ 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 **Methode löschen** bzw. **Sequenz löschen** mit dem Menübefehl **Datei | Löschen | Methode** bzw. **Datei | Löschen | Sequenz** öffnen.
- ▶ Verfahren Sie dann weiter wie oben beschrieben.

10.2.2 Ergebnisdateien verwalten

Ergebnisdaten werden während der Messung als Datenbank gespeichert. Eine Datenbank mit Ergebnisdaten kann kopiert oder gelöscht werden.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten / Datenverwaltung** mit dem Menüpunkt **Extras | Datenverwaltung** oder einem Klick auf .
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** die Option **Ergebnisse**.

Ergebnisdaten exportieren

Mit diesem Befehl kopieren Sie eine oder mehrere Datenbanken sowie die vorhandenen Spektrendateien in einen anderen Ordner.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Daten / Datenverwaltung** auf **[Exportieren]**.
Das Fenster **Exportieren** mit der Übersicht über vorhandene Ergebnisdatenbanken erscheint. Für die Ergebnisdateien werden Namen, Größe und Zeitpunkt der letzten Änderung aufgelistet.

- ▶ Wählen Sie die zu kopierenden Ergebnisdatenbanken mit Mausclick aus. Mehrere Datenbanken markieren Sie mit gedrückter Strg- oder Umschalttaste.
- ▶ Öffnen Sie mit dem Befehl **[Exportieren]** das Fenster **Ordner auswählen**.
- ▶ Wählen Sie den Zielordner aus und bestätigen Sie diesen mit **[OK]**.
 - ✓ Die Ergebnisdaten werden in den Zielordner kopiert.

Ergebnisdaten löschen

Sie können Ergebnisdaten dauerhaft löschen.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Daten / Datenverwaltung** auf **[Löschen]**.
- ▶ Wählen Sie im Fenster **Ergebnisdateien löschen** die zu löschende Ergebnisdatenbank mit Mausclick aus. Mehrere Dateien markieren Sie mit gedrückter Strg- oder Umschalttaste.
- ▶ Klicken Sie auf **[Löschen]**, wenn Sie die Ergebnisdatenbank löschen wollen.
- ▶ Bestätigen Sie die Abfrage zum Löschen der Dateien mit **[OK]**.
 - ✓ Die Daten werden dauerhaft gelöscht.

Ergebnisse einzelner Proben suchen

Einzelne Proben mit bekannten Probenamen können gesucht werden.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Daten / Datenverwaltung** auf **[Suche nach Probe]**.
Alternativ wählen Sie den Menüpunkt **Extras | Suche nach Probe**.

Suchen nach Probe [3 Datei(en) gefunden]

Suchen nach:
 Probe: Mn 10 mg/l
 Suchen in (inkl. Unterordner): C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpectPQ\ICP\RESULTS\

Teilstringsuche
 Datum zwischen: 10.08.2020 und: 10.08.2020

Suchergebnisse:

Ergebnisdatei	Ordner	Technik	Methode	Datum
Au in electronic waste reproce	C:\Users\Public	ICP-OES	PGM in Na-fusion 3	28.02.2019
Au in electronic waste reproce	C:\Users\Public	ICP-OES	PGM in Na-fusion 3	28.02.2019
Au in electronic waste original r	C:\Users\Public	ICP-OES	PGM in Na-fusion 3	28.02.2019

Öffnen Start Schließen

Fenster Suche nach Probe


- ▶ Geben Sie im Eingabefeld **Probe** den Probenamen ein.
- ▶ Suchen Sie nach Proben, bei denen die eingegebene Zeichenkette Bestandteil des Namens ist, aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Teilstringsuche**.
- ▶ Mit aktivierten Kontrollkästchen **Datum** grenzen Sie den Zeitpunkt der Messung ein.
- ▶ Starten Sie die Suche mit **[Start]**.

In der Tabelle werden alle Ergebnisse angezeigt, die Proben mit dem eingegebenen Probenamen enthalten.

- ▶ Um eine der angezeigten Ergebnisdatenbanken zu öffnen, markieren Sie diese Datenbank in der Liste und betätigen Sie **[Öffnen]**.
 - ✓ Die Ergebnisse werden im Hauptfenster angezeigt.


10.2.3 Linien-/Wellenlängendateien exportieren

Die Linien-/Wellenlängendatei mit den Analysenlinien und den gespeicherten Peak-schwerpunkten ist gerätespezifisch. Sie ist auf dem Computer gespeichert, mit dem das ICP-OES Gerät gesteuert wird. Um die Linien-/Wellenlängendatei auf einem anderen Computer zu verwenden gehen Sie folgendermaßen vor:

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten / Datenverwaltung** mit dem Menübefehl **Extras | Datenverwaltung** oder dem Symbol .
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** die Option **Linien-/Wellenlängendatei** und klicken Sie auf **[Exportieren]**.
- ▶ Wählen Sie einen Ordner zum Speichern der Datei und klicken Sie auf **[OK]**.
 - ✓ Die Datei mit dem Namen "lines.dat" ist im ausgewählten Ordner gespeichert.

10.2.4 Korrekturmodelle verwalten

Korrekturmodelle werden für die spektralen Korrekturen verwendet (→ "Spektrale Störungen beseitigen – Karte Spektrale Korrekturen" S. 93). Sie können von einem Gerät auf ein anderes Gerät übertragen werden. Korrekturmodell-Dateien haben die Erweiterung ".MOD".

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten / Datenverwaltung** mit dem Menübefehl **Extras | Datenverwaltung** oder einem Klick auf .
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** die Option **Korrekturmodelle**.

Korrekturmodelle importieren

Mit diesem Befehl importieren Sie Korrekturmodelle in ASpect PQ.

- ▶ Klicken Sie auf **[Importieren]**.
- ▶ Wählen Sie die zu importierende Korrekturmodell-Datei aus und klicken Sie auf **[Öffnen]**.

Das Datenbankfenster **Import Korrekturmodell** erscheint.

- ▶ Klicken Sie auf **[Importieren]**.
 - ✓ Das Korrekturmodell wird in die Datenbank übernommen.

Korrekturmodelle exportieren

Mit diesem Befehl exportieren Sie das Korrekturmodell für die Nutzung auf einem anderen Computer.

- ▶ Klicken Sie auf **[Exportieren]**.
- ▶ Markieren Sie im Datenbankfenster **Export Korrekturmodell** das gewünschte Modell. Mehrfachauswahl ist möglich.
- ▶ Klicken Sie auf **[Exportieren]**.

- ▶ Geben Sie im Fenster **Speichern unter** den Namen und Speicherpfad ein und klicken Sie auf **[Speichern]**.
 - ✓ Die Datei mit dem Korrekturmodell wird gespeichert.

Korrekturmodelle löschen Mit diesem Befehl löschen Sie nicht benötigte Korrekturmodelle.


i Hinweis

Beachten Sie, dass nicht geprüft wird, ob das Korrekturmodell in einer Methode verwendet wird.

- ▶ Klicken Sie auf **[Löschen]**.
- ▶ Markieren Sie im Datenbankfenster **Korrekturmodell** das gewünschte Modell.
- ▶ Klicken Sie auf **[Löschen]**.
 - ✓ Das Korrekturmodell wird aus der Datenbank gelöscht.


10.2.5 Korrekturspektren löschen

Nicht benötigte Korrekturspektren können Sie aus der Datenbank löschen.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten / Datenverwaltung** mit dem Menübefehl **Extras | Datenverwaltung** oder dem Symbol .
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** die Option **Korrekturspektren** und klicken Sie auf **[Löschen]**.
- ▶ Wählen Sie im Datenbankfenster **Korrekturspektren** das zu löschende Spektrum und klicken Sie auf **[Löschen]**.
 - ✓ Es erfolgt eine Prüfung, ob das Spektrum in einem Korrekturmodell verwendet wird. Ist dies nicht der Fall, so wird das Korrekturspektrum gelöscht.


10.2.6 Protokollvorlagen importieren

Vorlagen für Druckprotokolle, die extern erstellt wurden, müssen Sie über die Datenverwaltung in ASpect PQ importieren:

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten / Datenverwaltung** mit einem Klick auf  oder dem Menübefehl **Extras | Datenverwaltung**.
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** die Option **Protokollvorlagen** und klicken Sie auf **[OK]**.
- ▶ Wählen Sie im Fenster **Öffnen** die Datei aus und klicken Sie auf **[Öffnen]**. Protokolldateien tragen die Erweiterung ".Ist".
 - ✓ Die Protokollvorlage wird in ASpect PQ importiert. Ordnen Sie nun die Protokollvorlage dem Druckinhalt zu (→ "Protokollvorlagen" S. 132).

