

# Bedienungsanleitung

## multiWin pro



---

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

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



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

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

Dokumentationsnummer 11-0118-009-23

Ausgabe D (01/2025)

Technische Dokumentation Analytik Jena GmbH+Co. KG

© Copyright 2024, Analytik Jena GmbH+Co. KG

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Software im Überblick .....</b>	<b>7</b>
1.1	TOCnology made for you .....	7
<b>2</b>	<b>Installation.....</b>	<b>9</b>
2.1	Software installieren .....	9
2.2	Zugriffsrechte von Windows-Benutzerkonten.....	9
2.3	Software mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul installieren.....	9
2.3.1	Sicherung der Datenintegrität .....	10
2.3.2	Datenbank und CDM-Service installieren .....	10
2.3.3	Windowsdienst einrichten .....	13
2.3.4	Software multiWin pro installieren .....	15
2.4	Software aktualisieren.....	15
<b>3</b>	<b>Software starten und beenden.....</b>	<b>17</b>
3.1	Software erstmals starten und einrichten.....	17
3.2	Software mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul erstmals starten und einrichten .....	19
3.3	Software starten .....	23
3.4	Software in Standby schalten.....	24
3.5	Software beenden.....	25
<b>4</b>	<b>Softwareoberfläche .....</b>	<b>26</b>
4.1	Menüleiste .....	27
4.2	Werkzeugleiste .....	28
4.3	Gerätepanels.....	28
4.4	Dialogfenster.....	29
4.5	Suchen und filtern .....	31
4.6	In Gruppen ordnen .....	32
<b>5</b>	<b>Menü Programm .....</b>	<b>35</b>
5.1	Software-Einstellungen vornehmen.....	35
5.1.1	Verhalten beim Schließen der Software festlegen.....	37
5.1.2	Einheiten und Nachkommastellen für Ergebnisausgabe festlegen .....	38
5.1.3	Export- und Reporteinstellungen festlegen .....	39
5.1.4	Datenaustausch mit einem externen Auftragsverwaltungssystem einrichten .....	42
5.1.5	Automatische Exporte und Reporte erzeugen .....	43
5.1.6	Datenfelder für den manuellen Import von Sequenzen festlegen.....	44
5.2	Benutzer verwalten .....	44
5.2.1	Benutzer und Benutzerrollen .....	44
5.2.2	Zugriffsrechte.....	48
5.2.3	Benutzer bearbeiten .....	49
5.2.4	Passwortregeln und automatische Benutzerabmeldung einrichten .....	50
5.3	Passwort ändern .....	51
<b>6</b>	<b>Menü Methode .....</b>	<b>52</b>
6.1	Fenster Methoden .....	52
6.2	Editierbare Methodenparameter.....	53

6.3	Neue Methode erstellen.....	57
6.4	Methode bearbeiten.....	58
6.5	Methode kopieren .....	58
6.6	Methode importieren oder exportieren .....	59
6.7	Methodenreport drucken und speichern.....	59
<b>7</b>	<b>Menü Messung .....</b>	<b>61</b>
7.1	Probentypen.....	61
7.1.1	Probe .....	61
7.1.2	Kalibrierung.....	62
7.1.3	Tagesfaktor .....	62
7.1.4	QC Standard .....	63
7.1.5	Ansatzwasserblindwert .....	63
7.1.6	Reagenzienblindwert.....	64
7.1.7	Verdünnungsblindwert.....	64
7.1.8	Eluatblindwert .....	65
7.1.9	Schiffchenblindwert.....	66
7.2	Fenster Neue Sequenz .....	66
7.2.1	Sequenztafel.....	69
7.2.2	Sequenztafel anpassen.....	71
7.3	Fenster Sequenzen .....	72
7.4	Wizard Kalibrierungs-Assistent .....	73
7.5	Sequenz anlegen und mit manueller Probenaufgabe messen .....	74
7.6	Sequenz anlegen und mit automatischer Probenaufgabe messen .....	76
7.7	Probendaten importieren und exportieren.....	78
7.8	Methodeneinstellungen in der Sequenz anpassen.....	79
7.9	Gespeicherte Sequenz bearbeiten .....	83
7.10	NPOC-Messung durchführen.....	83
7.11	Blindwerte messen und editieren.....	85
7.12	Kalibrierung durchführen.....	87
7.13	Feststoffkalibrierung durchführen.....	89
7.14	Kalibrierstandards nachmessen oder ergänzen .....	90
7.15	Tagesfaktor bestimmen .....	91
7.16	Proben automatisch oder intelligent verdünnen.....	93
7.16.1	Automatische Verdünnung .....	93
7.16.2	Intelligente Verdünnung .....	96
7.17	Probenvolumen intelligent reduzieren.....	98
<b>8</b>	<b>Menü Kalibrierung.....</b>	<b>100</b>
8.1	Fenster Kalibrierungen.....	100
8.2	Kalibrierung einsehen .....	102
8.3	Kalibrierung bearbeiten.....	103
8.4	Kalibrierreport drucken und speichern.....	104
<b>9</b>	<b>Menü Ergebnisse .....</b>	<b>105</b>
9.1	Fenster Ergebnisse .....	105
9.2	Fenster Ergebnistabelle .....	106



9.2.1	Tabelle Ergebniseinträge der Tabelle .....	107
9.2.2	Tabelle Ergebniseinträge der Tabelle anpassen .....	108
9.2.3	Details eines einzelnen Ergebnisses .....	109
9.3	Neue Ergebnistabelle anlegen .....	112
9.4	Ergebnisse einsehen .....	112
9.5	Ergebnisse bearbeiten .....	113
9.6	In Versionen bearbeiteter Ergebnisse navigieren .....	114
9.7	Mittelwert für ausgewählte Ergebnisse berechnen .....	114
9.8	Ergebnisse importieren und exportieren .....	115
9.9	Ergebnisreport drucken und speichern .....	116
<b>10</b>	<b>Menü Gerät .....</b>	<b>118</b>
10.1	Fenster Justierung Autosampler .....	118
10.2	Fenster Geräte verwalten .....	119
10.3	Fenster Manuelle Einzelansteuerung .....	121
10.4	Fenster Gerätekomponententest .....	122
10.5	Probengeber justieren .....	123
10.6	Neue Gerätekonfiguration anlegen .....	123
10.7	Blindwerte in der Gerätekonfiguration ändern .....	124
<b>11</b>	<b>Menü Ansicht .....</b>	<b>125</b>
11.1	Werkzeugleiste anpassen .....	125
<b>12</b>	<b>Menü Hilfe .....</b>	<b>127</b>
<b>13</b>	<b>FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul .....</b>	<b>128</b>
13.1	Benutzerverwaltung im FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul .....	128
13.1.1	Benutzer und Benutzerrollen .....	128
13.1.2	Zugriffsrechte .....	131
13.1.3	Benutzer bearbeiten .....	132
13.1.4	Passwortregeln und automatische Benutzerabmeldung einrichten .....	133
13.1.5	Administrator bei Passwortverlust wiederherstellen .....	134
13.2	Audittrail einsehen, drucken oder exportieren .....	135
13.2.1	Audittrail anpassen .....	137
13.3	Manuelle Einträge im Audittrail ergänzen .....	137
13.4	Elektronische Signaturen .....	138
13.5	Datenverwaltung .....	140
13.6	Systemeignungstest (SST) .....	140
13.6.1	Systemeignungstest (SST) durchführen .....	140
13.6.2	Wizard SST erstellen .....	141
13.6.3	Ergebnisse von Systemeignungstests im Fenster SSTs einsehen .....	142
13.6.4	Tabelle SST-Übersicht .....	143
13.6.5	Detailansicht System Suitability Test (SST) Details .....	144
13.6.6	SST-Report einsehen, drucken und speichern .....	146



# 1 Software im Überblick

Die Software multiWin pro wurde für die Steuerung der Analysatoren zur Summenparameteranalyse von Analytik Jena entwickelt.

Die Software kann mit den Betriebssystemen Windows 10/11 betrieben werden.

Software-Version

Die vorliegende Anleitung orientiert sich an Version 1.3.0.0.

Unterstützte Geräte

Die Software unterstützt die Gerätesteuerung und Datenauswertung aller aktuellen multi N/C-Modelle:

- multi N/C 2300
- multi N/C 2300 duo
- multi N/C 2300 N
- multi N/C 3300
- multi N/C 3300 duo
- multi N/C 3300 HS
- multi N/C 4300 UV

Darüber hinaus kann die Software die Geräte der letzten Generation ab Softwareversion multiWin 4.10 steuern:

- multi N/C 2100S (mit allen Modellen)
- multi N/C 3100 (mit allen Modellen)
- multi N/C pharma HT
- multi N/C UV HS
- multi N/C pharma UV

Hinweise zur Anleitung

Folgende typografischen Kennzeichnungen werden verwendet:

- Softwarebegriffe sind fett ausgezeichnet.
- Menüpunkte werden mit einem senkrechten Strich „|“ aneinandergereiht, z. B. **Hilfe | Inhalt**.
- Arbeitsschritte für die Bedienung der Software sind mit einem Dreieck „▶“ gekennzeichnet.

## 1.1 TOCnology made for you

Mit der Software multiWin pro können Sie die Summenparameter TOC und  $TN_b$  in flüssigen und festen Proben aus Umwelt und Landwirtschaft, aus chemischer und pharmazeutischer Industrie bestimmen.

Die Software steuert die Analysengeräte und ihre Zubehöre, führt Messungen durch und wertet Messergebnisse automatisch aus.

Das optionale FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul sorgt für vollständige Datenintegrität und ist konform zu den Pharmarichtlinien 21 CFR Part 11.

Gerätesteuerung

Die drei ausklappbaren Gerätepanels auf der linken Seite der Softwareoberfläche zeigen Ihnen zu jedem Zeitpunkt den aktuellen Gerätestatus und wichtige Geräteinformationen an. Die Buttons im Panel **Gerätesteuerung** erlauben einen schnellen Zugriff auf wichtige Menübefehle wie Initialisierung oder Standby.

Diese und weitere Funktionen zur Gerätesteuerung finden Sie auch im Menü **Gerät**. Hier können Sie den Probengeber justieren oder Gerätekonfigurationen ändern oder anlegen.

---

Methoden	Die Software fasst Messeinstellungen in Methoden zusammen. Im Menü <b>Methode</b> und dem dazugehörigen Fenster <b>Methoden</b> können Sie Methoden verwalten und neue Methoden anlegen.
Messungen	Im Menü <b>Sequenzen</b> erstellen und verwalten Sie Sequenzen für die Analyse von Proben, Kalibrierungen, Blindwerten und Tagesfaktoren. Im dazugehörigen Fenster <b>Neue Sequenz</b> starten Sie die Messung und verfolgen die Aufzeichnung aktueller Messergebnisse auf dem Bildschirm.
Kalibrierungen	Die durchgeführten Kalibrierungen verwalten und bearbeiten Sie im Menü <b>Kalibrierungen</b> und dem dazugehörigen Fenster <b>Kalibrierungen</b> .
Messergebnisse	Über das Menü <b>Ergebnisse</b> verwalten Sie die Messergebnisse. Das Fenster <b>Ergebnisse</b> zeigt eine Übersicht aller Ergebnistabellen, die Sie laden können. Nach dem Laden einer Ergebnistabelle öffnet sich das Fenster <b>Ergebnistabelle</b> , in dem Sie Messergebnisse einsehen und bearbeiten. Report- und Exportfunktionen stehen Ihnen hier zur Verfügung.
Blindwerte	Gerade in der pharmazeutischen Reinheitskontrolle oder im Umweltbereich spielen die Blindwerte von verwendeten Reagenzien oder Probenschiffchen eine wichtige Rolle. Deshalb können Sie innerhalb einer Sequenz verschiedene Blindwerte aufzeichnen oder manuell eingeben. Die Software subtrahiert die gemessenen Blindwerte automatisch von allen folgenden Messergebnissen.
Tagesfaktor	Das Analysesystem liefert über lange Zeit reproduzierbare Ergebnisse. Deshalb ist es nicht notwendig, Kalibrierungen täglich zu wiederholen. Über die Messung von Tagesfaktoren bietet Ihnen die Software aber die Möglichkeit, Kalibrierungen mit einer oder mehreren Standardlösungen zu prüfen und in festgelegten Grenzen zu korrigieren.
Systemeignungstest (SST)	Der Systemeignungstest (SST) ist Bestandteil des FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmoduls und sichert die Qualität von TOC-Bestimmungen im Pharmabereich. Der SST vergleicht die Analyse einer leicht und schwer oxidierbaren Substanz. Die Software wertet den SST automatisch aus und zeigt die Ergebnisse im Menü <b>Ergebnisse   SSTs</b> an.
Benutzerverwaltung	Die Benutzerverwaltung finden Sie im Menü <b>Programm   Benutzer verwalten</b> . Im Fenster <b>Benutzer verwalten</b> verwalten Sie die angelegten Benutzer mit ihren Passwörtern und Zugriffsrechten, die sie über die Vergabe verschiedener Benutzerrollen individuell zuweisen können.
Audittrail	Das Audittrail ist Bestandteil des FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmoduls und dient der analytischen Qualitätssicherung. Sie finden das Audittrail im Menü <b>Programm   Audit Trail anzeigen</b> . Im Audittrail protokolliert die Software wichtige Ereignisse wie Inbetriebnahme und Außerbetriebnahme des Gerätes, durchgeführte Messungen und aufgetretene Fehler.

## 2 Installation

### 2.1 Software installieren

Bei Auslieferung des Analysensystems ohne PC müssen Sie die Steuer- und Auswertesoftware auf einem externen PC installieren. Auf der Festplatte sollen  $\geq 64$  GB freier Speicherplatz verfügbar sein.

Alle zum Programm gehörigen Module werden während der Installation im Programmverzeichnis gespeichert. Die Initialisierungsdateien (kurz: .ini-Dateien), die Datenbank und die Nutzerdateien werden in den Programmdateien im Ordner *C:\ProgramData\Analytik-Jena* gespeichert. Es erfolgen keine Eintragungen in Windows System-Dateien.

#### Software installieren

- ▶ PC einschalten und Windows-Start abwarten. Sich als Windows-Administrator anmelden.
- ▶ Die mitgelieferte Software-CD in das CD-ROM-Laufwerk einlegen.
- ▶ Zu Ordner *multiWin pro installer* navigieren. Installation mit Doppelklick auf Datei *multiWinProSetup\_win32.exe* starten.
  - ✓ Die Software wird installiert. Neben den Programmdateien im Verzeichnis *C:\ProgramData\Analytik-Jena\multiWinPro* erscheint ein Software-Icon auf dem Desktop sowie Einträge im Windows-Startmenü.

### 2.2 Zugriffsrechte von Windows-Benutzerkonten

Wenn der PC nicht nur lokal mit Administratorrechten genutzt wird, müssen Sie die Zugriffsrechte auf die Programmdateien für Windows-Benutzerkonten ändern, die nach der Softwareinstallation angelegt werden.