10.2.7 Linienfavoriten verwalten

Linienfavoriten können im Fenster **Methode** festgelegt werden (→ "Eigene Favoritenlinien definieren" S. 33). Sie enthalten die für eine bestimmte Applikation verwendete Analyselinie und die linienabhängigen Methodenparameter. Linienfavoriten-Dateien haben die Erweiterung ".fav".

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten / Datenverwaltung** mit dem Menübefehl **Extras | Datenverwaltung** oder einem Klick auf .
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** die Option **Favoriten**.

Linienfavoriten importieren

Mit diesem Befehl importieren Sie einen Favoritendatensatz in ASpect PQ.

- ▶ Klicken Sie auf **[Importieren]**.
- ▶ Klicken Sie im Datenbankfenster **Favoriten – Detailansicht** auf **[Importieren]**.
- ▶ Wählen Sie die zu importierende Linienfavoriten-Datei aus und klicken Sie auf **[Öffnen]**.
 - ✓ Nach einer Abfrage wird der Favoritendatensatz Ihren Linienfavoriten hinzugefügt.

Linienfavoriten exportieren

Mit diesem Befehl exportieren Sie einen Favoritendatensatz für die Nutzung auf einem anderen Computer.

- ▶ Klicken Sie auf **[Exportieren]**.
- ▶ Markieren Sie im Datenbankfenster **Favoriten – Detailansicht** den gewünschten Datensatz. Mehrfachauswahl ist möglich.
- ▶ Klicken Sie auf **[Exportieren]**.
- ▶ Geben Sie im Fenster **Zieldatei** den Namen und Speicherpfad ein und klicken Sie auf **[Speichern]**.
als Zieldatei kann auch schon eine existierende Datei verwendet werden. In diesem Fall wird der Datensatz dort integriert.
 - ✓ Die Datei mit dem Datensatz der Linienfavoriten wird gespeichert.


Linienfavoriten löschen

Mit diesem Befehl löschen Sie nicht benötigte Linienfavoriten.

- ▶ Klicken Sie auf **[Löschen]**.
- ▶ Markieren Sie im Datenbankfenster **Favoriten – Detailansicht** den Datensatz.
- ▶ Klicken Sie auf **[Löschen]**.
 - ✓ Der markierte Datensatz wird aus der Datenbank gelöscht.

10.2.8 Worksheets importieren und exportieren

Sie können Worksheets importieren und exportieren. Optional können Sie die hinterlegten Methoden und Sequenzen mitgeben.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten / Datenverwaltung** mit dem Menübefehl **Extras | Datenverwaltung** oder dem Symbol .
- ▶ Wählen Sie in der Liste **Typ** die Option **Worksheet**.

- Worksheet exportieren
- ▶ Klicken Sie auf **[Exportieren]**.
 - ▶ Markieren Sie im Fenster **Worksheet exportieren** das betreffende Worksheet. Um die Methoden und Sequenzen ebenfalls zu exportieren, aktivieren Sie die Option **inklusive Sequenz und Methode(n)**.
 - ▶ Klicken Sie auf **[Exportieren]** und geben Sie einen Ordner und einen Namen für die Exportdatei ein.
 - ▶ Bestätigen Sie die Eingaben mit **[Speichern]**.
 - ✓ Das Worksheet wird mit der Erweiterung ".WST" exportiert.
- Worksheet importieren
- ▶ Klicken Sie auf **[Importieren]**.
 - ▶ Markieren Sie im Fenster **Worksheet Importieren** auf **[Importieren]**. Um die mit exportierten Methoden und Sequenzen ebenfalls zu importieren, aktivieren Sie die Option **inklusive Sequenz und Methode(n)**.
 - ▶ Wählen Sie im Standardfenster das Worksheet aus und klicken Sie auf **[Öffnen]**.
 - ✓ Das Worksheet wird importiert.

10.3 Ergebnisse im ASCII/CSV-Format speichern

Mess- und Analyseergebnisse 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 das Spaltentrennzeichen eingestellt (→ "Exportoptionen" S. 149).

- 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 (→ "Optionen zum fortlaufenden ASCII-Export" S. 150).
- 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 mit einem Klick auf die Probenzeile aus. Alle Probenzeilen markieren Sie mit dem Menübefehl **Bearbeiten | Alles markieren**.
 - ▶ Öffnen Sie mit dem Menüpunkt **Bearbeiten | Auswahl speichern** das Standardfenster **Speichern unter**.

Alternativ können Sie auch mit der rechten Maustaste auf die markierten Zeilen klicken und im Kontextmenü einen entsprechenden Menüpunkt wählen.
 - ▶ 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.

10.4 Einheiten spezifizieren

Im Fenster **Daten / Einheiten** werden programmweit verfügbare Einheiten verwaltet.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten / Einheiten** mit dem Menübefehl **Extras | Datenverwaltung** oder dem Symbol .


Es stehen jeweils 3 Vorzugsvarianten (bei Lösungen: mg/L, µg/L, ng/L; 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. Bei freier Definition ist unter Faktor der Konvertierungsfaktor einzugeben:

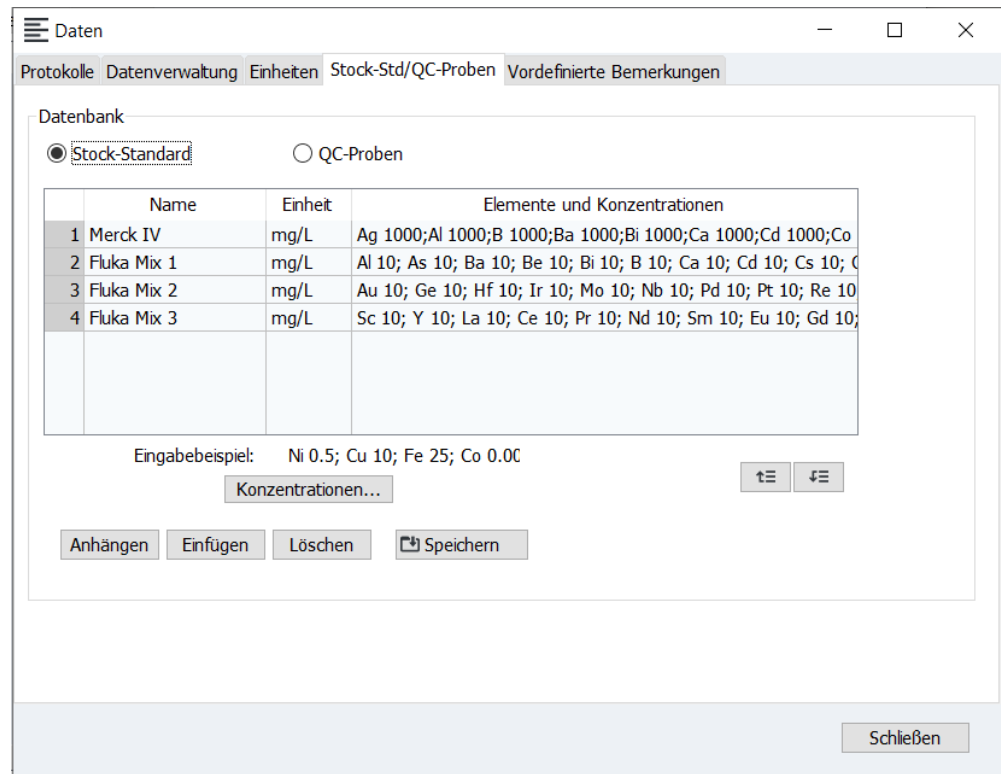
Option	Beschreibung	
Einheit	Bezeichnung der Einheit (max. 10 Zeichen)	
Kommentar	Bemerkungen (max. 20 Zeichen)	
Faktor	Faktor 1 entspricht 1 µg/L bzw. µg/kg, Faktor 1000 entspricht 1 ng/L bzw. ng/kg	
Art	fest	Einheit bezogen auf feste Probe
	flüssig	Einheit bezogen auf flüssige Probe (Lösung)
	flüssig, grav.	Einheit bezogen auf flüssige Probe, die eingewogen wird, z. B. Öl

Mit den Schaltflächen **[Anhängen]** und **[Einfügen]** werden neue Einheiten am Ende der Liste bzw. oberhalb der aktuellen Zeilenmarkierung eingefügt. Die Schaltfläche **[Löschen]** entfernt nur anwenderdefinierte Einheiten, die Vorzugseinheiten können nicht gelöscht werden. Änderungen werden durch **[Speichern]** permanent gesichert.

10.5 Datenbanken für Stocks und QC-Proben verwalten

Die Datenbanken mit den häufig verwendeten Stock-Standards und QC-Proben wird im Fenster **Daten / Stock-Std/QC-Proben** verwaltet. Diese Ein- und Multielementstandards stehen dann im gesamten Programm zur Verfügung.