- ▶ Als Windows-Administrator neuen Windows-Benutzern, die nach Installation von multiWin pro angelegt wurden, Lese-/Schreibzugriff auf Ordner *C:\ProgramData\Analytik-Jena* gewähren.

### 2.3 Software mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul installieren

Das optionale Softwaremodul schützt die elektronischen Aufzeichnungen und sichert die Vertraulichkeit der Daten. Dafür nutzt das Softwaremodul einen zentralen CDM-Service mit einem CDM-Server oder einem DBMS (Datenbankmanagementsystem) im lokalen, unternehmensinternen Netzwerk und CDM-Clients auf den Messplatzrechnern. CDM steht für Central Data Management. CDM-Service und Clients kommunizieren verschlüsselt über eine RESTful API Schnittstelle. Bei nur einem Client kann der CDM-Server alternativ auf dem lokalen Rechner installiert werden.

Die Installation umfasst die folgenden Schritte:

- Installieren der PostgreSQL 16 Datenbank auf einem Server bzw. auf einem Datenbankmanagementsystem im unternehmensinternen Netzwerk.  
Die Datenbank sichert die dauerhafte und fehlerfreie Speicherung der großen Datenmengen und stellt die Daten bedarfsgerecht bereit.
- Installieren des CDM-Service und Einrichten als Windowsdienst, um den CDM-Service beim Hochfahren des Servers automatisch zu starten

- Installieren der Software multiWin pro auf dem Client-Rechner

Stellen Sie bei der Installation auf einem Server oder einem virtuellen PC im unternehmensinternen Netzwerk sicher, dass die Kommunikation zwischen Datenbank, CDM-Service und Client über die definierten Ports erfolgt. Die Ports sind durch Ihre IT-Abteilung frei konfigurierbar. Achten Sie darauf, die Ports auf den beteiligten Rechnern freizuschalten.

### 2.3.1 Sicherung der Datenintegrität

Die folgenden Maßnahmen stellen die Datenintegrität des CDM-Service sicher. Die Umsetzung der Maßnahmen liegt in der Verantwortung des Anwenders bzw. seiner Abteilung für Informationstechnik (IT).

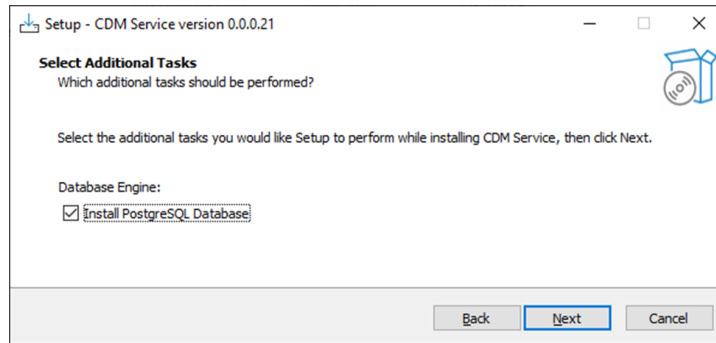
Die Verbindung zwischen Clients und CDM-Service erfolgt über das Kommunikationsprotokoll TCP über nur einen festgelegten Port. Die gesicherte Verbindung nutzt ein eigenes Zertifikat und verschlüsselt die Kommunikation über HTTPS. Für den CDM-Service gibt es eine Versionsseite, die bei direktem Aufruf der URL alle Änderungen dokumentiert.

Beachten Sie Folgendes:

- Nutzen Sie für den CDM-Service ein eigenes System. Unterbinden Sie den Zugriff von weiteren Rechnern auf die Datenbank.  
Bei Installation von CDM-Service und Datenbank auf einem Rechner: Verhindern Sie den Zugriff weiterer Rechner auf den Datenbankport.
- Legen Sie einen eigenen Datenbankbenutzer für den CDM-Service an, der ausschließlich über Rechte zum Lesen/Schreiben/Ändern für die PostgreSQL 16 Datenbank **cdmserver** verfügt. Richten Sie keinen Administrationsaccount für den Server ein, der über alle Zugriffsrechte verfügt.
- Schränken Sie die Anmeldungen an den Rechnern des CDM-Service und des Datenbank-Management-Systems ein. Erstellen Sie im CDM-Service keine Rollenaccounts bzw. lassen Sie keine Rollenaccounts aktiv.
- Richten Sie für Wartungsaufgaben einen personalisierten Datenbankbenutzer ein. Beachten Sie bei der Rechtevergabe, dass ein Techniker nicht unbedingt über Schreib- oder Löschrechte verfügen muss.
- Planen Sie Wartungszeiten am System ein und kommunizieren Sie diese an die Benutzer. Ohne CDM-Service kann das FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul die Datenintegrität in der Software nicht sichern. Ohne gestartete und verbundene Datenbank kann der CDM-Service nicht funktionieren.
- Sichern Sie die Datenbank regelmäßig und vor jedem Update. Testen Sie die Wiederherstellung der Daten über Sicherungen.
- Empfehlung: Wenn Sie einzelne Tabellen wie das Audittrail in gesonderte Datenbankbereiche, sogenannte „TableSpaces“, auslagern, schützen Sie diese vor Ausfall.
- Überwachen Sie den freien Festplattenspeicher für den Server bzw. das Datenbankmanagementsystem.

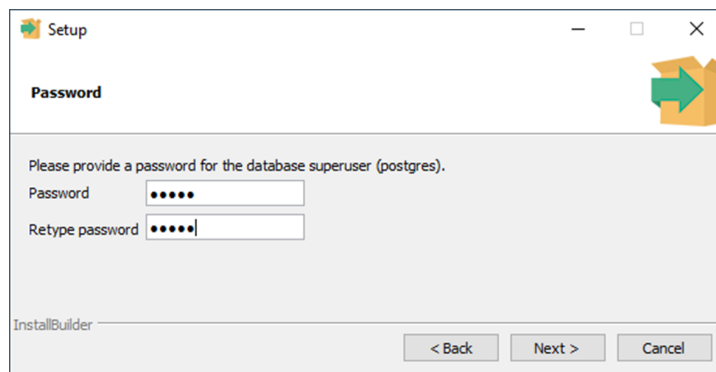
### 2.3.2 Datenbank und CDM-Service installieren

- ▶ zip-Ordner *cdm-service-setup-xxxx-complete.zip* auf der Installations-CD entpacken. (xxxx steht als Platzhalter für die Version.)
- ▶ Nach Doppelklick auf die Setup-Datei *cdmServiceSetup.exe* die PostgreSQL 16 Datenbank mithilfe des Wizards installieren.



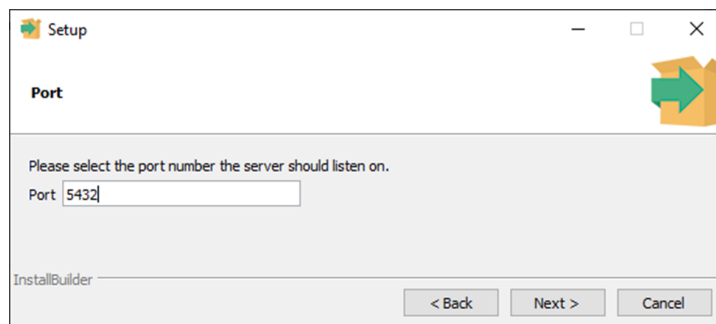
**Abb. 1 Datenbank mithilfe Wizard installieren**

- ▶ Im Wizard ein Datenbank-Passwort festlegen und sicher aufbewahren.



**Abb. 2 Datenbank-Passwort festlegen**

- ▶ Als Netzwerkadresse **Port 5432** eingeben oder nach Vorgaben der unternehmenseigenen IT einen anderen Port festlegen.



**Abb. 3 Netzwerkadresse eingeben**

- ▶ Beim Abschluss der Datenbankinstallation fragt der Wizard, ob "StackBuilder" gestartet und eingerichtet werden soll.

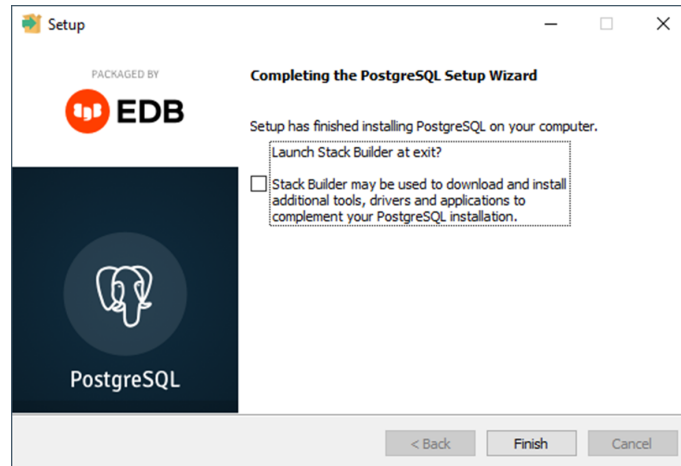


Abb. 4 Haken bei "StackBuilder" entfernen

- ▶ Den Haken entfernen, sodass dies nicht erfolgt.
  - ✓ Die Datenbank wird installiert und automatisch eingerichtet.
- ▶ Fehlerbehebung, wenn die Datenbank nicht automatisch eingerichtet wird: Nach Installation der Datenbank die Software pgAdmin 4 starten.

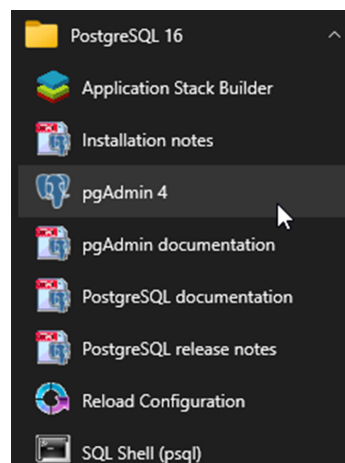


Abb. 5 Software pgAdmin 4 starten

- ▶ Wenn erforderlich, im Fenster **Connect to Server** zuvor angelegtes Passwort eingeben, um die Verbindung herzustellen.

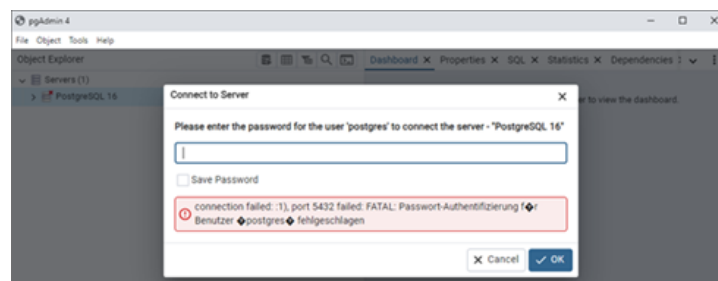


Abb. 6 Datenbank-Passwort eingeben

- ▶ In der Software die Datenbank **cdmserver** erstellen. Dafür im Object Explorer unter **PostgreSQL 16 | Database** den Menübefehl **Create | Database** wählen.



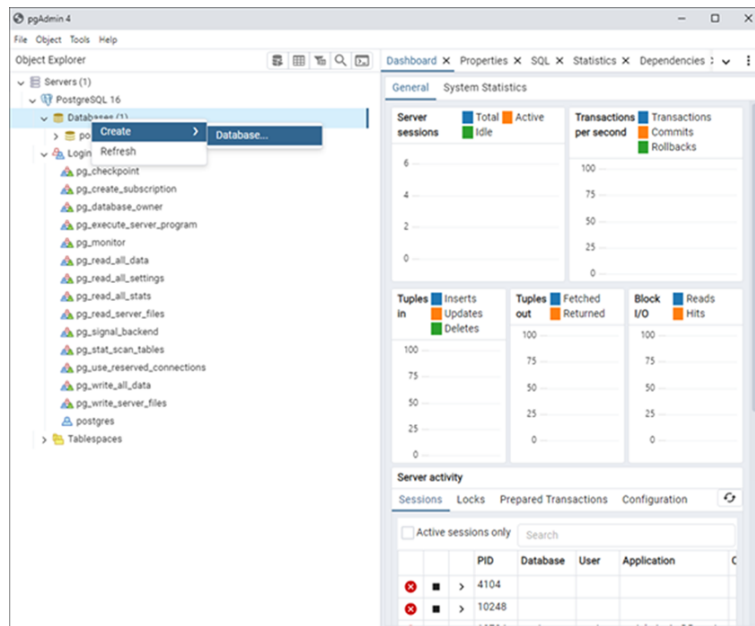


Abb. 7 Datenbank cdmserver erstellen

- ▶ Im Fenster **Create - Database** den Namen **cdmserver** in das Eingabefeld **Database** eintragen.
- ▶ Datenbank **cdmserver** mit Klick auf Button **Save** speichern.
- ▶ Die Software pgAdmin 4 schließen.
  - ✓ Sie haben die PostgreSQL 16 Datenbank **cdmserver** erstellt.
- ▶ Nach Abschluss der Datenbankinstallation entpackt die Installationsroutine den CDM-Service und testen ihn. Die Installationsroutine entpackt den CDM-Service standardmäßig in das Verzeichnis *C:/ProgramFiles (x86)/CDM Service*.

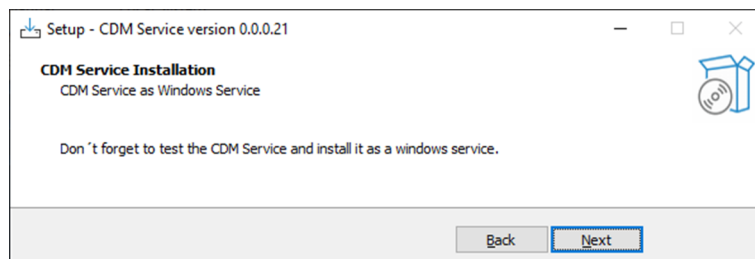


Abb. 8 Installation des CDM-Service

### 2.3.3 Windowsdienst einrichten

- ▶ Windowsdienst installieren. Dafür das Programm **Eingabeaufforderung** als Administrator starten.
- ▶ Mit der Eingabe von **cd c:\ProgramFiles (x86)\CDM Service** zum CDM-Verzeichnis navigieren. **cdmserver-xxx-x86\_64.exe /install** in die Kommandozeile eingeben. Für -xxx- Version ergänzen.
  - ✓ Bei erfolgreicher Installation gibt das Programm **Eingabeaufforderung** folgenden Text aus: **Service Part11 CDM installed successfully.**
- ▶ Suchbegriff **Dienste** in die Windows Suchleiste eingeben, um die Windows-Dienste zu öffnen.