- ▶ Öffnen Sie das Fenster **Daten / Stock-Std/QC-Proben** mit dem Menübefehl **Extras | Daten** oder dem Symbol .
- ▶ Mit Aktivieren der Optionen **Stock-Standard** oder **QC-Proben** wählen Sie die Anzeige in der Tabelle.



Fenster Daten / Stock-Std/QC-Proben

Tabellenspalte	Bedeutung
Name	Bezeichnung des Standards (max. 20 Zeichen) eingeben.
Einheit	Bezeichnung der Einheit (max. 10 Zeichen) des Standards wählen.
Elemente und Konzentrationen	Die Eingabe der Elementkonzentration erfolgt im Format "Element-symbol Konzentration" in der ausgewählten Einheit, z. B. Fe 0.5;Cu 10; Co 0.005. Alternativ öffnen Sie mit [Konzentration] das gleichnamige Eingabefeld, in dem Sie jedem Element die Konzentration zuordnen können.

Die Schaltflächen haben folgende Funktionen:

Schaltfläche	Funktion
[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.
[Konzentration]	Eingabefeld für Element und Konzentration des markierten Standards öffnen.

10.6 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 dem Feld **Bemerkungen** in den entsprechenden Fenstern eingefügt werden.

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 **[Vorlage bearbeiten]** die Liste der **Bemerkungen**.
- ▶ Erstellen Sie eine neue Bemerkung mit Klick auf **[Neu]**. Geben Sie eine **Bezeichnung** ein, unter der die Bemerkung anwählbar ist. Im Feld **Text** tragen Sie die eigentliche Bemerkung ein.
- ▶ Eine Bemerkung kann über **[Ändern]** editiert oder über **[Löschen]** aus der Auswahlliste entfernt werden.

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**:

Menü Bearbeiten ...	Beschreibung
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 aktiviert (mit Häkchen), 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 mit einem Klick auf die Probenzeile aus.
Alle Probenzeilen markieren Sie mit dem Menübefehl **Bearbeiten | Alles markieren**.
- ▶ Aktivieren Sie gegebenenfalls den Menübefehl **Bearbeiten / Spaltentitel**, um die Titelzeile mit zu kopieren.
- ▶ Wählen Sie den entsprechenden Menübefehl, um die Ergebnisse in die Zwischenablage zu kopieren.

Grafiken als Screenshot kopieren

Grafikfenster und Grafiken von Kalibrierkurven, Intensitätssignalen oder Emissionssignalen können als Screenshot in die Zwischenablage kopiert werden.

- ▶ Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Grafik. Es erscheint ein Kontextmenü

mit zwei Kopierbefehlen.

- ▶ Wählen Sie den Kopierbefehl; um das gewünschte Objekt zu kopieren: nur die Grafik oder das gesamte angezeigte Fenster kopieren.

Das gewählte Objekt wird in die Zwischenablage kopiert und steht anderen Windowsanwendungen zur Verfügung.

11 ASpect PQ anpassen

Im Fenster **Optionen** werden folgende Einstellungen vorgenommen, die für die gesamte Bedienung von ASpect PQ gültig sind:

- Ansichtsoptionen
- Speicherorte für Dateien
- Parameter für den Datenexport
- Allgemeingültige Einstellungen für den Analysenablauf

Die vorgenommenen Einstellungen bleiben nach dem Verlassen und Wiederstarten von ASpect PQ erhalten.

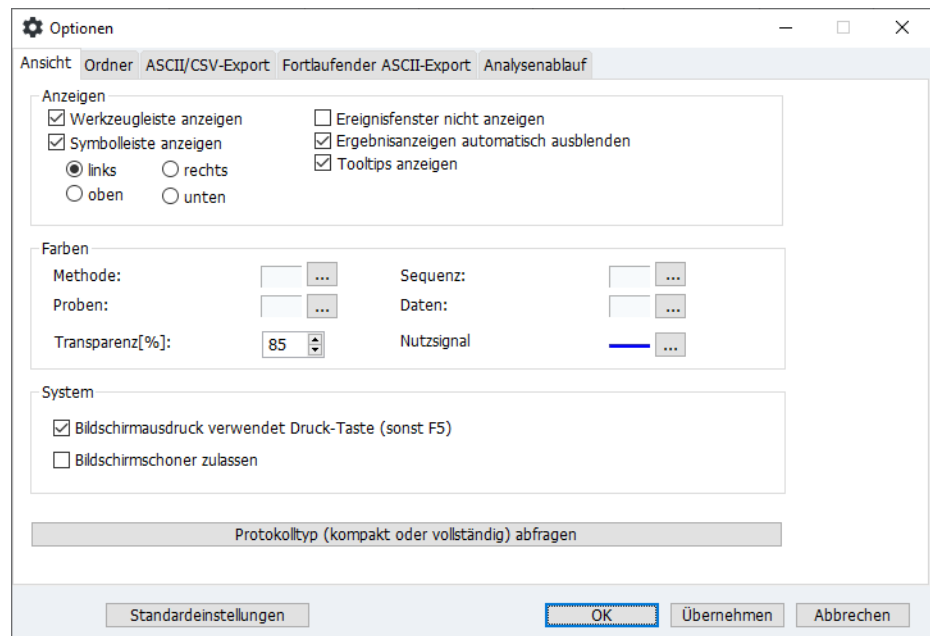
Fenster Optionen öffnen

Das Fenster **Optionen** öffnen Sie mit dem Menübefehl **Extras | Optionen**.

11.1 Ansichtsoptionen

Im Fenster **Optionen / Ansicht** legen Sie die auf der Arbeitsoberfläche sichtbaren Funktionen fest.

► Öffnen Sie das Fenster **Optionen / Ansicht** mit dem Menübefehl **Extras | Optionen**.



Fenster Optionen / Ansicht

Option	Beschreibung
Werkzeugleiste anzeigen	Werkzeugleiste mit den Schaltflächen für die Messroutine anzeigen.

Symbolleiste anzeigen	Symbolleiste mit den großen Schaltflächen für den Schnellzugriff anzeigen und Symbolleistenposition auswählen. (Die Position der Symbolleiste kann durch Ziehen mit der Maus ebenfalls geändert werden, wobei die Einstellung bis zum nächsten Programmstart nicht gespeichert wird).
Ereignisfenster nicht anzeigen	Die Ereignisfenster (z. B. Verzögerungszeit) nicht anzeigen. Die Meldungen werden stattdessen in der Statusleiste des Hauptfensters eingeblendet.
Ergebnisanzeigen automatisch ausblenden	Ergebnisfenster werden ausgeblendet, 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.
Farben	Die Schaltfläche *** öffnet den Farbauswahl-Dialog. Es können vordefinierte oder neu definierte Farben für den Listen-Hintergrund definiert werden.
Bildschirmausdruck verwendet Druck-Taste	Standardmäßig wird der Bildschirmausdruck mit [F5] ausgelöst. Die Taste [Drucken] auf der Tastatur wird dabei für die Windows-Zwischenablage-Funktion verwendet. Ist dieses Kontrollkästchen aktiviert, dann löst die Taste [Drucken] den Bildschirmausdruck aus. Diese Option wird erst nach Neustart von ASpect PQ aktiv.
Bildschirmschoner zulassen	Wenn aktiviert, schaltet sich der Windows-Bildschirmschoner in Eingabepausen ein.
[Protokolltyp (kompakt oder vollständig) abfragen]	Beim Druck von Ergebnisfenstern über den Menüpunkt Datei Drucken Aktives Fenster kann zwischen einem vollständigem oder einem kompakten Protokoll gewählt werden. Ein Klick auf diese Schaltfläche setzt die Auswahl Diesen Ergebnisreport immer verwenden wieder zurück, sodass der Protokolltyp erneut ausgewählt werden kann.

Die Schaltfläche **[Standardeinstellungen]** setzt alle Optionen und gespeicherten Fensterpositionen auf voreingestellte Werte zurück.

11.2 Speicherpfade

Bei der Installation werden Speicherpfade für Dateien festgelegt. Sie werden im Fenster **Optionen / Ordner** angezeigt und können zum Teil hier editiert werden.

► Öffnen Sie das Fenster **Optionen / Ordner** mit dem Menübefehl **Extras | Optionen**.

Ordner	Beschreibung
Programm	Installationspfad der ausführbaren Programmdateien.
Arbeitsverzeichnis	Verzeichnis für Anwenderdaten Das Arbeitsverzeichnis enthält weitere Unterordner. Es 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. Klicken Sie auf [...], um den neuen Ordner auszuwählen. Auch beim Öffnen und Speichern der Probeninformationsdateien kann ein abweichender Pfad ausgewählt werden.
Export/Import	Voreingestellter Pfad für den Export und Import von Methoden- und Sequenzdaten und Export von Ergebnisdaten als CSV - Dateien Dieser Pfad kann geändert werden. Klicken Sie auf [...], um den neuen Ordner auszuwählen. Auch 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 PQ notwendige Daten ablegt.

Die Schaltfläche **[Hinzufügen]** legt neue Unterordner für Ergebnisspeicherung unterhalb des Ordners Ergebnisse an. Leere Ordner können gelöscht oder umbenannt werden.

11.3 Exportoptionen

Im Fenster **Optionen / ASCII/CSV-Export** werden die Parameter für den ASCII-Export von Ergebnisdaten festgelegt. Die Parameter gelten sowohl für den automatisch fortlaufenden als auch den manuellen Datenexport (→ "Ergebnisse im ASCII/CSV-Format speichern" S. 142).

- Öffnen Sie das Fenster **Optionen / ASCII/CSV-Export** mit dem Menübefehl **Extras | Optionen**.

Einstellungen

Option	Beschreibung
Dezimaltrennzeichen	Gibt das Trennzeichen für Dezimalzahlen an.
Listentrennzeichen	Gibt an, durch welches Zeichen die Elemente einer Liste voneinander getrennt werden.

Für den Export der Ergebnislisten wählen Sie das **Dezimaltrennzeichen** und das **Listentrennzeichen**.

Im Bereich **Zu exportierende Ergebnis-Felder** wird festgelegt, welche Spalten der Ergebnistabelle in die ASCII-Datei exportiert werden. **Alle** exportiert sämtliche Spalten der Ergebnisliste (mit allen Unterkarten). Die Option **nur ausgewählte Felder** öffnet eine Liste, in der die zu exportierenden Spalten ausgewählt werden können.

[Standardeinstellungen] setzt die Optionen und gespeicherten Fensterpositionen auf voreingestellte Werte zurück.

11.4 Optionen zum fortlaufenden ASCII-Export

Im Fenster **Optionen / Fortlaufender ASCII-Export** wird der automatische 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.

- Öffnen Sie das Fenster **Optionen / Fortlaufender ASCII-Export** mit dem Menübefehl **Extras | Optionen**.

Export von Ergebnisdaten

Das Kontrollkästchen **Fortlaufender ASCII-Export von Ergebnisdaten** aktiviert die Exportfunktion. Danach ist eine Option für den Dateinamen zu wählen:

Option	Beschreibung
"Methodenbezeichnung".csv	Der Dateiname entspricht der Bezeichnung der Methode. Die Dateierweiterung ist ".csv". Die Datei wird im Standardpfad Export/Import (Fenster Optionen / Ordner) abgelegt.
"Bezeichnung der Ergebnisdatei".csv	Der Dateiname entspricht der Bezeichnung der Ergebnisdatei. Die Dateierweiterung ist ".csv". Die Datei wird im Standardpfad Export/Import (Fenster Optionen / Ordner) abgelegt.
anderer	Dateiname und Pfad können frei vergeben werden. Die Schaltfläche [...] öffnet das Standardfenster Speichern unter , um einen Speicherpfad und einen Dateinamen zu vergeben. Die Daten werden fortlaufend in diese Datei geschrieben werden, bis ein neuer Name vergeben oder eine andere Option zur Bezeichnung ausgewählt wird.
Für jede Probe eine Datei erzeugen	Der Dateiname wird um die Zeilennummer der Ergebnisliste und den Probenamen ergänzt. Nicht erlaubte Zeichen werden durch Unterstriche ersetzt (z. B. Testmethode-001 QC 1 mg_L.csv).

Spektrenexport

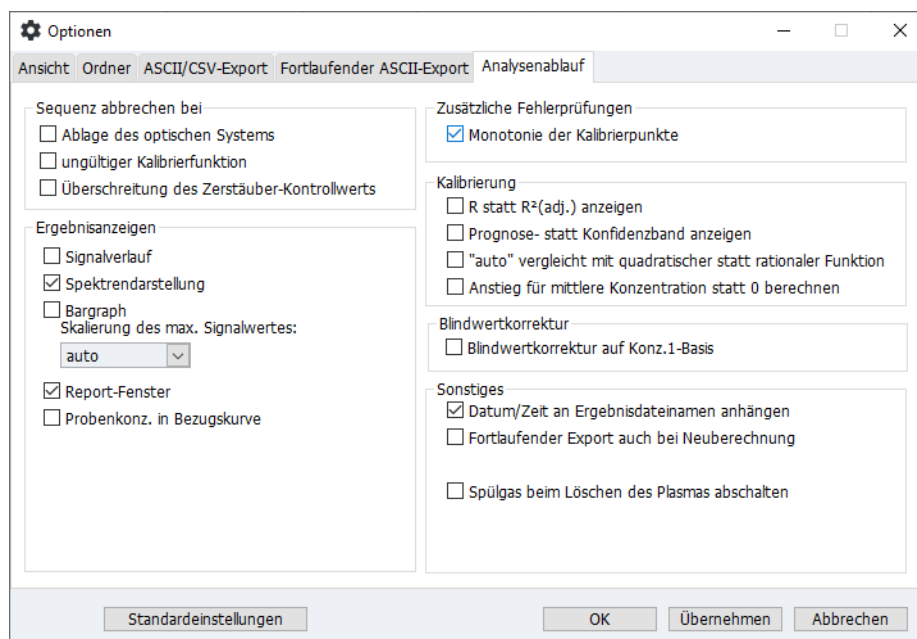
Für den Spektrenexport aktivieren Sie die Option **Fortlaufender Spektren-Export (CSV)** und wählen einen Speicherpfad.

Die Spektren werden zusätzlich als CSV-Dateien in den spezifischen Exportpfad exportiert. Der Dateiname wird nach dem Schema "Listenzeile-Probenbezeichnung-Linienbezeichnung-Wiederholungsmessung" gebildet, z. B. 0007-Probe-AI309-02.csv.

11.5 Optionen zum Analysenablauf

Im Fenster **Optionen / Analysenablauf** legen Sie allgemeingültige Einstellungen für den Analysenablauf fest.

- Öffnen Sie das Fenster **Optionen / Analysenablauf** mit dem Menübefehl **Extras | Optionen**.



Fenster Optionen / Analysenablauf

Sequenz abbrechen nach folgenden Fehlern

Die Analyse wird hinsichtlich folgender Fehler überwacht und kann nach Auftreten dieser Fehler abgebrochen werden:

Option	Beschreibung
Ablage des optischen Systems	Stoppt, wenn die Einstellung der Wellenlänge (Ne-Korrektur) fehlerhaft ist.
Ungültige Kalibrierfunktion	Stoppt, wenn die Kalibrierfunktion nicht berechnet werden konnte.
Überschreitung des Zerstäuber-Kontrollwerts	Stoppt, wenn der Zerstäuber-Kontrollwert überschritten ist. Während der Kalibrierung wird der Kontrollwert des Zerstäubers ermittelt. Wenn sich während der nachfolgenden Analyse der Kontrollwert ändert, ist das ein Hinweis darauf, dass Partikel den Zerstäuber zusetzen.

Zusätzliche Fehlerprüfung

Option	Beschreibung
Monotonie der Kalibrierpunkte	Es erfolgt ein Test auf Monotonie der Kalibrierpunkte. Der Monotonietest untersucht, ob höhere Standardkonzentrationen auch zu höheren Messwerten führen.

Ergebnisanzeigen

Option	Beschreibung
Signalverlauf	Während des Analysenablaufs wird ein Fenster mit einer Darstellung des zeitabhängigen Verlaufs des Messsignals angezeigt.
Spektrendarstellung	Während des Analysenablaufs wird ein Fenster mit einer Darstellung des aufgenommenen Spektralbereichs angezeigt.
Bargraph	Zeigt gemessene Intensitäten als Balkendiagramm an.

Skalierung des max. Signalwertes	Legt das Maximum der Messwert-Achse für die Darstellungen des Signalverlaufs fest. Auto: Automatische Achsenskalierung. Alternativ kann diese Einstellung auch mit der Menüfunktion An-sicht Skalierung vorgenommen werden.
Reportfenster	Während des Analysenablaufs wird ein Fenster angezeigt, das Statusinformationen zum Plasma ausgibt.
Probenkonz. in Bezugskurve	Zeigt das Fenster Probenkonz. in Bezugskurve mit der aktuellen Kalibrier- und, soweit bereits gemessen, Rekalibrierkurve an. Nach der Probenmessung wird die Berechnung der unkorrigierten Konzentration aus der Emission mit roten Hilfslinien verdeutlicht. Im Falle der Additions-Kalibrierung wird die umgerechnete Kalibrierkurve angezeigt.

Kalibrierung

Auf dieser Karte nehmen Sie für die Kalibrierung grundlegende Einstellungen vor. In der Voreinstellung sind alle Kontrollkästchen deaktiviert.