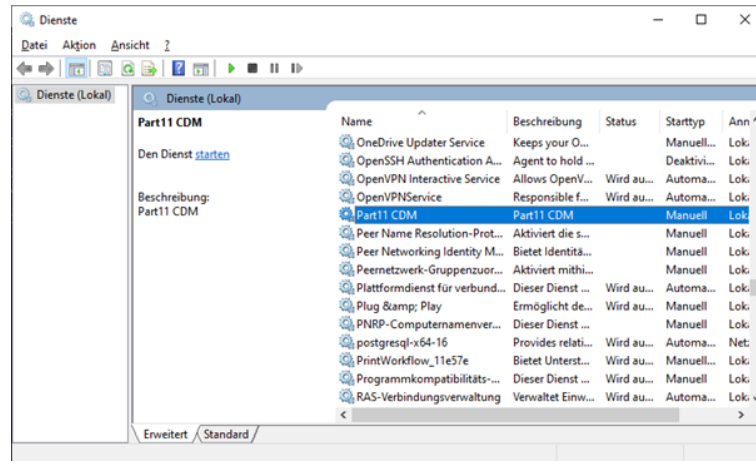


Abb. 9 CDM-Service als Windowsdienst einrichten

- ▶ Eigenschaften des Dienstes **Part11 CDM** mit Doppelklick öffnen.
- ▶ Nach der Installation des Dienstes den Starttyp von **Manuell** auf **Automatisch** ändern. Dafür auf Tab **Allgemein** im Dropdown-Menü bei **Starttyp** den Eintrag **Automatisch** wählen.

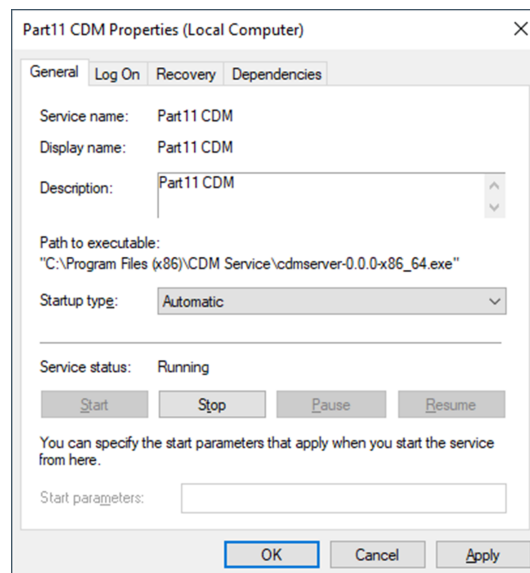


Abb. 10 Eigenschaften des Windows-Dienstes

- ▶ Dienst mit Klick auf Button **Starten** starten.
- ▶ Änderungen mit Klick auf **Übernehmen** speichern.
  - ✓ Sie haben den CDM-Service als Windowsdienst eingerichtet. Der CDM-Service startet jetzt automatisch beim Hochfahren des Systems.
- ▶ CDM-Service überprüfen.
- ▶ Dafür den Browser öffnen und Adresse **localhost:8443** eingeben. Den Port anpassen, wenn nicht Port 8443 gewählt wurde.
  - ✓ Wenn der Dienst läuft, ist folgende Zeile sichtbar: **CDM Service vxxx** (Die lange Zahlenfolge -xxx steht für die Version des Dienstes.)

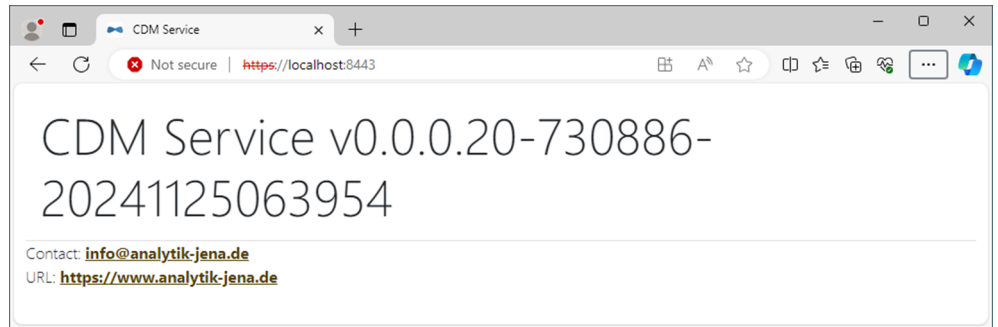


Abb. 11 Browser-Anzeige bei Test des CDM-Services als Windows-Dienst

### 2.3.4 Software multiWin pro installieren

Sie installieren die Software multiWin pro nur auf dem Client, nicht auf dem Server. Nach der Installation richten Sie beim ersten Softwarestart die Verbindung zum CDM-Service ein.

Software installieren

- ▶ PC einschalten und Windows-Start abwarten. Sich als Windows-Administrator anmelden.
- ▶ Die mitgelieferte Software-CD in das CD-ROM-Laufwerk einlegen.
- ▶ Zu Ordner *multiWin pro installer* navigieren. Installation mit Doppelklick auf Datei *multiWinProSetup\_win32.exe* starten.
  - ✓ Die Software wird installiert. Neben den Programmdateien im Verzeichnis *C:\ProgramData\Analytik-Jena\multiWinPro* erscheint ein Software-Icon auf dem Desktop sowie Einträge im Windows-Startmenü.

#### Sehen Sie dazu auch

- 📖 Software mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul erstmals starten und einrichten [▶ 19]

## 2.4 Software aktualisieren

Kontaktieren Sie den Analytik Jena Kundendienst bei einem Software-Update. Der Kundendienst stellt Ihnen eine neue Installationsdatei bereit.

- ▶ Software-Update mit Doppelklick auf Installationsdatei starten.
  - ✓ Die neue Softwareversion wird installiert. Dabei wird die Vorgängerversion automatisch deinstalliert. Die Initialisierungsdateien (kurz: .ini-Dateien), die Datenbank und die Nutzerdateien bleiben erhalten.
- ▶ Wenn sich das Datenbankschema geändert hat, führt Sie die Software beim ersten Softwarestart durch die Migration der Datenbank:
- ▶ Nach Aufforderung ein Backup der alten Datenbank erstellen.
- ▶ Alte Datenbank gemäß Anleitung migrieren.
  - ✓ Die Software zeigt das Ergebnis der Datenmigration an.
- ▶ Wenn Sie mit dem Update eine neue Softwarelizenz erworben haben, fordert Sie die Software beim ersten Softwarestart dazu auf, die neue Lizenz einzugeben. Lizenz eingeben.

- ▶ Wenn die Software Sie nicht dazu auffordert, die neue Lizenz einzugeben, dann zunächst die alte Lizenz eingeben.
- ▶ Mit Menübefehl **Hilfe | Lizenzen** Fenster **Lizenz-Management** öffnen.
- ▶ Neuen Lizenzcode im Eingabefeld **Lizenz-Code** eintragen.
- ▶ Lizenz mit Klick auf Button **Prüfen** prüfen.
- ▶ Fenster mit Klick auf Button **Schließen** verlassen.
- ▶ Software neu starten, um die neue Lizenz zu übernehmen.
  - ✓ Sie haben ein Software-Update durchgeführt.

Bei Software-Update kann ein Firmware-Update für das Analysengerät erforderlich sein. Besprechen Sie mit dem Kundendienst, ob Sie das Firmware-Update mit Unterstützung des Kundendienstes selbst durchführen können oder ob ein Serviceeinsatz nötig ist.

## 3 Software starten und beenden

### 3.1 Software erstmals starten und einrichten

Nach der Softwareinstallation lizenzieren Sie die Software.

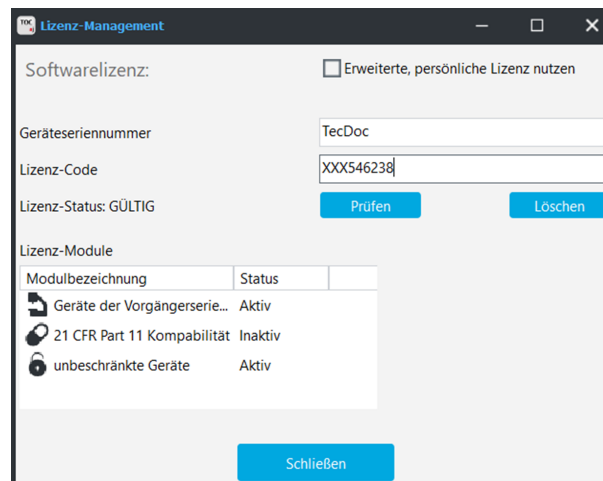
Anschließend melden Sie sich das erste Mal in der Software an. Dafür ist ein Administrator mit Benutzername und Passwort **Admin** vorangelegt. Ändern Sie das Passwort nach der ersten Anmeldung. Administratoren haben neben Benutzer- und Geräteverwaltung nur sehr eingeschränkte Rechte. Sie können die Benutzerverwaltung einrichten.

Außerdem legen Sie beim ersten Softwarestart die Gerätekonfiguration fest. Die Software passt die Geräteeinstellungen sowie die Auswahlmöglichkeiten bei Methoden und Sequenzen an die Gerätekonfiguration an.

Sie nehmen softwareübergreifende Einstellungen vor und initialisieren das Gerätesystem.

- ▶ PC einschalten.
- ▶ Wie in der Bedienungsanleitung des Analysators beschrieben, die Gasversorgung öffnen. Dafür das Ventil am Druckminderer der Gasversorgung im Labor öffnen.
- ▶ Komponenten des Analysesystems einschalten. Als letztes Analysator am Hauptschalter einschalten. Bei Betriebsbereitschaft leuchtet die Status-LED an der Fronttür grün.
- ▶ Die Software über den Windows-Startbefehl **Start | multiWinPro** oder durch Doppelklick auf das Software-Icon auf dem Desktop öffnen.

Software lizenzieren



**Abb. 12 Fenster Lizenz-Management**

- ▶ Bei Softwarestart Seriennummer und Lizenzcode im Fenster **Lizenz-Management** eintragen, um die Software zu lizenzieren. Sie haben den Lizenzcode per Mail erhalten. Außerdem enthalten die Geräteunterlagen ein Lizenzdatenblatt mit Lizenzcode für die Standardsoftware.
- ▶ Auf Button **Prüfen** klicken. Lizenzierte Softwaremodule in Tabelle prüfen.
- ▶ Fenster mit Klick auf Button **Schließen** verlassen.

Erste Anmeldung

- ▶ Im Anmeldefenster Benutzername und Passwort eingeben. Eingaben mit **Ok** bestätigen. Benutzername **Admin** und Passwort **Admin**.

- Gerätekonfiguration festlegen
- ▶ Im Fenster **Gerätekonfiguration** Gerätekonfiguration festlegen.
  - ▶ Unter **Gerätebezeichnung** Gerätekonfiguration benennen. Die voreingestellte Bezeichnung lautet: NewDevice\_Zeitstempel
  - ▶ Unter **Seriennummer**: trägt die Software bei der Lizenzierung automatisch die Seriennummer ein. Seriennummer prüfen.
  - ▶ Im Dropdown-Menü bei **COM-Kanal**: die Schnittstelle zum Analysator auswählen. Bei Bedarf COM-Port im Windows-Gerätemanager einsehen.
  - ▶ Im Dropdown-Menü bei **Gerätetyp** Gerätemodell auswählen.
  - ▶ Bei **Autosampler-Typ**: und **Rack**: Probengeber und Probenplatte auswählen.
  - ▶ Wenn Sie mehrere Probengeber oder Probenplatten erworben haben: Nach dem ersten Softwarestart unter Menüpunkt **Gerät | Geräte verwalten** weitere Gerätekonfigurationen, z. B. für Feststoffmessung, anlegen oder die bestehende Gerätekonfiguration ändern.
  - ▶ UV-Reaktor, internen Ofen oder externen Ofen aus Dropdown-Menü bei **Ofentyp**: wählen.

Dropdown-Menü	Optionen
<b>Ofentyp:</b>	Option <b>intern vertikal</b> Für Flüssigmessungen mit Hochtemperaturoxidation wählen
	Option <b>UV-Reaktor</b> Für Flüssigmessungen mit UV-Oxidation wählen
	Option <b>intern horizontal</b> Für Feststoffmessungen mit internem Feststoffmodul wählen
	Option <b>extern</b> Für manuelle oder automatisierte Feststoffmessungen mit externem Feststoffmodul wählen

- ▶ Detektoren in den Dropdown-Menüs **C-Sensor**: und **N-Sensor**: auswählen.
  - ▶ Volumen der Probengefäße aus Dropdown-Menü **Vial-Größe [ml]**: auswählen. Die Software passt das Totvolumen entsprechend an. Optional Totvolumen bei **Totvolumen [ml]**: anpassen.
  - ▶ Gerätekonfiguration mit Klick auf **Ok** speichern.
- Benutzerverwaltung einrichten
- ▶ Sie können den vorangelegten Administrator weiterverwenden. Administrator-Passwort nach der ersten Anmeldung unter **Programm | Passwort ändern** ändern.
  - ▶ Mit Menübefehl **Programm | Benutzer verwalten** die Benutzerverwaltung einrichten.  
Mindestens einen Benutzer anlegen, der Methoden anlegen, Messungen durchführen und auswerten kann. Hierfür eignen sich z. B. die Benutzerrollen **Labortechniker** und **Laborant**.
- Softwareübergreifende Einstellungen vornehmen
- ▶ Softwareübergreifende Einstellungen wie Sprache der Softwareoberfläche unter **Programm | Einstellungen** festlegen.
  - ▶ Einstellungen zur Initialisierung des Analysensystems bei Softwarestart und Routine zum Herunterfahren des Analysensystems unter **Programm | Einstellungen** festlegen.
  - ▶ Als Benutzer mit entsprechenden Zugriffsrechten eine erste Methode im Menü **Methode** erstellen.
  - ▶ Die Methode unter **Programm | Einstellungen** nach Klick auf **Methode auswählen** im Bereich **Standardmethode** voreinstellen.



## HINWEIS

Die Initialisierung des Analysensystems verläuft nur erfolgreich, wenn Sie eine Methode voreinstellen.

- Mit Klick auf **Methode auswählen** im Fenster **Software-Einstellungen** eine Methode voreinstellen.

### Analysensystem initialisieren

- ▶ Als Benutzer mit entsprechendem Recht das Analysensystem mit Klick auf Button **Gerät initialisieren** im Panel **Gerätesteuerung** initialisieren.
  - ✓ Die Software initialisiert das Analysensystem und aktiviert die angelegte Gerätekonfiguration als Standardkonfiguration.
- ▶ Warmlaufphase abwarten.  
Warmlaufphase für Gerätemodelle mit Hochtemperaturoxidation: 30 min, für Gerätemodelle mit UV-Oxidation: 15 min
- ▶ Gerätestatus im Panel **Gerätestatus** prüfen.
- ▶ Das Analysensystem ist nach der Aufwärmphase nicht messbereit, wenn Komponenten im Panel **Gerätestatus** farbig dargestellt werden. Dann auf Fehlersuche gehen.
- ▶ Für NPOC-Messungen: NPOC-Ausblasfluss am Analysator einstellen.  
Dafür Ausblasfluss über Menübefehl **Gerät | Manuelle Einzelansteuerung | Ausblasen** aktivieren. Gasfluss am Nadelventil „NPOC“ einstellen. Anzeige **Ausblasfluss:** im Panel **Gerätestatus** kontrollieren.
- ▶ Vor der ersten Messung und nach jedem Umbau Probengeber justieren. Dafür Fenster **Justierung Autosampler** über Menübefehl **Gerät | Justierung Autosampler** öffnen.
  - ✓ Das Analysensystem ist messbereit.