Option	Beschreibung
Anzeige R statt R2 (adj.) bei Kalibrierdaten	Wenn aktiviert, wird der Korrelationskoeffizient angezeigt. In der Standardeinstellung ist das korrigierte (adjustierte) Bestimmtheitsmaß vorgesehen.
Prognose- statt Konfidenzband anzeigen	Wenn aktiviert, wird das Prognoseband für die Kalibrierung angezeigt. Das Konfidenzband ist in den Standardeinstellungen vorgesehen.
"auto" vergleicht mit quadratischer statt rationaler Funktion	"auto" bezeichnet die automatische Auswahl der Kalibrierfunktion (→ "Kalibrierparameter eingeben – Karte Kalib." S. 41). Wenn aktiviert, wird die quadratische Funktion für den Vergleich herangezogen. Die Standardeinstellung ist die gebrochenrationale 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.

 Hinweis

Für eine Kompatibilität der Berechnung der quadratischen Kalibrierfunktion nach DIN 38402 und ISO 8466-2 sind alle oben genannte Optionen zu aktivieren.

Blindwertkorrektur

Für die Blindwertkorrektur kann zwischen 2 verschiedenen Berechnungsverfahren gewählt werden: Konz.1-basiert oder Konz.2-basiert.

Beim Konz.2-basierten Berechnungsverfahren wird zunächst die Originalkonzentration des Blindwerts ($Conc_{2_{BV}}$) auf Basis der Proben-IDs des Blindwerts berechnet. Bei Ermittlung der Konz.2 der Probe wird $Conc_{2_{BV}}$ berücksichtigt.

Beim Konz.1-basierten Berechnungsverfahren wird die direkt aus der Probe ermittelte Blindwertkonzentration ($Conc_{1_{Blank}}$) 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**.

Sonstiges

Option	Beschreibung
Datum/Zeit an Ergebnisdateien anhängen	Aktuelle PC-Zeit beim Messstart wird automatisch an den Namen der Ergebnisdatei angehängt.
Fortlaufender Export auch bei Neuberechnung	Nach einer Neuberechnung werden die Ergebnisse automatisch exportiert.
Zeitstempel bei Neuberechnung nicht aktualisieren	Nach Neuberechnen der Ergebnisse bleiben die Originalzeiten der Messung erhalten.
Spülgas beim Löschen des Plasma abschalten	Um Gas zu sparen, wird das Spülgas beim Löschen des Plasmas abgeschaltet.

12 Optionales Modul 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ

Das optionale Modul 21 CFR Part 11 Compliance ASpect PQ 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

Die Benutzerverwaltung sieht eine Administratorebene und vier Benutzerebenen vor. Folgende Funktionen sind für einen Benutzer mit Administratorrechten zugänglich:

- Flexible Systemkonfigurierung (Kennwort- und Anmelderichtlinien, Audittrail, Signaturen, Datenverzeichnisse)
- Einrichtung der Benutzer in Benutzer-Ebenen mit abgestuften Rechten einrichten
- Vergabe von Kennwörtern
- Zuweisung eines eigenen Arbeitsverzeichnis für Methoden, Sequenzen und Ergebnisse für den Benutzer
- Ansicht und Export des erzeugten Audit Trails (Ereignis-Protokoll)

Bei installierter und konfigurierter Benutzerverwaltung wird der Menüpunkt **System** in ASpect PQ 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.

Hinweis

Um den Sicherheitsbedürfnissen nachzukommen, muss das Betriebssystem Microsoft Windows mit den entsprechenden Konfigurationsmöglichkeiten verwendet werden. Dies betrifft Datei-Zugriffsrechte und weitere Einstellungen, die von einem autorisierten Systemadministrator vorgenommen werden sollten.

12.1 Benutzerverwaltung

12.1.1 Hierarchie und Funktionszugriff

Die Benutzerverwaltung sieht eine Administratorebene und vier Benutzerebenen vor.

Die Benutzerebenen unterliegen folgender Hierarchie:

Administrator > Ebene 1 > Ebene 2 > Ebene 3 > Ebene 4.

Den einzelnen Benutzerebenen sind folgende Funktionen zugeordnet

- Administratorebene Der Benutzer besitzt alle Rechte in ASpect PQ sowie Zugriff auf alle Funktionen der Benutzerverwaltung.
- Ebene 1 Benutzer der Ebene 1 haben uneingeschränkt Zugriff auf alle Funktionen von ASpect PQ, jedoch keinen Zugang zur Benutzerverwaltung.
- Ebene 2 Wie Benutzerebene 1 ausgenommen:
- Löschen von Methoden (Kennung M1)
 - Löschen von Sequenzen (Kennung P1)
 - Löschen von QC-Regelkarten (Kennung Q1)
 - Löschen von Ergebnisdateien (Kennung R1)
- Ebene 3 Wie Benutzerebene 2 ausgenommen:
- Speichern von Methoden (Anlegen in Methodendatenbank) (Kennung M2)
 - Speichern von Sequenzen (Anlegen in Sequenzdatenbank) (Kennung P2)
 - Übernehmen von Peakablagen (Kennung W1)
- Ebene 4 Wie Benutzerebene 3 ausgenommen:
- Ändern von Methodenparametern (Kennung E1)
- (Dieser Benutzer kann nur bereits erstellte Methoden und Sequenzen laden und Messungen ausführen).

Funktion	Kennung*	Admin.	Ebene 1	Ebene 2	Ebene 3	Ebene 4
Benutzerverwaltung verwenden		+	-	-	-	-
Methoden löschen	M1	+	+	-	-	-
Sequenzen löschen	P1	+	+	-	-	-
QC-Regelkarten löschen	Q1	+	+	-	-	-
Ergebnisdateien löschen	R1	+	+	-	-	-
Methoden speichern	M2	+	+	+	-	-
Sequenzen speichern	P2	+	+	+	-	-
Ändern von Peakablagen	W1	+	+	+	-	-
Ändern von Protokollvorlagen	L1	+	+	-	-	-
Ändern von Methoden	E1	+	+	+	+	-
Laden von Methoden und Sequenzen		+	+	+	+	+
Ausführen von Messungen		+	+	+	+	+

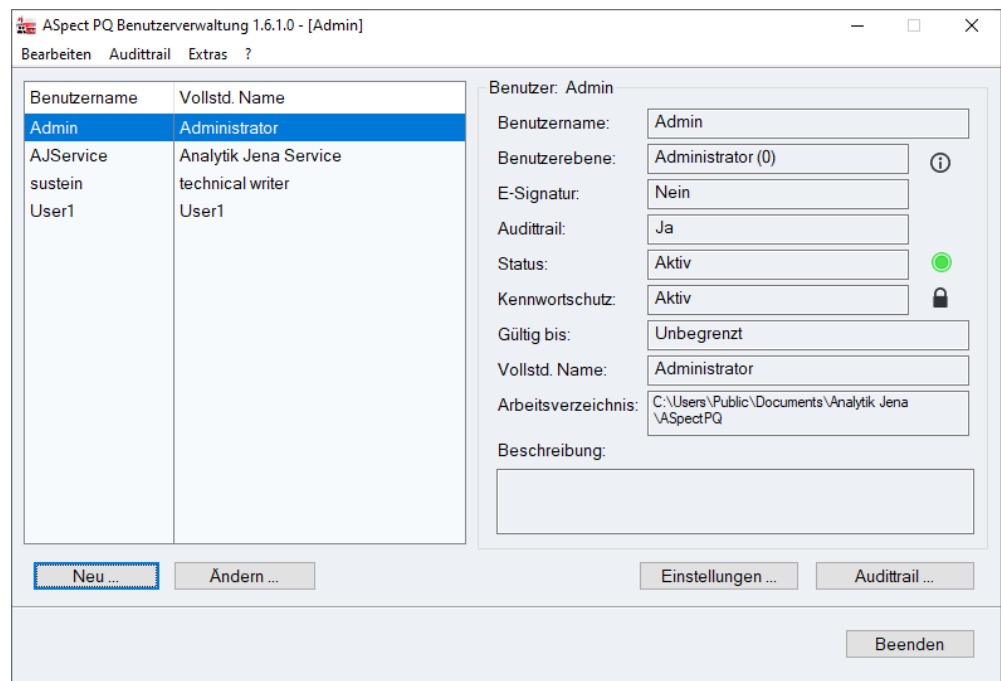
*Die Kennung wird in Bedienhinweisen verwendet.

12.1.2 Benutzerverwaltung einrichten

Die Benutzerverwaltung kann beim ersten Start der Benutzerverwaltung nach der Installation oder zu einem späteren Zeitpunkt von Benutzern mit ASpect PQ-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.

- ▶ Wählen Sie den Menübefehl **System | Benutzerverwaltung** oder starten Sie die Benutzerverwaltung über den Eintrag im Startmenü von Windows.
- ▶ Melden Sie sich mit einem Administrator-Profil an.
 - ✓ Es öffnet sich das Fenster **Benutzerverwaltung**.