#### Sehen Sie dazu auch

- 📖 Passwort ändern [▶ 51]
- 📖 Benutzer bearbeiten [▶ 49]
- 📖 Software-Einstellungen vornehmen [▶ 35]
- 📖 Probengeber justieren [▶ 123]

## 3.2 Software mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul erstmals starten und einrichten

Nach der Softwareinstallation lizenzieren Sie die Software.

Sie richten die Verbindung zum CDM-Service ein. Dafür nutzen Sie den vorangelegten Erstnutzer, mit Benutzername **initialcdmsetupuser** und Passwort **admin**. Der Erstnutzer hat keine Rechte in der Software. Während Sie die Verbindung initialisieren, richten Sie einen ersten eigenen Benutzer mit Administratorrechten ein.

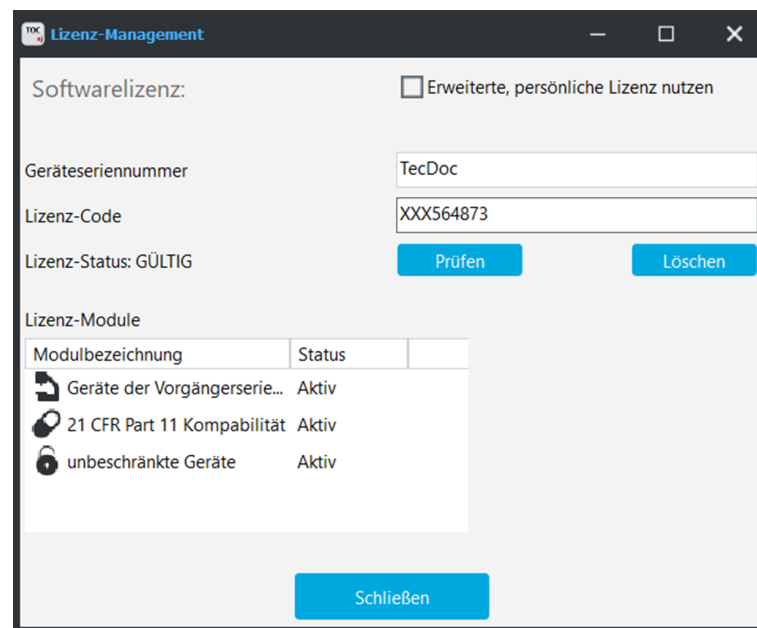
Anschließend melden Sie sich das erste Mal mit dem neu angelegten Benutzer in der Software an. Administratoren haben neben Benutzer- und Geräteverwaltung nur sehr eingeschränkte Rechte. Tipp: Nutzen Sie den ersten Softwarestart deshalb, um weiteren Benutzer in der Benutzerverwaltung einzurichten.

Außerdem legen Sie beim ersten Softwarestart die Gerätekonfiguration fest. Die Software passt die Geräteeinstellungen sowie die Auswahlmöglichkeiten bei Methoden und Sequenzen an die Gerätekonfiguration an.

Sie nehmen softwareübergreifende Einstellungen vor und initialisieren das Gerätesystem.

- ▶ PC einschalten.
- ▶ Wie in der Bedienungsanleitung des Analysators beschrieben, die Gasversorgung öffnen. Dafür das Ventil am Druckminderer der Gasversorgung im Labor öffnen.
- ▶ Komponenten des Analysesystems einschalten. Als letztes Analysator am Hauptschalter einschalten. Bei Betriebsbereitschaft leuchtet die Status-LED an der Fronttür grün.
- ▶ Die Software über den Windows-Startbefehl **Start | multiWinPro** oder durch Doppelklick auf das Software-Icon auf dem Desktop öffnen.

## Software lizenzieren



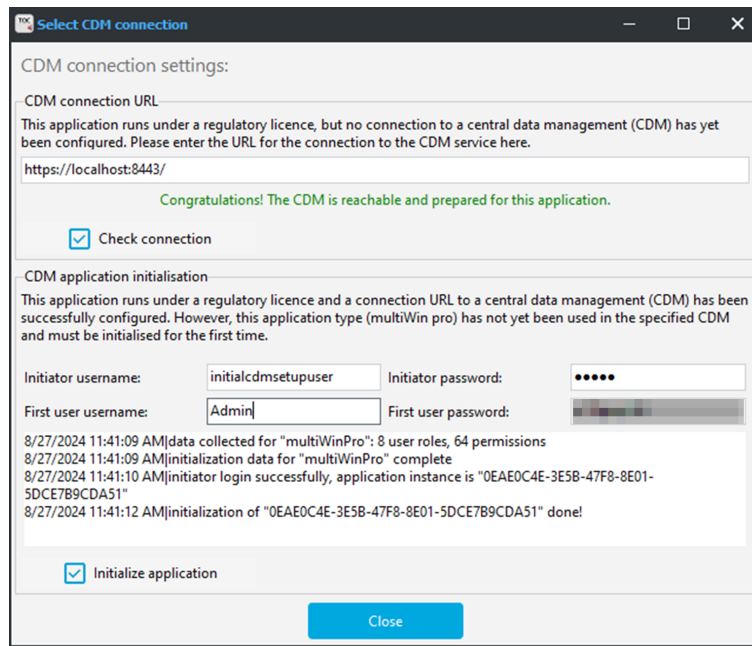
**Abb. 13 Fenster Lizenz-Management**

- ▶ Bei Softwarestart Seriennummer und Lizenzcode im Fenster **Lizenz-Management** eintragen, um die Software zu lizenzieren. Sie haben den Lizenzcode per Mail erhalten. Außerdem enthalten die Geräteunterlagen ein Lizenzdatenblatt mit Lizenzcode für die Standardsoftware.  
**i** HINWEIS! Lizenzcode aus Mail verwenden.
- ▶ Auf Button **Prüfen** klicken. Lizenzierte Softwaremodule in Tabelle prüfen. Das Modul **21 CFR Part 11 Kompabilität** muss aktiv sein.
- ▶ Fenster mit Klick auf Button **Schließen** verlassen.



Verbindung zum CDM-Service einrichten

- ▶ Die Software öffnet das Fenster **CDM-Verbindung auswählen**.



**Abb. 14** Fenster CDM-Verbindung auswählen

- ▶ Die Internetadresse des CDM-Servers im lokalen Netzwerk im Bereich **CDM-Verbindungs-URL** eingeben.
  - Wenn der CDM-Server auf dem lokalen Rechner installiert ist, die folgende Adresse eingeben:  
localhost:8443  
Bei Bedarf den voreingestellten Port anpassen.
  - Für einen zentralen CDM-Server Adresse des Servers im lokalen Netzwerk eingeben.
- ▶ Auf **Verbindung prüfen** klicken.
- ▶ Im Bereich **Initialisierung der CDM-Anwendung** den vorangelegten Erstnutzer mit Benutzernamen **initialcdmsetupuser** und Passwort **admin** eingeben.
- ▶ Unter **Erster Nutzername:** einen Benutzernamen für einen ersten eigenen Benutzer mit Administratorrechten festlegen, z. B. Admin.
- ▶ Auf **Anwendung initialisieren** klicken.
  - ✓ Die Software richtet die Verbindung zum CDM-Service ein und vergibt automatisch ein Initialpasswort für den ersten eigenen Benutzer.
- ▶ Initialpasswort mit **Strg + C** in die Zwischenablage kopieren.
- ▶ Fenster mit Klick auf Button **Schließen** schließen.



## HINWEIS

### Kein Softwarestart ohne Initialpasswort

Während Sie die Verbindung zum CDM-Service einrichten, legen Sie einen ersten eigenen Benutzer an. Ohne das Initialpasswort ist keine Anmeldung in der Software multiWin pro möglich.

- Initialpasswort des ersten eigenen Benutzers mit **Strg + C** in die Zwischenablage kopieren oder notieren.

- Erste Anmeldung
- ▶ Im Anmeldefenster Benutzername und Passwort eingeben. Eingaben mit **Ok** bestätigen. Dafür den ersten eigenen Benutzer mit seinem Initialpasswort verwenden.
  - ▶ Passwort nach Aufforderung durch die Software im Fenster **Passwort ändern** ändern.
- Gerätekonfiguration festlegen
- ▶ Im Fenster **Gerätekonfiguration** Gerätekonfiguration festlegen.
  - ▶ Unter **Gerätebezeichnung** Gerätekonfiguration benennen. Die voreingestellte Bezeichnung lautet: NewDevice\_Zeitstempel
  - ▶ Unter **Seriennummer:** trägt die Software bei der Lizenzierung automatisch die Seriennummer ein. Seriennummer prüfen.
  - ▶ Im Dropdown-Menü bei **COM-Kanal:** die Schnittstelle zum Analysator auswählen. Bei Bedarf COM-Port im Windows-Gerätmanager einsehen.
  - ▶ Im Dropdown-Menü bei **Gerätetyp** Gerätemodell auswählen.
  - ▶ Bei **Autosampler-Typ:** und **Rack:** Probengeber und Probenplatte auswählen.
  - ▶ Wenn Sie mehrere Probengeber oder Probenplatten erworben haben: Nach dem ersten Softwarestart unter Menüpunkt **Gerät | Geräte verwalten** weitere Gerätekonfigurationen, z. B. für Feststoffmessung, anlegen oder die bestehende Gerätekonfiguration ändern.
  - ▶ UV-Reaktor, internen Ofen oder externen Ofen aus Dropdown-Menü bei **Ofentyp:** wählen.

Dropdown-Menü	Optionen
<b>Ofentyp:</b>	Option <b>intern vertikal</b> Für Flüssigmessungen mit Hochtemperaturoxidation wählen
	Option <b>UV-Reaktor</b> Für Flüssigmessungen mit UV-Oxidation wählen
	Option <b>intern horizontal</b> Für Feststoffmessungen mit internem Feststoffmodul wählen
	Option <b>extern</b> Für manuelle oder automatisierte Feststoffmessungen mit externem Feststoffmodul wählen

- ▶ Detektoren in den Dropdown-Menüs **C-Sensor:** und **N-Sensor:** auswählen.
  - ▶ Volumen der Probengefäße aus Dropdown-Menü **Vial-Größe [ml]:** auswählen. Die Software passt das Totvolumen entsprechend an. Optional Totvolumen bei **Totvolumen [ml]:** anpassen.
  - ▶ Gerätekonfiguration mit Klick auf **Ok** speichern.
- Benutzerverwaltung einrichten
- ▶ Mit Menübefehl **Programm | Benutzer verwalten** die Benutzerverwaltung einrichten. Mindestens einen Benutzer anlegen, der Methoden anlegen, Messungen durchführen und auswerten kann. Hierfür eignen sich z. B. die Benutzerrollen **Labortechniker** und **Laborant**.
  - ▶ Den Erstnutzer **initialcdmsetupuser** in der Tabelle **Benutzer** auswählen. Den Benutzer mit Klick auf Button **Aktiviert** deaktivieren.
- Softwareübergreifende Einstellungen vornehmen
- ▶ Softwareübergreifende Einstellungen wie Sprache der Softwareoberfläche unter **Programm | Einstellungen** festlegen.
  - ▶ Einstellungen zur Initialisierung des Analysensystems bei Softwarestart und Routine zum Herunterfahren des Analysensystems unter **Programm | Einstellungen** festlegen.



- ▶ Als Benutzer mit entsprechenden Zugriffsrechten eine erste Methode im Menü **Methode** erstellen.
- ▶ Die Methode unter **Programm | Einstellungen** nach Klick auf **Methode auswählen** im Bereich **Standardmethode** voreinstellen.

---

## HINWEIS

Die Initialisierung des Analysensystems verläuft nur erfolgreich, wenn Sie eine Methode voreinstellen.

- Mit Klick auf **Methode auswählen** im Fenster **Software-Einstellungen** eine Methode voreinstellen.
- 

Analysensystem initialisieren

- ▶ Als Benutzer mit entsprechendem Recht das Analysensystem mit Klick auf Button **Gerät initialisieren** im Panel **Gerätesteuerung** initialisieren.
  - ✓ Die Software initialisiert das Analysensystem und aktiviert die angelegte Gerätekonfiguration als Standardkonfiguration.
- ▶ Warmlaufphase abwarten.  
Warmlaufphase für Gerätemodelle mit Hochtemperaturoxidation: 30 min, für Gerätemodelle mit UV-Oxidation: 15 min
- ▶ Gerätestatus im Panel **Gerätestatus** prüfen.
- ▶ Das Analysensystem ist nach der Aufwärmphase nicht messbereit, wenn Komponenten im Panel **Gerätestatus** farbig dargestellt werden. Dann auf Fehlersuche gehen.
- ▶ Für NPOC-Messungen: NPOC-Ausblasfluss am Analysator einstellen. Dafür Ausblasfluss über Menübefehl **Gerät | Manuelle Einzelansteuerung | Ausblasen** aktivieren. Gasfluss am Nadelventil „NPOC“ einstellen. Anzeige **Ausblasfluss:** im Panel **Gerätestatus** kontrollieren.
- ▶ Vor der ersten Messung und nach jedem Umbau Probengeber justieren. Dafür Fenster **Justierung Autosampler** über Menübefehl **Gerät | Justierung Autosampler** öffnen.
  - ✓ Das Analysensystem ist messbereit.

### Sehen Sie dazu auch

- 📖 Benutzerverwaltung im FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul [▶ 128]
- 📖 Software-Einstellungen vornehmen [▶ 35]
- 📖 Probengeber justieren [▶ 123]

## 3.3 Software starten

- ▶ Die Software über den Windows-Startbefehl **Start | multiWinPro** oder durch Doppelklick auf das Software-Icon auf dem Desktop öffnen.
- ▶ Im Anmeldefenster Benutzername und Passwort eingeben. Eingaben mit **Ok** bestätigen.
- ▶ Gerätekonfiguration über Menübefehl **Gerät | Geräte verwalten** einsehen und prüfen. Bei Bedarf Gerätekonfiguration anpassen oder wechseln. Gewünschte Gerätekonfiguration mit Klick auf Button **Default setzen** oder durch Doppelklick aktivieren.