Fenster Benutzerverwaltung

Das Fenster enthält eine Liste mit den eingetragenen Benutzernamen und den dazugehörigen vollständigen Namen. Auf der rechten Seite des Dialogfensters werden die Einzelheiten des Benutzerprofils des ausgewählten Nutzers angezeigt.

Anzeige- und Bedienelemente

Option	Beschreibung
Benutzername	Anmeldename des Benutzers
Vollstd. Name	Vollständiger Name des Benutzers
Benutzerebene	Administrator, Ebene 1 bis Ebene 4
E-Signatur	Ja: Der Anwender kann Ergebnisdaten elektronisch signieren. Nein: Der Anwender kann nicht elektronisch signieren.
Status	Aktiv: Der Benutzername kann verwendet werden (Grüner Kreis). Gesperrt: Benutzername ist deaktiviert und kann nicht verwendet werden (Roter Kreis).

Kennwortschutz	Aktiv: Die Benutzeranmeldung erfordert ein Kennwort (Schlüssel) Nicht aktiv: Benutzeranmeldung ist ohne Kennwort möglich (durchgestrichener Schlüssel.)
Gültig bis	Unbegrenzt: Das Kennwort läuft nie ab. Datum/Tage Der Anwender muss das Kennwort nach Ablauf der spezifizierten Frist ändern.
Beschreibung	Optionale Beschreibung des Benutzers

Schaltflächen

Schaltfläche	Beschreibung
[Neu ...]	Neuen Benutzer anlegen. Das Fenster Benutzerdaten hinzufügen wird geöffnet.
[Ändern ...]	Benutzerdaten für markierte Tabellenzeile ändern. Das Fenster Benutzerdaten ändern wird für die markierte Tabellenzeile geöffnet. Das Fenster kann auch durch Doppelklick auf die entsprechende Tabellenzeile aufgerufen werden.
[Einstellungen...]	Konfiguration der Benutzerverwaltung ändern.
[Audittrail]	Audittrail (Ereignis-Protokoll)
[?]	Onlinehilfe aufrufen.
[Beenden]	Die Anwendung beenden.

12.1.2.1 Benutzerverwaltung konfigurieren

Im Fenster **Einstellungen** können Sie mit folgenden Optionen die Benutzerverwaltung generell konfigurieren:

- Richtlinien für Kennwort
 - Anmeldung und Audittrail
 - Signaturbedeutungen
 - Verwendete Datenverzeichnisse
- ▶ Klicken Sie im Fenster **ASpect PQ Benutzerverwaltung** auf **[Einstellungen]**.
Das Fenster **Einstellungen** wird geöffnet.
- ▶ Wählen Sie in der linken Spalte die zu ändernde Optionsgruppe.

Die Einstellungen gelten für neu erstellte Benutzerkonten und sind daher zweckmäßigerweise nach der Installation durchzuführen. Beim Schließen des Fensters mit **[OK]** werden alle Einstellungen gespeichert, durch **[Abbrechen]** werden die geänderten Einstellungen verworfen. Mit der Schaltfläche **[Auf Standardwerte setzen]** können Sie die Standardwerte für eine ausgewählte Option wiederherstellen. Die Einstellungen der anderen Bereiche bleiben davon unberührt.

Anmeldung

Einstellungen für Anmelde- und Kennwortrichtlinien

Anmelde-Richtlinien (für neu erteilte Benutzernamen)

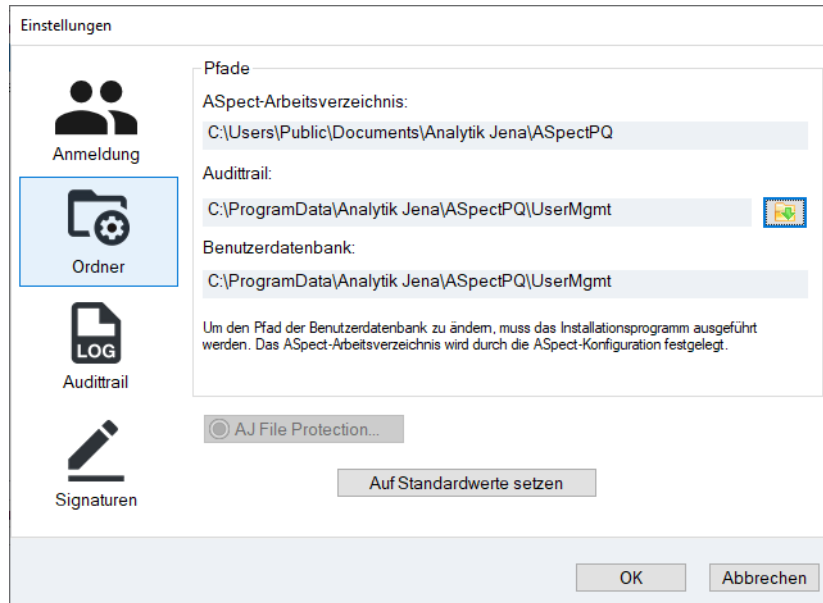
Option	Beschreibung
Anzahl der Anmeldeversuche	Anzahl der ungültigen Anmeldeversuche (max. 10) Bei Überschreitung wird ASpect PQ nach einer Wartezeit beendet und muss für eine weitere Anmeldung erneut gestartet werden. Es erfolgt ein Eintrag (Warnung) in die Audittrail-Datei.
Bei Überschreiten Benutzer sperren	Wenn aktiviert, wird der Benutzer nach Überschreiten der Anzahl Anmeldeversuche gesperrt.
Mindestlänge des Benutzernamens	Mindestanzahl der Zeichen für neu angelegte Benutzernamen Maximale Zeichenzahl: 10

Kennwort-Richtlinien (für neu erteilte Kennwörter)

Option	Beschreibung
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 Passwortänderung angewendet.
"Kennwort bei der nächsten Anmeldung ändern" aktivieren	Für neu angelegte Benutzer wird standardmäßig das Kontrollkästchen Kennwort bei der nächsten Anmeldung ändern aktiviert. Der Benutzer wird dann bei der nächsten Anmeldung in ASpect PQ zur Kennwortänderung aufgefordert.

Kennwort läuft ab nach (Tagen)	Nach Ablauf der Frist wird der Benutzer bei der Anmeldung bei ASpect PQ 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).
Mindestlänge des Kennworts	Mindestanzahl der Zeichen für neu angelegte Kennwörter. Anzahl Zeichen:3 bis 10

Ordner



Einstellungen für Verzeichnisse

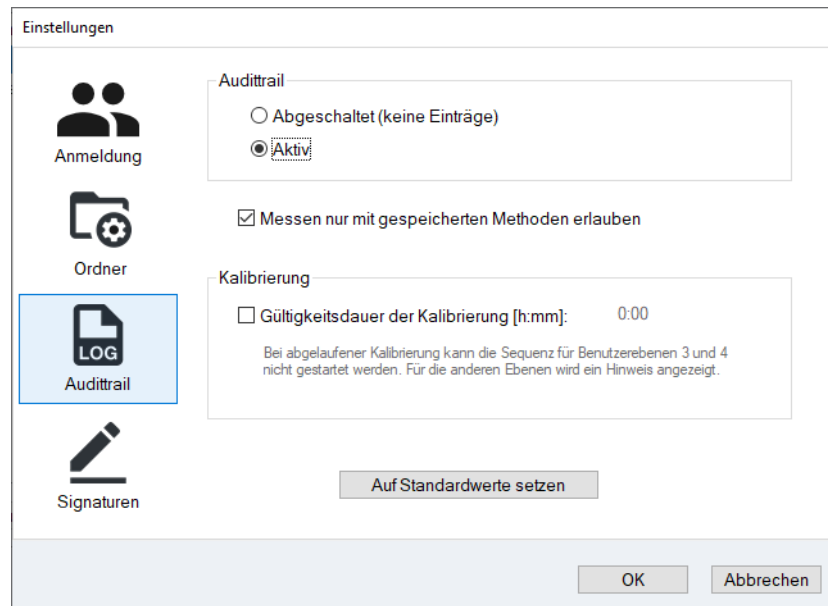
Das ASpect-PQ-Arbeitsverzeichnis und das Verzeichnis für den Audit-Trail-Datei kann spezifiziert werden.

Pfad	Beschreibung
ASpect-Arbeitsverzeichnis	Arbeitsverzeichnis von ASpect PQ. Das Arbeitsverzeichnis enthält die Methoden- und Sequenzdatenbank und die Ergebnisdateien. Das Arbeitsverzeichnis wurde bei der Installation von ASpect PQ festgelegt und kann hier geändert werden.
Audittrail	Pfad der Audittrail-Datei. Der Pfad kann geändert werden.
Benutzerdatenbank	Pfad der Benutzerdatenbank Dieser Pfad kann nur mit Hilfe des Installationsprogramms geändert werden.

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. Betätigen der Schaltfläche öffnet ein Fenster mit einer Liste der geschützten Verzeichnisse.

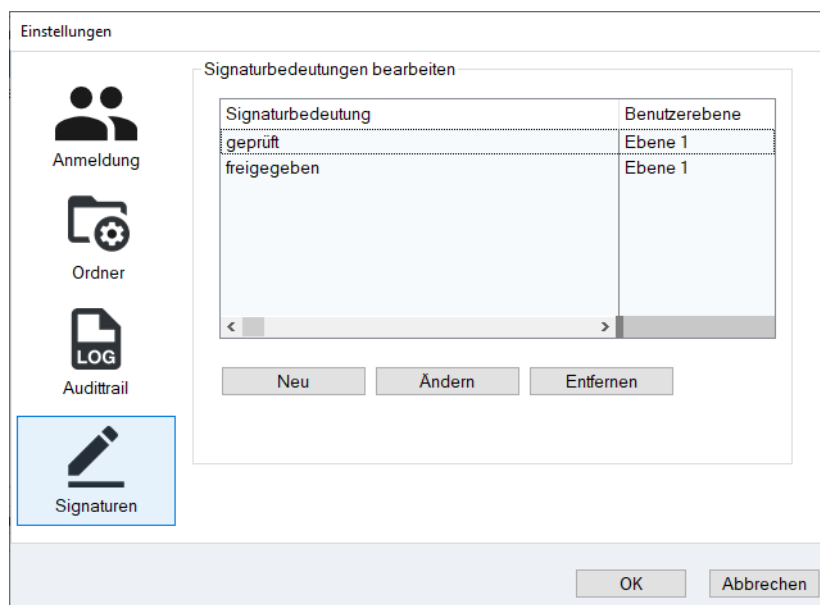
Audittrail



Einstellungen für die Audittrail-Daten

Option	Beschreibung
Abgeschaltet (keine Einträge)	Es erfolgen keine Einträge in die Audittrail-Datei (Ereignisprotokoll).
Aktiv	Es erfolgen Einträge in die Audittrail-Datei (Ereignisprotokoll).
Messen nur mit gespeicherten Methoden erlauben	Wenn aktiviert, kann eine Messung in ASpect PQ nur dann gestartet werden, wenn eine Methode geladen und diese seit dem letzten Speichern der Methode nicht mehr geändert wurde.
Gültigkeitsdauer der Kalibrierung [hh:mm]	Wenn aktiviert, kann der Gültigkeitszeitraum der Kalibrierung spezifiziert werden. Für Benutzerebene 3 und 4 muss die Kalibrierung vor dem Messstart aktualisiert werden. Für andere Ebenen wird ein Hinweis angezeigt.

Signaturen

**Signaturbedeutungen bearbeiten**

Die Liste zeigt die Signaturbedeutungen an, die beim Signieren ausgewählt werden können.

Schaltfläche	Beschreibung
[Neu]	Hinzufügen einer Signaturbedeutung, z. B. Erstellt, Geprüft, Freigeben (Max. 30 Zeichen).
[Ändern]	Ändern der in der Liste markierten Signaturbedeutung.
[Entfernen]	Löschen der in der Liste markierten Signaturbedeutung.

12.1.2.2 Anlegen eines neuen Benutzerkontos

Nur Benutzer mit Administratorrechten können ein neues Benutzerkonto einrichten.

- Klicken Sie im Fenster **Benutzerverwaltung** auf die Schaltfläche **[Neu]**, um ein neues Benutzerkonto anzulegen.

Es öffnet sich das Fenster **Benutzerdaten hinzufügen**.

Benutzerdaten bearbeiten

► Nehmen Sie folgende Einstellungen in den Eingabefeldern vor:

Option / Feld	Beschreibung
Benutzername	Name, mit dem sich der Benutzer anmeldet. Groß- und Kleinschreibung wird nicht geprüft. Die Mindestlänge hängt von den Konfigurationen unter Anmeldung/Kennwort ab (→ "Benutzerverwaltung konfigurieren" S. 157). max. 32 Zeichen.
Vollständiger Name	Vollständiger Name des Benutzers. Dieser Name wird als Bestandteil der elektronischen Signatur verwendet. Max. 30 Zeichen
Beschreibung	Feld für Notizen. Die Eingabe ist optional.
Ebene	Benutzerebene
Kennwort	Der Dialog zur Kennworteingabe wird geöffnet. Max. Kennwortlänge: 20 Zeichen. Die Mindestlänge und andere Kennwortrichtlinien sind konfigurierbar (→ "Benutzerverwaltung konfigurieren" S. 157). Bei Kennwörtern wird Groß-/Kleinschreibung unterschieden. Bei Bestätigung des Kennwortdialogs ohne Eingabe eines Kennworts wird der Kennwortschutz aufgehoben. Symbol Schloss : Der Kennwortschutz ist aktiviert. Symbol offenes Schloss : Der Benutzername verwendet kein Kennwort.
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.

Benutzerspezifisches Arbeitsverzeichnis	Wenn aktiviert, wird für den Benutzer ein eigenes Arbeitsverzeichnis nach folgendem Schema eingestellt: \ASpect-Arbeitsverzeichnis\Benutzername. Bei der Erstanmeldung in ASpect PQ wird die entsprechende Verzeichnisstruktur angelegt.
E-Signatur verwenden	Wenn aktiviert, kann der Benutzer Messergebnisse elektronisch signieren.
Audit Trail betrachten	Erlaubt den Benutzer den Audit Trail anzuschauen.
Benutzernamen sperren	Wenn aktiviert, kann der Benutzername nicht verwendet werden. Der Benutzername kann zeitweise deaktiviert werden. Durch die Deaktivierung (im Gegensatz zur Entfernung) eines Benutzernamens wird verhindert, dass für neu angelegte Benutzer der Benutzername erneut vergeben werden kann.
Benutzer muss Kennwort bei nächster Anmeldung ändern	Beim nächsten Start von ASpect PQ wird der Benutzer zur Kennwortänderung aufgefordert.

- ▶ Mit **[OK]** bestätigen Sie die Eigenschaften des neuen Benutzerkontos.

12.1.2.3 Ändern eines bestehenden Benutzerkontos

- ▶ Wählen Sie das zu ändernde Benutzerkonto durch Anklicken in der Tabelle des Dialogfensters **Benutzerverwaltung** aus und betätigen Sie die Schaltfläche **[Ändern]**.

Es öffnet sich das Dialogfenster **Benutzer Eigenschaften** mit den des ausgewählten Kontos (→"Anlegen eines neuen Benutzerkontos" S. 161).

12.1.3 Kennwort ändern

Je nach Vereinbarung im Benutzerkonto kann oder muss der Benutzer das zugewiesene Kennwort in regelmäßigen Abständen ändern.

- ▶ Wählen Sie den Menübefehl **System | Kennwort ändern** in ASpect PQ.
Es öffnet sich das Fenster **Kennwort ändern**.
- ▶ Geben Sie im Eingabefeld das alte Kennwort und zweimal das neue Passwort ein und klicken Sie auf **[OK]**.

Bei fehlerfreier Eingabe erscheint die Meldung "Kennwort wurde geändert".

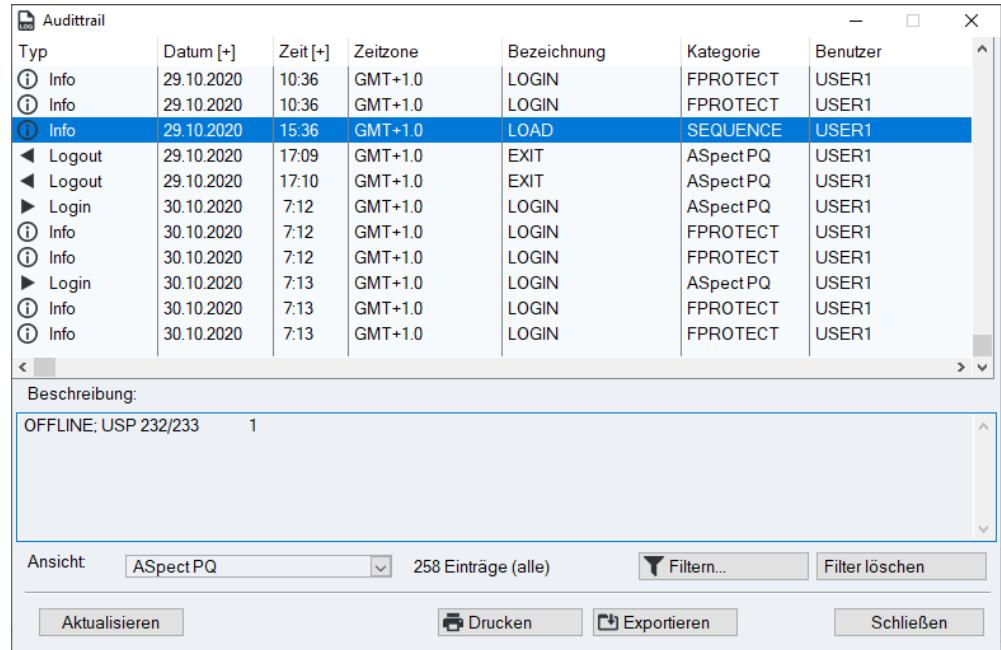
12.2 Audittrail anzeigen, drucken und exportieren

In der Audittrail-Datei werden bestimmte Systemereignisse und zusätzlich alle Warn- und Fehlermeldungen von ASpect PQ aufgezeichnet.