- ▶ Analysensystem mit Klick auf Button **Gerät initialisieren** im Panel **Gerätesteuerung** initialisieren.  
Bei Aktivierung der Option **Automatische Initialisierung beim Start** unter **Programm | Einstellungen** initialisiert die Software automatisch das Analysensystem bei Softwarestart.
  - ✓ Die Software initialisiert das Analysensystem, schaltet den Gasfluss an und aktiviert die Standardkonfiguration. Bei Geräten mit Hochtemperaturoxidation heizt die Software das Gerät auf die Ofentemperatur, die in der voreingestellten Methode festgelegt ist. (Voreinstellung Methode unter **Programm | Einstellungen | Standardmethode**)
- ▶ Warmlaufphase abwarten.  
Warmlaufphase für Gerätemodelle mit Hochtemperaturoxidation: 30 min, für Gerätemodelle mit UV-Oxidation: 15 min
- ▶ Das Analysensystem ist nach der Aufwärmphase nicht messbereit, wenn Komponenten im Panel **Gerätstatus** farbig dargestellt werden. Dann auf Fehlersuche gehen.
- ▶ Nach jedem Umbau Probengeber justieren. Dafür Fenster **Justierung Autosampler** über Menübefehl **Gerät | Justierung Autosampler** öffnen.
  - ✓ Das Analysensystem ist messbereit.

#### Sehen Sie dazu auch

- 📖 Neue Gerätekonfiguration anlegen [▶ 123]

## 3.4 Software in Standby schalten

Schalten Sie das Analysensystem bei Messpausen  $\geq 30$  min in Standby, beispielsweise während Sie Messergebnisse auswerten oder über Nacht.

Im Standby schaltet die Software den Gasfluss ab. Die Software senkt die Ofentemperatur bei Modellen mit Hochtemperaturoxidation auf die Standby-Temperatur. Bei Modellen mit UV-Oxidation schaltet die Software die UV-Lampe aus.

- ▶ Menübefehl **Gerät | Standby** wählen.
  - ✓ Die Software bleibt geöffnet. Das Analysensystem wird in Standby versetzt.
- ▶ Oder: Im Panel **Gerätesteuerung** auf Button **Gerät in Standby oder ausschalten** klicken.
  - Option **Standby** wählen.  
Standby-Temperatur in (°C) für Modelle mit Hochtemperaturoxidation festlegen.
  - Checkbox **Gerät spülen** aktivieren, um Probenweg vor Standby zu spülen. Hinweise zur Spülung in Bedienungsanleitung des Analysators beachten.
  - Dialog mit **Ok** schließen.
    - ✓ Die Software bleibt geöffnet. Das Analysensystem wird in Standby versetzt.

Weitere Optionen bei aktivierter Software-Einstellung **Verhalten beim Schließen | Nachfragen**:

- ▶ Menübefehl **Programm | Schließen** wählen. Im Dialog **Standby** Option **Standby** wählen.
- ▶ Oder: Software über Icon **X** (oben rechts) schließen. Im Dialog **Standby** Option **Standby** wählen.


**Sehen Sie dazu auch**

 Verhalten beim Schließen der Software festlegen [▶ 37]

### 3.5 Software beenden

Schalten Sie das Analysensystem vor längerem Stillstand, z. B. am Wochenende oder während des Urlaubs, aus.

Die Software schaltet den Gasfluss ab und pumpt das TIC-Kondensatgefäß ab. Bei Modellen mit UV-Oxidation schaltet die Software die UV-Lampe aus. Die Ofentemperatur sinkt bei Modellen mit Hochtemperaturoxidation auf Raumtemperatur.

- ▶ Menübefehl **Programm | Schließen** wählen.
- ▶ Oder: Software über Icon  (oben rechts) schließen.
- ▶ Oder: Menübefehl **Gerät | Ausschalten** wählen.
- ▶ Oder: Im Panel **Gerätesteuerung** auf Button **Gerät in Standby oder ausschalten** klicken.
- ▶ Option **Ausschalten** wählen.
  - Checkbox **Gerät spülen** aktivieren, um Probenweg vor Ausschalten zu spülen. Hinweise zur Spülung in Bedienungsanleitung des Analysators beachten.
  - Dialog mit **Ok** schließen.
  - ✓ Die Software wird bei Auswahl von Option 1 und 2 geschlossen. Bei Option 3 und 4 bleibt die Software geöffnet.
  - ✓ Das Analysensystem fährt herunter. Sie können die Komponenten des Analysensystems jetzt an ihren Hauptschaltern ausschalten.

Standby/Ausschalten zu Messende

Sie können am Ende einer Sequenz das Analysensystem automatisch herunterfahren oder in Standby versetzen. So können sie beispielsweise bei Messungen über Nacht Gas und Energie sparen.

- ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
- ▶ Standby: Am Ende der Sequenz über Button **Kontrollschritte** Kontrollschritt **Gerät in Standby** festlegen. Im Panel **Schritt-Parameter** Standby-Temperatur festlegen.
- ▶ Bei Bedarf das Analysensystem mit Kontrollschritt **Gerät aufwecken** zur gewünschten Zeit wieder in Betriebsbereitschaft versetzen.
- ▶ Ausschalten: Am Ende der Sequenz Kontrollschritt **Gerät ausschalten** festlegen.

**Sehen Sie dazu auch**

 Verhalten beim Schließen der Software festlegen [▶ 37]

## 4 Softwareoberfläche



### Tipp

Die Software ist für die Anzeige auf einem 24 in full HD Bildschirm (PC) bzw. 14 in full HD (Laptop) mit 1920 x 1080 px Auflösung optimiert. Bei kleineren Bildschirmen werden eventuell nicht alle Menüs angezeigt.

- Wenn Menüs nicht vollständig angezeigt werden, Bildschirmauflösung in Windows-Einstellungen heruntersetzen.

Element	Beschreibung
Menüleiste (oben)	Menüs mit Menübefehlen, über die Sie alle Programmfunktionen erreichen
Werkzeugleiste (oben)	Icons mit wichtigen Menübefehlen <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Bei Mausover über ein Icon erhalten Sie einen Tooltip.</li> <li>▪ Bei Bedarf Werkzeugleiste über <b>Ansicht   Aktionen anpassen</b> anpassen.</li> </ul>
Dialogfenster (Mitte)	Dialogfenster zur detaillierten Anzeige und Bearbeitung wichtiger Programmfunktionen <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Fenster über Menübefehle öffnen. Die Fenster ordnen sich als Tabs auf der Softwareoberfläche an.</li> <li>▪ Zum Ausdocken die Tabs mit gedrückter Maustaste ziehen oder im Kontextmenü <b>Abdocken</b> wählen.</li> <li>▪ Mit den Befehlen <b>Umbenennen</b> und <b>Fenster schließen</b> (im Kontextmenü) Fenster umbenennen oder schließen.</li> </ul>
Ausklappbare Gerätepanels (links)	Drei ausklappbare Panels: <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Panel <b>Gerätesteuerung</b> für schnellen Zugriff auf Gerätesteuerung</li> <li>▪ Panel <b>Gerätestatus</b> zur Anzeige von Geräte-Status</li> <li>▪ Panel <b>Geräteinformationen</b> zur Anzeige weiterer Geräte- und Softwareinformationen</li> </ul>
Statuszeile (unten)	Angezeigte Information: <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Angemeldeter Benutzer</li> <li>▪ Geräte-Status</li> <li>▪ Datum und Uhrzeit</li> <li>▪ Verbleibende Zeit bis zur automatischen Abmeldung nach Zeiten der Inaktivität</li> <li>▪ Datenmenge in Datenbank in (MiB) bzw. Adresse des CDM-Servers</li> <li>▪ Softwareversion</li> </ul>

Abhängig von den Zugriffsberechtigungen des Benutzers sind Menübefehle aktiv bzw. inaktiv. Zugriffsberechtigungen können Sie unter **Programm | Benutzer verwalten** einstellen.

### Sehen Sie dazu auch

- 📖 Werkzeugleiste anpassen [▶ 125]

## 4.1 Menüleiste

Die Menüs der Menüleiste gruppieren die wichtigsten Programmfunktionen. Viele Menübefehle öffnen Dialogfenster zur detaillierten Anzeige und Bearbeitung weiterer Funktionen.

Menü	Menüfunktionen
<b>Programm</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Systemweite Einstellungen wie Sprache vornehmen</li> <li>▪ Benutzer anlegen und verwalten</li> <li>▪ Benutzer wechseln oder nach automatischem Ausloggen wieder anmelden</li> <li>▪ Software sperren, um einen ungewollten Zugriff zu verhindern</li> <li>▪ Passwort ändern</li> <li>▪ Audittrail einsehen und manuelle Einträge im Audittrail ergänzen (nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul)</li> <li>▪ Software beenden</li> </ul>
<b>Methode</b>	Methoden verwalten und neue Methoden anlegen
<b>Sequenzen</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Sequenzen für die Messung von Proben, Kalibrierungen, Blindwerten, Tagesfaktoren, QC Standards und System-eignungstests (nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul) erstellen und Messung starten</li> <li>▪ Gespeicherte Sequenzen verwalten</li> </ul>
<b>Kalibrierungen</b>	Durchgeführte Kalibrierungen einsehen und bearbeiten
<b>Ergebnisse</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Ergebnistabellen verwalten und ausgewählte Ergebnistabellen laden, um Messergebnisse einzusehen und zu bearbeiten</li> <li>▪ Ergebnisse von Systemeignungstests (SST) einsehen (nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul)</li> </ul>
<b>Gerät</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Gerät initialisieren, in Standby schalten oder ausschalten</li> <li>▪ Gasfluss in Messpausen ausschalten und wieder einschalten</li> <li>▪ Probengeber justieren</li> <li>▪ Gerätekonfigurationen anlegen und verwalten</li> <li>▪ Gerät außerhalb des Messablaufs manuell steuern, um das Gerät beispielsweise auf eine Wartung vorzubereiten</li> <li>▪ Nach Rücksprache mit dem Kundendienst Ventile und Baugruppen im Gerätekomponententest einzeln ansteuern und sensorspezifische Daten für die Detektoren abrufen.</li> </ul>
<b>Ansicht</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Dialogfenster anordnen</li> <li>▪ Werkzeugleiste anpassen</li> <li>▪ Servicemodus öffnen (Passwort gesichert)</li> </ul>
<b>Hilfe</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Softwarehilfe aufrufen</li> <li>▪ Kundendienst per Mail kontaktieren</li> <li>▪ Lizenzen für Softwaremodule verwalten</li> <li>▪ Softwareversion, Copyright-Information und Kontaktdaten einsehen</li> <li>▪ Ordner mit Log-Dateien für die Fehleranalyse öffnen</li> </ul>






## 4.2 Werkzeugleiste

In der Werkzeugleiste sind als erweiterte Menüführung Icons mit häufig verwendeten Menübefehlen angeordnet. Bei Mausover über ein Icon erhalten Sie einen Tooltip.

Mit Klick auf ein Icon öffnen Sie ein Dialogfenster zur detaillierten Anzeige und Bearbeitung weiterer Programmfunktionen.

Sie können die Werkzeugleiste über **Ansicht | Aktionen anpassen** anpassen.

Layout der Werkzeugleiste

Icon	Menübefehl	Beschreibung
	Sequenzen	Fenster <b>Sequenzen</b> öffnen
	Einstellungen	Fenster <b>Software-Einstellungen</b> öffnen
	Kalibrierungen	Fenster <b>Kalibrierungen</b> öffnen
	Software gestartet	Für die automatisierte Feststoffmessung Schiffchenkarussell des Feststoffprobengebers bewegen, um die ersten Positionen mit Probenschiffchen zu belegen.
	Sampler nächste Ebene	Schiffchenkarussell weiterbewegen, um weitere Positionen mit Feststoffproben zu belegen.

## 4.3 Gerätepanels

Über die drei aufklappbaren Panels auf der linken Seite können Sie das Gerät steuern und Geräte-Status sowie Geräteinformation einsehen.

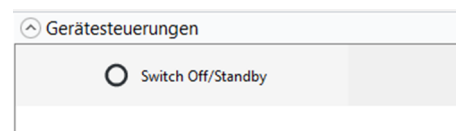


Abb. 15 Panel Gerätesteuerung

Panel	Beschreibung
Gerätesteuerung	Gerät über Buttons steuern <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <b>Gerät initialisieren:</b> Gerät initialisieren</li> <li>▪ <b>Gerät in Standby oder ausschalten:</b> Gerät in Standby schalten oder herunterfahren</li> </ul>



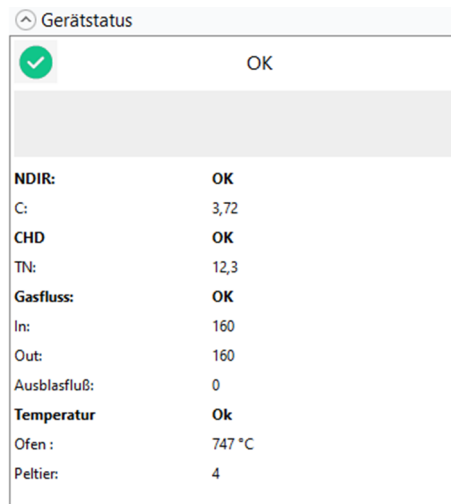


Abb. 16 Panel Gerätestatus

Panel	Beschreibung
Gerätestatus	<p>Betriebsbereitschaft und Statusfehler erkennen</p> <p>Aktuellen Status einzelner Komponenten einsehen:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Detektionsmodule (NDIR, CLD, ChD)</li> <li>▪ Gasfluss (In, Out, Purge)</li> <li>▪ Temperatur (Ofen, Peltierkühlung)</li> <li>▪ Status der UV-Lampe (für Geräte mit UV-Oxidation)</li> </ul>

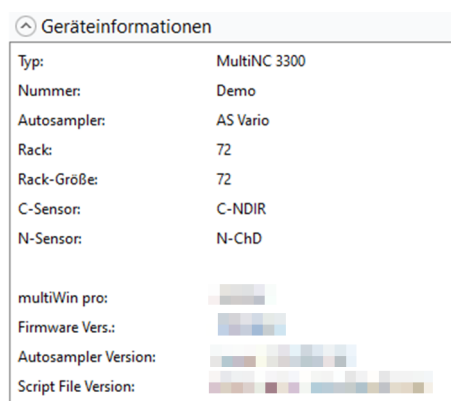


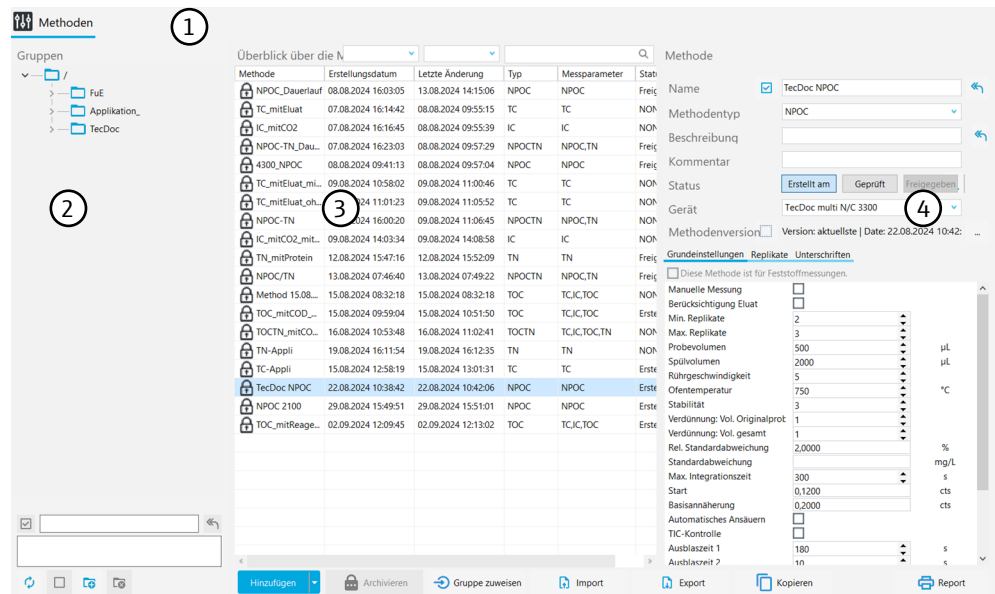
Abb. 17 Panel Geräteinformationen

Panel	Beschreibung
Geräteinformationen	<p>Information zu Gerät, angeschlossenen Zubehören, Software- und Firmwareversion einsehen</p> <p>Tipp: Information für die Kommunikation mit dem Kundendienst im Servicefall bereithalten!</p>

## 4.4 Dialogfenster

Sie öffnen die Dialogfenster über die Menübefehle in der Menü- oder Werkzeugleiste. Die Fenster ordnen sich als Tabs auf der Softwareoberfläche an.

- Zum Ausdocken die Tabs mit gedrückter Maustaste ziehen, doppelklicken oder im Kontextmenü **Abdocken** wählen.
- Fenster mit **Fenster schließen** (im Kontextmenü) schließen.
- Fenster mit **Umbenennen** umbenennen.



**Abb. 18 Dialogfenster Methoden**

Die Fenster **Methoden**, **Sequenzen**, **Kalibrierungen**, **Ergebnisse** und **SSTs** sind ähnlich aufgebaut. Die Fenster dienen der Verwaltung von Methoden, Sequenzen, Kalibrierungen und Ergebnistabellen.

Bereich	Beschreibung
Tab-Leiste (1)	Tabs der geöffneten Fenster
Gruppenverwaltung (2)	Gruppenverwaltung mit Verzeichnisstruktur
Tabellarische Übersicht (3)	Verwaltung von Methoden, Sequenzen, Kalibrierungen und Ergebnistabellen, mit Suchfunktion
Detailansicht (4)	Detailansicht für ausgewählte Elemente mit Editieroptionen

Sie können die Breite von Bereichen und Spalten ändern.

- ▶ Mauscursor auf Begrenzung positionieren, sodass Icon angezeigt wird.
- ▶ Bereich oder Spalte auf die gewünschte Breite ziehen.

Tabellarische Übersicht

Die tabellarische Übersicht zeigt alle gespeicherten Elemente (Methoden, Sequenzen, Kalibrierungen, Ergebnistabellen).

- Wenn Sie im Bereich **Gruppen** eine Gruppe auswählen, zeigt die tabellarische Übersicht nur die Elemente der Gruppe. Mit Klick auf Icon oder können Sie alle Elemente anzeigen, unabhängig von der Verzeichnisstruktur.
- Über die Eingabe von Suchbegriffen in das Suchfeld (mit Icon ) können Sie die tabellarische Übersicht durchsuchen.

Die tabellarische Übersicht enthält folgende Informationen:



- Namen des Elements (Methode, Sequenz, Kalibrierung, Ergebnistabelle, SST-Report)
- Datum von Erstellung und letzter Änderung
- Weitere elementspezifische Informationen, wie z. B. die kalibrierten Messparameter (TC, NPOC, TN, etc.)

In der tabellarischen Übersicht können Sie über die Buttons neue Elemente anlegen. Sie können Elemente in Gruppen ordnen, importieren, exportieren oder löschen (nur in Standardsoftware). In der Tabelle können Sie die Elemente nicht editieren.





Detailansicht

Die Detailansicht zeigt detaillierte Informationen für ein in der Übersicht ausgewähltes Element. In der Detailansicht können Sie Elemente editieren.

Buttons

Button	Beschreibung
<b>Hinzufügen</b>	Neues Element hinzufügen
<b>Laden</b>	In den Fenstern <b>Sequenzen</b> und <b>Ergebnisse</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Gespeicherte Sequenz zur Weiterverarbeitung laden</li> <li>■ Ergebnistabelle zur Einsicht und Bearbeitung von Messergebnissen laden</li> </ul>
<b>löschen</b>	Ausgewähltes Element aus Tabelle löschen (Standardsoftware)
<b>Archivieren</b>	Zukünftig: Archivierung von Elementen in der Datenbank (mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul), Funktion aktuell noch ausgegraut
<b>Gruppe zuweisen</b>	Ausgewähltes Element über Fenster <b>Gruppe auswählen</b> einer Gruppe zuordnen
<b>Import</b>	Elemente im Dateiformat .XML importieren
<b>Export</b>	Ausgewähltes Element exportieren Voreingestellter Exportordner: <i>C:/ProgramData/Analytik-Jena/MultiWinPro/export</i> Dateiformat: .XML, für Ergebnisse zusätzlich .CSV
<b>Kopie</b>	Im Fenster <b>Methoden</b> ausgewählte Methode kopieren
<b>Report</b>	In Fenstern <b>Methoden</b> , <b>Kalibrierungen</b> und <b>SSTs</b> Report für ausgewählte Elemente erzeugen
	Laden der Elemente z. B. beim Aktualisieren fortsetzen (nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul)
	Laden der Elemente abbrechen (nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul)

#### Sehen Sie dazu auch

-  Fenster Methoden [[▶ 52](#)]
-  Fenster Sequenzen [[▶ 72](#)]
-  Fenster Kalibrierungen [[▶ 100](#)]
-  Fenster Ergebnisse [[▶ 105](#)]

## 4.5 Suchen und filtern

Suchen


In den Dialogfenstern können Sie die tabellarische Übersicht durchsuchen.

- ▶ Suchbegriff in das Suchfeld über der tabellarischen Übersicht eingeben.
  - ✓ Die Software begrenzt die Anzeige auf die Treffer.
- ▶ Suchbegriff löschen, um vollständige Übersicht anzuzeigen.

Filtern

Sie können Methoden und Ergebnisse nach verschiedenen Kriterien filtern.

Mit dem optionalen FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul können Sie zusätzlich Kalibrierungen und Systemeignungstests (SST) nach dem Signierstatus filtern.

- ▶ Für das Filtern von Ergebnissen auf Icon  über der tabellarischen Übersicht im Dialogfenster klicken.
- ▶ Filterkriterien aus den Dropdown-Menüs auswählen.

- ▶ In den Dropdown-Menüs bei **Filter: Zeit** gewünschten Zeitraum im Kalender festlegen.
  - ✓ Die Software begrenzt die Anzeige auf die Treffer.
- ▶ Einzelne Filter durch Löschen der Filterkriterien oder Auswahl **alle** entfernen.

#### Sehen Sie dazu auch

- 📄 Fenster Methoden [▶ 52]
- 📄 Fenster Ergebnistabelle [▶ 106]

## 4.6 In Gruppen ordnen

Sie können Methoden, Sequenzen, Kalibrierungen, Ergebnistabellen und SST-Reports in Gruppen ordnen. Dafür können Sie eine Verzeichnisstruktur mit Gruppen und Untergruppen anlegen. Alle Fenster verwenden dieselbe Verzeichnisstruktur.

Gruppen löschen



In der Standardsoftware können Sie Gruppen löschen.

### HINWEIS

#### Gefahr von Datenverlust

Beim Löschen einer Gruppe löscht die Standardsoftware alle in der Gruppe enthaltenen Untergruppen, Methoden, Sequenzen, Kalibrierungen und Messergebnisse.

- Die Software schützt Sie mit einer Sicherheitswarnung vor unbeabsichtigtem Datenverlust.
- Vor Löschen einer Gruppe Inhalt in allen Fenstern prüfen.

Wenn Sie Daten nicht löschen, sondern archivieren möchten, können Sie eine Gruppe mit der Bezeichnung „Archiv“ anlegen. In die Gruppe „Archiv“ verschieben Sie die Daten, die Sie aktuell nicht mehr benötigen.

Im FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul sind Daten vor dem Löschen geschützt. Sie können deshalb nur leere Gruppen löschen, die keine Daten enthalten.

#### Bereich Gruppen

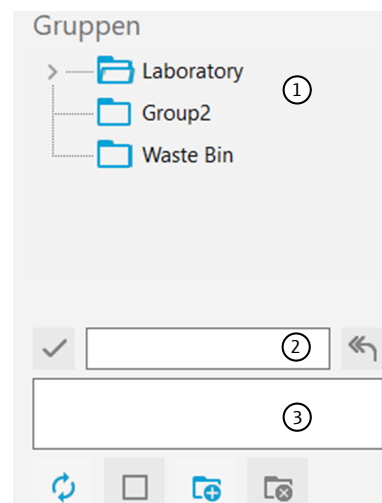













Abb. 19 Bereich Gruppen

Element	Beschreibung
Verzeichnisstruktur (1)	Verzeichnisbaum mit Klick auf Icon  aus- und einklappen
Eingabefeld für Gruppenname (2)	Gruppennamen festlegen
Eingabefeld für Kommentar (3)	Kommentar zu einer Gruppe eingeben

## Icons



Icon	Beschreibung
	Eingabe speichern
	Eingabe zurücksetzen
	Ansicht aktualisieren
	Gruppenauswahl aufheben Zur Aufhebung der Gruppenauswahl alternativ in den grauen Bereich klicken.
	Gruppe hinzufügen
	Gruppe mit allen Untergruppen und enthaltenen Elementen löschen Eine Sicherheitsabfrage schützt Sie in der Standardsoftware vor unbeabsichtigtem Datenverlust.

## Neue Gruppe anlegen

- ▶ Anlegen einer neuen Hauptgruppe:  
Sicherstellen, dass keine Gruppe vorausgewählt ist. Auswahl mit Klick auf Icon  aufheben oder in grauen Bereich klicken.
- ▶ Anlegen einer neuen Untergruppe:  
Hauptgruppe in der Verzeichnisstruktur auswählen.
  - ✓ Die ausgewählte Gruppe wird mit Icon  gekennzeichnet.
- ▶ Mit Klick auf Icon  neue Gruppe anlegen. Die voreingestellte Bezeichnung lautet: „Group + Nummer“.
- ▶ Im Eingabefeld den Gruppennamen ändern. Optional einen Kommentar ergänzen.
- ▶ Eingaben mit Klick auf Icon  speichern.
  - ✓ Sie haben eine neue Gruppe auf der gewünschten Ebene der Verzeichnisstruktur angelegt.

## In Gruppen ordnen

Sie können Methoden, Sequenzen, Kalibrierungen, Ergebnistabellen, Systemeignungstests (SST) und Gerätekonfigurationen zur besseren Übersicht in Gruppen ordnen.

- ▶ Vor Anlegen eines neuen Elements Auswahl im Bereich **Gruppen** mit Icon  aufheben oder in grauen Bereich klicken.  
(Wenn eine Gruppe vorausgewählt ist, können Sie das neue Element in der Übersicht zunächst nicht sehen.)
- ▶ Ein Element aus der Übersichtstabelle auswählen.
- ▶ Auf Button **Gruppe zuweisen** klicken.
- ▶ Im Fenster **Gruppe auswählen** in der Verzeichnisstruktur zur gewünschten Gruppe navigieren.
  - ✓ Die ausgewählte Gruppe wird durch Icon  gekennzeichnet und im Eingabefeld angezeigt.

- ▶ Zuordnung mit **Ok** bestätigen.
  - i** HINWEIS! Die Software entfernt beim Zuweisen eines Elements zu einer Gruppe den Signierstatus des Elements.
    - ✓ Die Software ordnet das Element der ausgewählten Gruppe zu.

## 5 Menü Programm

Im Menü **Programm** legen Sie systemweite Einstellungen fest.

Im Menü Programm

- Mit Menübefehl **Einstellungen** öffnen Sie Fenster **Software-Einstellungen** zur Festlegung von Sprache, Voreinstellungen und Export-Pfaden.
- Mit **Benutzer verwalten** öffnen Sie die Benutzerverwaltung.
- Mit **Benutzer ändern** wechseln Sie den Benutzer. Vermeiden Sie einen Benutzerwechsel während einer laufenden Messung, weil dann der neue Benutzer als Ersteller der Messung fungiert.
- Mit **Programm sperren** sperren Sie das Programm für die Bearbeitung. Sie müssen sich neu anmelden, um die Bearbeitung fortzusetzen.
- Über **Passwort ändern** ändern Sie Ihr Passwort.
- Mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul öffnen Sie mit Menübefehl **Audit Trail anzeigen** das Audittrail mit Protokollierung wichtiger Ereignisse und Fehler. Mit **Manueller Audit Trail Eintrag** ergänzen Sie manuelle Einträge im Audittrail.
- Mit **Schließen** beenden Sie die Software.

### 5.1 Software-Einstellungen vornehmen

Sie können im Fenster **Software-Einstellungen** systemweite Einstellungen wie die Sprache festlegen.

Sie öffnen Fenster **Software-Einstellungen** über Menübefehl **Programm | Einstellungen**.

- Auf Tab **Allgemein** nehmen Sie die meisten systemweiten Einstellungen vor.
- Auf Tab **Einheiten** legen Sie Dimensionen für die Ergebnisausgabe fest.
- Auf Tab **Speicherung, Export und Report** legen Sie Exportverzeichnisse für Methoden, Ergebnisse und Sequenzen fest. Sie legen Datenfelder für den CSV-Export und CSV-Import fest. Sie aktivieren den automatischen Export von Messergebnissen und die Erzeugung von Reporten am Messende.