- ▶ Klicken Sie im Fenster **Benutzerverwaltung** auf die Schaltfläche **[Audittrail...]**.
oder:
- ▶ Wählen Sie in ASpect PQ den Menübefehl **System | Audittrail**.

Folgende Funktionen stehen für den Audittrail zur Verfügung:

- Ansicht
- Aktualisierung
- Export als CSV-Datei (nur wenn der Audittrail aus dem Fenster **Benutzerverwaltung** aufgerufen wurde)



Fenster Audittrail, aus dem Fenster Benutzerverwaltung aufgerufen

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 Eintrags (PC-Uhr) Mit dem [+] und [-] Schaltflächen im Tabellenkopf beider Spalten können die Einträge nach auf- und absteigenden Datum sortiert werden.
Zeitzone	Zum Zeitpunkt des Eintrags gültige Zeitzone (Windows Systemsteuerung)
Bezeichnung	Bezeichnung des Ereignisses, Details siehe Feld Beschreibung
Kategorie	Kategorie des Ereignisses Die Kategorie "USRMGMNT" kennzeichnet alle Einträge, welche von der Benutzerverwaltung stammen. Alle anderen Kategorien werden von ASpect PQ eingetragen.
Benutzer	Zum Zeitpunkt des Eintrags angemeldeter Benutzer
Beschreibung	Genauere Angaben zur Ursache des markierten Eintrags

Audittrail aktualisieren	<p>Mit [Aktualisieren] aktualisieren Sie die Eintragsliste des Audittrails.</p> <p>Dies kann notwendig sein, wenn bei bereits geöffneter Audittrail-Anzeige weitere Einträge hinzugefügt werden.</p>
Audittrail exportieren	<p>Audittraileinträge können in eine CSV-Datei exportiert werden. Diese Funktion ist nur in der der Benutzerverwaltung verfügbar.</p> <ul style="list-style-type: none">▶ Öffnen Sie mit einem Klick auf [Export] das Fenster Speichern unter.▶ Geben Sie einen Namen ein und speichern Sie die Exportdatei mit [OK].<ul style="list-style-type: none">✓ Die Audittraildatei wird exportiert.
Audittrail filtern	<p>Sie können den Audittrail nach bestimmten Bezeichnungen, Kategorien oder Benutzern filtern und den Zeitraum der Einträge eingrenzen.</p> <ul style="list-style-type: none">▶ Klicken Sie auf [Filtern] und spezifizieren Sie im Fenster Audittrail filtern den Suchfilter.▶ Mit [Filter löschen] können Sie die Einschränkungen durch den Filter aufheben.
Audittrail drucken	<p>Sie können den Audittrail drucken. Wenn Sie die Einträge gefiltert haben, werden nur die gefilterten Einträge gedruckt.</p> <ul style="list-style-type: none">▶ Starten Sie den Ausdruck der aktuellen Audittrail-Ansicht mit [Drucken]. Es öffnet sich das Druckfenster von ASpect PQ.▶ Ändern Sie dort gegebenenfalls in der Liste Ausgabe auf das Ausgabeformat.▶ Starten Sie den Ausdruck mit [Starten].<ul style="list-style-type: none">✓ Der Audittrail wird im gewählten Ausgabeformat ausgegeben.

12.3 Elektronische Signaturen

In ASpect PQ können Ergebnisdaten elektronisch signiert werden. Voraussetzung ist die Benutzerberechtigung **E-Signatur verwenden** (→"Anlegen eines neuen Benutzerkontos" S. 161). Die Signatur schließt die Arbeit an einer Datei ab, spätere Dateiänderungen führen zu einem ungültigen Signaturstatus.

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 einschließlich (wenn vorhanden) der Spektrendatei.

Eine Datei kann von mehreren Benutzern signiert werden.

12.3.1 Messergebnisse signieren

Messergebnisdateien können im Anschluss an die Messung oder nach späterem Laden der Datei durch hierzu berechtigte Anwender mit einer elektronischen Signatur versehen werden.

- ▶ Rufen Sie in ASpect PQ den Menübefehl **System | Ergebnisse signieren** auf.

Es öffnet sich das Fenster **Signieren**.

Option / Schaltfläche	Beschreibung
Benutzername	Der Anmeldename des aktuellen Benutzers. Der Benutzername kann geändert werden. Dies ermöglicht das Signieren durch weitere Benutzer (max. 32 Zeichen).
Kennwort	Kennwort des Benutzers (max. 20 Zeichen).
Bedeutung	Signaturbedeutung, z. B. Erstellt, Geprüft, Freigegeben. Die Liste der Signaturbedeutungen wird durch den Administrator der Benutzerverwaltung festgelegt (→ "Benutzerverwaltung konfigurieren" S. 157).
Kommentar	Optionale Bemerkungen (max. 256 Zeichen)
[Signieren]	Dokument mit den oben getätigten Einstellungen signieren. Nach Betätigen der Schaltfläche [Signieren] erfolgt eine Rückfrage, ob die Signatur erteilt oder der Vorgang abgebrochen wird. Die erfolgreiche Erteilung der Signatur wird bestätigt.

Messdaten signieren

12.3.2 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.
Ungültig (TPS-Daten)	Die Ergebnisdatei wurde nach dem Signieren geändert. Der Vergleich zwischen den neu berechneten und den gespeicherten Prüfsummen zeigt Differenzen.
Ungültig (SPK-Daten)	Die Datei mit den Spektrenrohdaten wurde nach dem Signieren geändert. Der Vergleich zwischen den neu berechneten und den gespeicherten Prüfsummen zeigt Differenzen.
Bedeutung	Signaturbedeutung
Kommentar	Bemerkungen (Optional)

12.4 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-CD.

 Beachte

In Verbindung mit den separaten Rechten zum automatischen Speichern und Exportieren gewährleistet die Software AJ File Protection eine lückenlose Datensicherheit von der Methodenerstellung, der Datenaufnahme und Auswertung bis zur Archivierung.

13 Anhang

13.1 Übersicht über Markierungen in der Werteanzeige

Bemerkung	Bedeutung	Werte	Ausgabe
> Kal	Probenmittelwert ist größer als der Arbeitsbereich der Kalibrierkurve	Mittelwerte	Ablauf- und Ergebnisfenster
<Kal	Probenmittelwert ist kleiner als der Arbeitsbereich der Kalibrierkurve	Mittelwerte	Ablauf- und Ergebnisfenster
< NWG	Probenwert ist kleiner als die Nachweisgrenze	Mittelwerte	Ablauf- und Ergebnisfenster
< BG	Probenwert ist kleiner die Bestimmungsgrenze und größer als die Nachweisgrenze	Mittelwerte	Ablauf- und Ergebnisfenster
RSD!	Probenmittelwert oder Standardmittelwert liegt außerhalb des Bereichs der vorgegebenen relativen Standardabweichung	Mittelwerte	Ablauf- und Ergebnisfenster
RR!	Probenmittelwert oder Standardmittelwert liegt außerhalb des Bereichs der vorgegebenen relativen Spannweite	Mittelwerte	Ablauf- und Ergebnisfenster
Faktor!	Grenzüberschreitung des Rekalibrierfaktors für die Kalibrierkurve	Kalibrierkurve	Ablauf- und Ergebnisfenster
R ² (adj.) bzw. R	Bestimmtheitsmaß der Regression R ² (adj.) oder R (je nach Auswahl im Fenster Option / Kalibrierung) der Kalibrierkurve unterschreitet den vorgegebenen Wert	Kalibrierkurve	Ablauf- und Ergebnisfenster Fenster Kalibrierkurve
#MAN.	Probeneinzelwert oder Standardeinzelwert wurde manuell aus der Berechnung der Probenmittelwerte ausgeschlossen	Probeneinzelwerte	Fenster Probeneinzelwerte
#KOR.	Probeneinzelwert oder Standardeinzelwert wurde automatisch durch Grubbs-Ausreißertest aus der Berechnung der Probenmittelwerte ausgeschlossen	Probeneinzelwerte	Fenster Probeneinzelwerte