Tab Allgemein

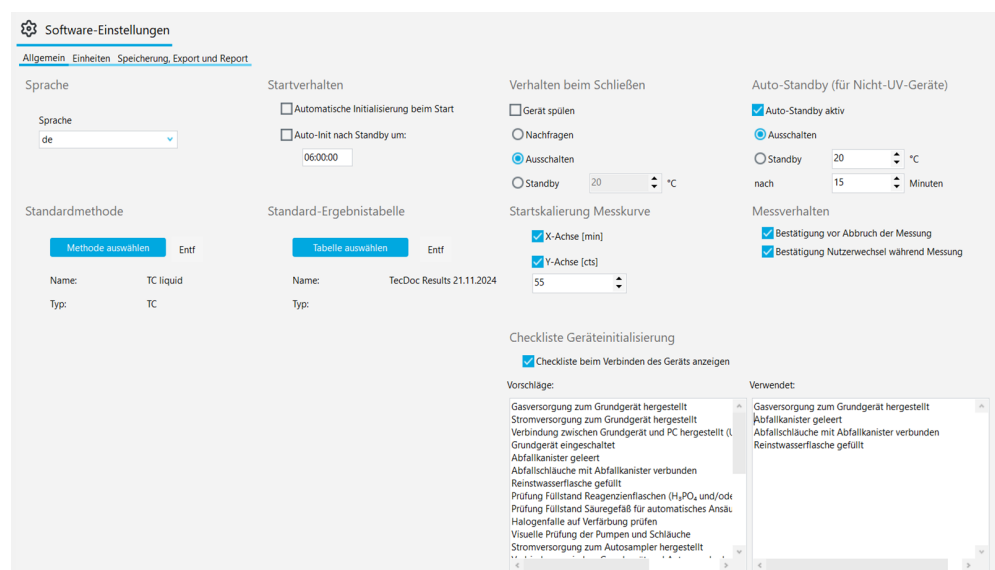


Abb. 20 Fenster Software-Einstellungen, Tab Allgemein

Bereich	Beschreibung
<b>Sprache</b>	Sprache der Softwareoberfläche aus Dropdown-Menü auswählen Nach Änderung der Sprache Software nach Klick auf Button <b>Anwendung neu starten</b> neu starten, um die neue Sprache zu übernehmen
<b>Startverhalten</b>	Verhalten des Gerätes beim Softwarestart festlegen <b>Automatische Initialisierung beim Start</b> Bei Softwarestart Gerät automatisch initialisieren und Standardgerätekonfiguration aktivieren <b>Auto-Init nach Standby um:</b> Tageszeit für automatische Geräteinitialisierung festlegen, z. B. 07:00:00 morgens kurz vor Arbeitsbeginn. Das Analysensystem muss zuvor in Standby gewesen sein.
<b>Verhalten beim Schließen</b>	Verhalten beim Schließen der Software festlegen <b>Gerät spülen</b> Als ersten Schritt Probenweg spülen <b>Nachfragen</b> Beim Beenden der Software Abfrage einblenden <b>Ausschalten</b> Beim Beenden der Software Analysensystem herunterfahren <b>Standby</b> Beim Beenden der Software Analysensystem in Standby schalten Standby-Temperatur festlegen
<b>Auto-Standby (für Nicht-UV-Geräte)</b>	Routine für automatisches Standby bzw. Ausschalten nach Zeiten der Inaktivität festlegen <b>Auto-Standby aktiv</b> Automatisches Standby/Ausschalten aktivieren <b>Ausschalten</b> Analysensystem bei Inaktivität herunterfahren <b>Standby</b> Analysensystem bei Inaktivität in Standby schalten Standby-Temperatur festlegen <b>nach</b> Dauer der Inaktivität in (min) festlegen, nach der die Software das Analysensystem automatisch in Standby schaltet bzw. ausschaltet Laufende Messungen wertet die Software nicht als Zeit der Inaktivität.
<b>Standardmethode</b>	Nach Klick auf <b>Methode auswählen</b> eine Methode voreinstellen, die bei Programmstart geladen wird Mit Klick auf <b>c</b> (neben Button) voreingestellte Methode löschen Unter <b>Name:</b> und <b>Typ:</b> zeigt die Software Methodename und Methodentyp an.
<b>Standard-Ergebnistabelle</b>	Nach Klick auf <b>Tabelle auswählen</b> eine Ergebnistabelle voreinstellen Mit Klick auf <b>c</b> (neben Button) voreingestellte Ergebnistabelle löschen Wenn Sie in der Sequenz keine andere Ergebnistabelle wählen, speichert die Software Messergebnisse automatisch in der voreingestellten Ergebnistabelle.



Bereich	Beschreibung
<b>Startskalierung Messkurve</b>	Darstellung der aktuellen Messkurve einrichten <b>X-Achse [min]</b> Skalierung der X-Achse bei Messstart aktivieren <b>Y-Achse [cts]</b> Skalierung der Y-Achse bei Messstart festlegen Wenn Wert zu klein, stellt die Software das Rauschen der Basislinie beim Messstart sehr groß dar. Wenn Wert zu groß, sind die Signale nicht zu erkennen.
<b>Messverhalten</b>	Festlegen, ob die Software bei Messabbruch oder Benutzerwechsel während der Messung eine Sicherheitsabfrage einblendet <b>Bestätigung vor Abbruch der Messung</b> Bei Messabbruch Sicherheitsabfrage einblenden <b>Bestätigung Nutzerwechsel während Messung</b> Bei Benutzerwechsel während laufender Messung Sicherheitsabfrage einblenden
<b>Checkliste Geräteinitialisierung</b>	Checkliste mit Prüfpunkten für Gerätestart aktivieren und gestalten <b>Checkliste beim Verbinden des Geräts anzeigen</b> Checkliste aktivieren, deren Prüfpunkte Sie bei Softwarestart nacheinander abarbeiten und bestätigen können Listbox <b>Vorschläge:</b> Liste mit Vorschlägen Listbox <b>Verwendet:</b> Checkliste mit Prüfpunkten <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Prüfpunkte mit Copy &amp; Paste aus Listbox <b>Vorschläge:</b> übernehmen</li> <li>▪ Oder: Eigene Prüfpunkte durch Eingabe in die Listbox erstellen</li> <li>▪ Oder: Prüfpunkte aus Listbox löschen</li> </ul>



## HINWEIS

Die Initialisierung des Analysensystems verläuft nur erfolgreich, wenn Sie eine Methode voreinstellen.

- Mit Klick auf **Methode auswählen** im Fenster **Software-Einstellungen** eine Methode voreinstellen.

### 5.1.1 Verhalten beim Schließen der Software festlegen

Sie legen unter **Programm | Einstellungen** fest, wie sich das Analysensystem beim Schließen der Software verhält. Dabei wählen Sie zwischen den Optionen Herunterfahren oder Standby.

Einstellungen

- ▶ Menübefehl **Programm | Einstellungen** wählen.
- ▶ Unter **Verhalten beim Schließen** Routine zum Herunterfahren des Analysensystems festlegen.
- ▶ Checkbox **Gerät spülen** aktivieren, um Probenweg vor Ausschalten oder Standby zu spülen.
- ▶ Über Radio Buttons Option wählen:
  - **Nachfragen:** Beim Schließen der Software wird eine Abfrage eingeblendet.
  - **Ausschalten:** Analysensystem bei Schließen der Software herunterfahren.

- **Standby:** Beim Schließen der Software Analysensystem in Standby schalten. Standby-Temperatur in (°C) für Modelle mit Hochtemperaturoxidation festlegen.
- ▶ Unter **Auto-Standby (für Nicht-UV-Geräte)** Checkbox **Auto-Standby aktiv** aktivieren, wenn das Analysensystem nach Zeiten der Inaktivität automatisch in Standby geschaltet oder heruntergefahren werden soll.
- ▶ Über Radio Buttons Option wählen:
  - Auswahl **Ausschalten:** Analysensystem bei Inaktivität herunterfahren.
  - Auswahl **Standby:** Analysensystem bei Inaktivität in Standby schalten. Standby-Temperatur in (°C) für Modelle mit Hochtemperaturoxidation festlegen.
  - Unter **nach** Zeit der Inaktivität in (min) festlegen.
- ✓ Sie haben Routinen für Herunterfahren des Analysensystems und Auto-Standby festgelegt.

### 5.1.2 Einheiten und Nachkommastellen für Ergebnisausgabe festlegen

Im Fenster **Software-Einstellungen** auf Tab **Einheiten** legen Sie Dimensionen für die Ergebnisausgabe fest.

Option	Beschreibung
<b>Konzentration</b>	Einheiten und Nachkommastellen für Konzentrationen festlegen
<b>Probenmenge</b>	Einheiten und Nachkommastellen für absolute Massen und Volumina festlegen
<b>Standardabweichung</b>	Einheiten und Nachkommastellen für Standardabweichungen festlegen
<b>pro Volumen</b>	Festlegungen für volumenbezogene Einheiten und Nachkommastellen treffen
<b>pro Masse</b>	Festlegungen für massenbezogene Einheiten und Nachkommastellen treffen
<b>pro Fläche</b>	Festlegungen für flächenbezogene Einheiten und Nachkommastellen treffen, wie z. B. für die Untersuchung von Tüchern aus der Wischdesinfektion

In den Bereichen **Sequenz**, **Ergebnisse** und **Ergebnisübersicht** können Sie unterschiedliche Voreinstellungen für die Ergebnisausgabe in Sequenz, Ergebnisübersicht und Ergebnistabelle treffen.

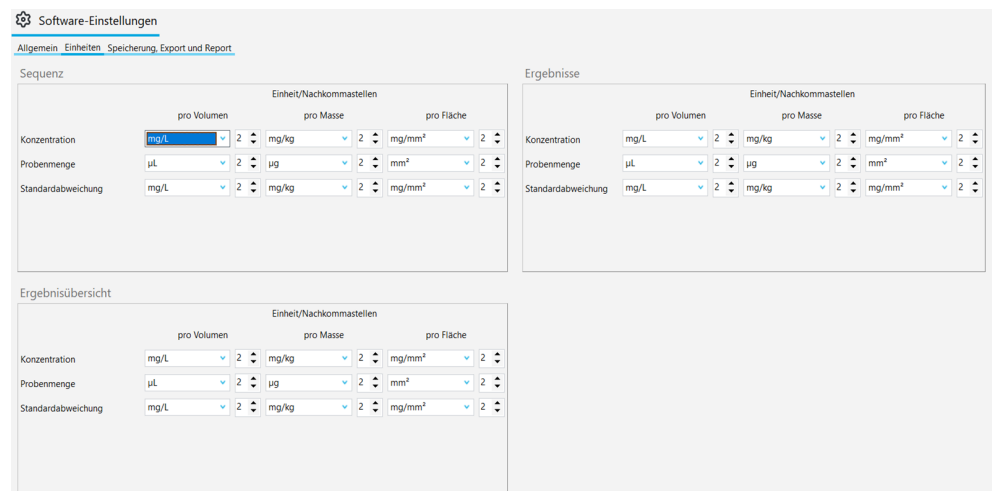


Abb. 21 Fenster Software-Einstellungen, Tab Einheiten

- ▶ Über Menübefehl **Programm | Einstellungen** Fenster **Software-Einstellungen** öffnen und auf Tab **Einheiten** wechseln.
- ▶ In den Bereichen **Sequenz, Ergebnisse** und **Ergebnisübersicht** Einheiten und Nachkommastellen festlegen:
  - Einheiten und Nachkommastellen für Konzentrationen
  - Einheiten und Nachkommastellen für absolute Massen und Volumina
  - Einheiten und Nachkommastellen für Standardabweichungen

Ergebnisausgabe später anpassen

- Sie können die Dimensionen für die Ergebnisausgabe auch in den Fenstern **Neue Sequenz** und **Ergebnistabelle** anpassen:
- ▶ Zum Öffnen des Kontextmenüs außerhalb der Sequenztabelle oder innerhalb der Ergebnistabelle einen Rechtsklick ausführen.
  - ▶ Im Kontextmenü Befehl **Ausgabeeinheiten auswählen** bzw. **Einheiten für Tabelle setzen** wählen.
  - ▶ Einheiten und Nachkommastellen im Bereich **Einheit/Nachkommastellen** ändern.
  - ▶ Für die Ergebnisausgabe im Fenster **Ergebnistabelle**: Auf Tab **Ergebnisse** Einheiten und Nachkommastellen für die Ergebnistabelle festlegen. Auf Tab **Ergebnisübersicht** Einstellungen für die Detailansicht vornehmen.
  - ▶ Eingabe mit **Ok** bestätigen.
  - ▶ Mit Klick auf Button **Auf globale Einstellungen zurücksetzen** zu den Einstellungen zurückkehren, die Sie im Fenster **Software-Einstellungen** auf Tab **Einheiten** voreingestellt haben.

Eingabeeinheiten anpassen

- Im Fenster **Neue Sequenz** können Sie über den Befehl **Eingabeeinheiten auswählen** (im Kontextmenü) die Einheiten für die Eingabe von Probeninformationen anpassen.
- ▶ Zum Öffnen des Kontextmenüs außerhalb der Sequenztabelle einen Rechtsklick ausführen.
  - ▶ Befehl **Eingabeeinheiten auswählen** wählen.
  - ▶ Im Fenster **Eingabeeinheit** Einheiten und Nachkommastellen für folgende Probeninformationen anpassen:
    - Probevolumen
    - Probenmenge
    - Probenfläche
    - Probendichte
  - ▶ Eingaben mit Klick auf Button **Bestätigen** bestätigen.

### 5.1.3 Export- und Reporteinstellungen festlegen

Im Fenster **Software-Einstellungen** auf Tab **Speicherung, Export und Report** legen Sie die folgenden Einstellungen fest:

- Sie können Speicher- und Exportverzeichnisse einsehen und anpassen.
- Sie legen den automatischen Export von Ergebnissen im Analysenablauf fest.
- Sie legen die automatische Erzeugung von Reporten im Analysenablauf fest.
- Sie legen Datenfelder für den CSV-Export von Ergebnissen und den CSV-Import von Sequenzen fest.

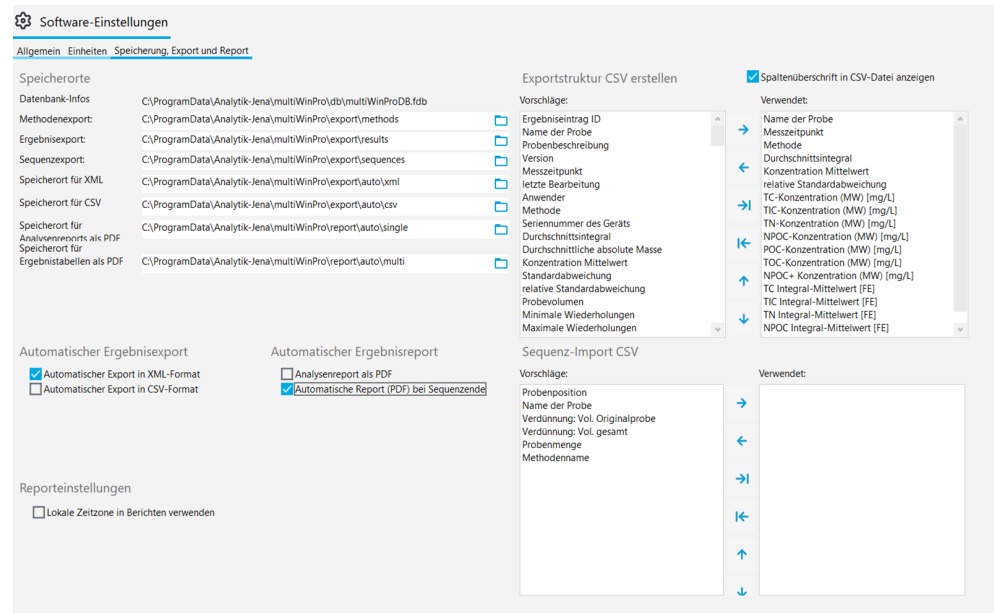


Abb. 22 Fenster Software-Einstellungen, Tab Speicherung, Export und Report

Bereich	Beschreibung
<b>Speicherorte</b>	<p><b>Datenbank-Infos</b> Speicherort der Datenbank einsehen</p> <p><b>Methodenexport:, Ergebnisexport:, Sequenzexport:</b> Voreingestellte Exportverzeichnisse für Methoden, Ergebnisse und Sequenzen einsehen und nach Klick auf  anpassen</p> <p><b>Speicherort für XML, Speicherort für CSV</b> Voreingestellte Exportverzeichnisse für den automatischen Export von Ergebnissen im XML- und CSV-Format einsehen und nach Klick auf  anpassen</p> <p><b>Speicherort für Analysenreports als PDF, Speicherort für Ergebnistabellen als PDF</b> Voreingestellte Speicherortverzeichnisse für automatisch erzeugte Ergebnisreports für einzelne Messschritte bzw. für alle Messschritte zu Sequenzende einsehen und nach Klick auf  anpassen</p>
<b>Exportstruktur CSV erstellen</b>	<p>Datenfelder für den CSV-Export von Ergebnissen festlegen</p> <p>Listbox <b>Vorschläge:</b> Liste mit möglichen Datenfeldern</p> <p>Listbox <b>Verwendet:</b> Liste mit exportierten Datenfeldern</p> <p>Als Trennzeichen verwendet die Software „;“.</p>
Checkbox <b>Spaltenüberschrift in CSV-Datei anzeigen</b>	Bezeichnung der Datenfelder in CSV-Export übernehmen
<b>Automatischer Ergebnisexport</b>	<p>Ergebnisse im Analysenablauf automatisch exportieren</p> <p><b>Automatischer Export in XML-Format</b> Ergebnisse automatisch im XML-Format exportieren</p> <p><b>Automatischer Export in CSV-Format</b> Ergebnisse automatisch im CSV-Format exportieren</p>

Bereich	Beschreibung
<b>Automatischer Ergebnisreport</b>	Automatisch im Analysenablauf einen Ergebnisreport im PDF-Format erzeugen <b>Analysenreport als PDF</b> Für jedes Ergebnis nach der Messung automatisch einen Report erzeugen <b>Automatische Report (PDF) bei Sequenzende</b> Für alle Ergebnisse nach Abarbeitung der Sequenz automatisch einen Report zu erzeugen
<b>Sequenz-Import CSV</b>	Datenfelder für den CSV-Import von Sequenzen festlegen
<b>Reporteinstellungen</b>	<b>Lokale Zeitzone in Berichten verwenden</b> Checkbox aktivieren, um die Zeit der örtlichen Zeitzone im CSV-Export und pdf-Reports auszugeben

Datenfelder für CSV-Export und CSV-Import

Datenfeld (Export/Import)	Beschreibung
Ergebniseintrag ID	ID des Ergebniseintrags
Name der Probe	Proben-ID
Probenbeschreibung	Beschreibung
Version	Anzahl der nachbearbeiteten Versionen
Messzeitpunkt	Messzeitpunkt
letzte Bearbeitung	Zeitpunkt der letzten Bearbeitung
Anwender	Während der Messung angemeldeter Benutzer
Methodenname	Methodenname
Methode	Messmethode
Seriennummer des Geräts	Seriennummer des Gerätes
Probenmenge	Probenvolumen bzw. Probeneinwaage
Durchschnittsintegral	Mittleres Integral in (FE), ohne Blindwertkorrektur
Durchschnittliche absolute Masse	Mittlere absolute Masse in ( $\mu\text{g}$ ) bereinigt um Blindwerte
Konzentration Mittelwert	Mittlere Konzentration in (mg/l), bereinigt um Blindwerte
Standardabweichung	Standardabweichung in (mg/l)
relative Standardabweichung	Relative Standardabweichung in (%)
Probenvolumen	Probenvolumen
Minimale Wiederholungen	Minimale Anzahl an Wiederholmessungen
Maximale Wiederholungen	Maximale Anzahl an Wiederholmessungen
Anzahl der Wiederholungen	Anzahl vorbereiteter Wiederholmessungen bzw. geplanter Messungen
Anzahl der gemessenen Wiederholungen	Anzahl der durchgeführten Messungen
Methodentyp	Methodentyp (TC, NPOC, etc.)
Probentyp	Probentyp
Probenposition	Position auf Probentablett
Aggregatzustand	Aggregatzustand der Probe
Verdünnung: Vol. Originalprobe	Zähler des Verdünnungsverhältnisses
Verdünnung: Vol. gesamt	Nenner des Verdünnungsverhältnisses
Soll-Konzentration	Zielkonzentration

Datenfeld (Export/Import)	Beschreibung
Kommentar	Kommentar
Ergebnis-Status	Signierstatus
Bearbeitungsstatus	Anzeige des Messerfolges
Software-Version	Softwareversion
Firmware-Version	Firmwareversion
TC-Konzentration (MW) [mg/L], etc.	Mittlere Konzentrationen für die verschiedenen Messkanäle
CSB-Mittelwert	Für TOC- und NPOC-Methoden ermittelter chemischer Sauerstoff-Bedarf CSB (COD, Chemical Oxygen Demand)
BSB <sub>5</sub> -Mittelwert	Für TOC- und NPOC-Methoden ermittelter biologischer Sauerstoff-Bedarf BSB <sub>5</sub> (BOD <sub>5</sub> , Biochemical Oxygen Demand)
Protein gesamt (Mittelwert)	Für TN-Methoden ermittelter TP-Gehalt (Total Protein)
CO <sub>2</sub> -Mittelwert	Für TIC-Methoden ermittelte Kohlenstoffdioxidkonzentration
TC Integral-Mittelwert [FE], etc.	Mittlere Integrale für die verschiedenen Messkanäle
TC Standardabweichung [mg/L], etc.	Standardabweichung für die verschiedenen Messkanäle
TC rel. Standardabweichung [%], etc.	Relative Standardabweichung in (%) für die verschiedenen Messkanäle
Replikate TC, etc.	Konzentrationen der Einzelbestimmungen für die verschiedenen Messkanäle Die Software fasst alle Einzelwerte in einer Spalte zusammen, getrennt durch  .
Integrale Replikate TC, etc.	Integrale der Einzelbestimmungen Die Software fasst alle Einzelwerte in einer Spalte zusammen, getrennt durch  .
TC-Konzentration Replikat 1 [mg/L], etc.	Konzentrationen für die einzelnen Wiederholmessungen und Messkanäle
TC Integral Replikat 1 [FE], etc.	Rohintegrale für die einzelnen Wiederholmessungen und Messkanäle

#### 5.1.4 Datenaustausch mit einem externen Auftragsverwaltungssystem einrichten

Sie können über eine Datenschnittstelle Messergebnisse im CSV-Format in ein Laborinformations-Management-System (LIMS) oder in ein anderes externes Programm exportieren.

Darüber hinaus können Sie Sequenzen manuell im CSV-Format aus einem externen Programm, wie z. B. einem LIMS oder Tabellenkalkulationsprogramm, importieren.

Die Einstellungen dafür legen Sie im Fenster **Software-Einstellungen** auf Tab **Speicherung, Export und Report** fest.

- Richten Sie den automatischen CSV-Export von Ergebnissen im Analysenablauf ein.
- Wenn Sie Ergebnisse manuell exportieren möchten, legen Sie lediglich die Datenfelder für den manuellen CSV-Export fest.
- Legen Sie Datenfelder für den manuellen Import von Sequenzen fest.








Als Trennzeichen für Datenfelder verwendet die Software das Zeichen „“.

Bei einem automatischen Ergebnisexport erstellt die Software die Exportdatei unmittelbar nach Beenden eines jeden Messschritts. Dabei erzeugt die Software für jeden Messschritt eine eigene Exportdatei. Als Dateinamen verwendet die Software die Ergebnis-ID.

### 5.1.5 Automatische Exporte und Reporte erzeugen


Im Fenster **Software-Einstellungen** auf Tab **Speicherung, Export und Report** richten Sie den automatischen Export von Ergebnissen ein. Sie können außerdem festlegen, dass Ergebnisreporte im Analysenablauf automatisch erzeugt werden.

Automatischen Export einrichten

- ▶ Über Menübefehl **Programm | Einstellungen** Fenster **Software-Einstellungen** öffnen und auf Tab **Speicherung, Export und Report** wechseln.
- ▶ Im Bereich **Automatischer Ergebnisexport** Checkbox **Automatischer Export in XML-Format** aktivieren, um Ergebnisse im Analysenablauf automatisch im XML-Format zu exportieren.
- ▶ Checkbox **Automatischer Export in CSV-Format** aktivieren, um Ergebnisse automatisch im CSV-Format zu exportieren.
- ▶ Die Software legt die Exportdateien in den unter **Speicherort für XML** und **Speicherort für CSV** angegebenen Verzeichnissen ab. Bei Bedarf die Exportverzeichnisse nach Klick auf Icon  ändern.
- ▶ Im Bereich **Exportstruktur CSV erstellen** Datenfelder für den CSV-Export von Ergebnissen auswählen.
- ▶ Dafür Datenfelder in Listbox **Verwendet:** prüfen. Auswahl bei Bedarf anpassen:
- ▶ Datenfelder in Listbox **Verwendet:** markieren und mit Klick auf Icon  aus der Listbox entfernen. Mit Klick auf  alle Datenfelder aus der Listbox entfernen.
- ▶ Datenfelder in Listbox **Vorschläge:** markieren und mit Klick auf  in Listbox **Verwendet:** übernehmen. Mit Klick auf  alle Datenfelder übernehmen.
- ▶ Mit Klick auf  und  Reihenfolge der Datenfelder in der Listbox **Verwendet:** verändern.
- ▶ Checkbox **Spaltenüberschrift in CSV-Datei anzeigen** aktivieren, damit die Bezeichnung der Datenfelder in CSV-Export übernommen wird.
- ▶ Im Bereich **Reporteinstellungen** Checkbox **Lokale Zeitzone in Berichten verwenden** aktivieren, um die Zeit der örtlichen Zeitzone im CSV-Export und PDF-Reports auszugeben.
  - ✓ Sie haben den automatischen Ergebnisexport eingerichtet und Datenfelder für den CSV-Export festgelegt. Als Trennzeichen verwendet die Software „;“.







Automatische Reporte erzeugen

- ▶ Über Menübefehl **Programm | Einstellungen** Fenster **Software-Einstellungen** öffnen und auf Tab **Speicherung, Export und Report** wechseln.
- ▶ Im Bereich **Automatischer Ergebnisreport** Checkbox **Analysenreport als PDF** aktivieren, um für jedes Ergebnis im Analysenablauf automatisch einen Report im PDF-Format zu erzeugen.
- ▶ Checkbox **Automatische Report (PDF) bei Sequenzende** aktivieren, um für alle Ergebnisse nach Abarbeitung der Sequenz automatisch einen PDF-Report zu erzeugen.
- ▶ Im Bereich **Reporteinstellungen** Checkbox **Lokale Zeitzone in Berichten verwenden** aktivieren, um die Zeit der örtlichen Zeitzone im CSV-Export und PDF-Reports auszugeben.

- ▶ Die Software speichert die Reporte in den unter **Speicherort für Analysenreports als PDF** bzw. unter **Speicherort für Ergebnistabellen als PDF** angezeigten Verzeichnissen. Bei Bedarf Reportverzeichnisse nach Klick auf Icon  ändern.
  - ✓ Sie haben die automatische Erzeugung von Ergebnisreporten im Analysenablauf eingerichtet.

### 5.1.6 Datenfelder für den manuellen Import von Sequenzen festlegen

Im Fenster **Software-Einstellungen** auf Tab **Speicherung, Export und Report** legen Sie die Datenfelder für den manuellen CSV-Import von Sequenzen fest.

- ▶ Über Menübefehl **Programm | Einstellungen** Fenster **Software-Einstellungen** öffnen und auf Tab **Speicherung, Export und Report** wechseln.
- ▶ Im Bereich **Sequenz-Import CSV** Datenfelder in Listbox **Vorschläge**: markieren und mit Klick auf  in Listbox **Verwendet**: übernehmen. Mit Klick auf  alle Datenfelder übernehmen.
- ▶ Für einen erfolgreichen CSV-Import Datenfeld **Methodenname** übernehmen.
- ▶ Zum Korrigieren der Auswahl Datenfelder in Listbox **Verwendet**: markieren und mit Klick auf Icon  aus der Listbox entfernen. Mit Klick auf  alle Datenfelder aus der Listbox entfernen.
- ▶ Mit Klick auf  und  Reihenfolge der Datenfelder in der Listbox **Verwendet**: verändern.
  - ✓ Sie haben die Datenfelder für den manuellen CSV-Import von Sequenzen konfiguriert. Laden Sie nach dem Import die Sequenz im Fenster **Sequenzen** und ergänzen Sie bei Bedarf weitere Einstellungen für den Messablauf.

Voraussetzungen für einen erfolgreichen CSV-Import:

- Die Bezeichnung und Reihenfolge der Datenfelder in der CSV-Datei muss mit den Datenfeldern übereinstimmen, die Sie unter **Software-Einstellungen**, Tab **Speicherung, Export und Report** festgelegt haben.
- Das Datenfeld **Methodenname** muss in der CSV-Datei mit der Bezeichnung einer bereits in der Software angelegten Methode befüllt sein.

## 5.2 Benutzer verwalten

Die Benutzerverwaltung unterscheidet sich in der Standardsoftware und im FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul.

**Sehen Sie dazu auch**

 Benutzerverwaltung im FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul [[▶ 128](#)]

### 5.2.1 Benutzer und Benutzerrollen

Erste Anmeldung

Für die erste Anmeldung nach der Software-Installation ist ein Administrator mit folgenden Anmeldedaten angelegt:

- Benutzer: Admin
- Passwort: Admin



Ändern Sie das Administrator-Passwort nach der ersten Anmeldung unter **Programm | Passwort ändern**.

Bei Passwortverlust kann das Profil durch Analytik Jena nicht wieder hergestellt werden. Bewahren Sie das Passwort an einem sicheren Ort auf.

### Benutzerverwaltung

Sie öffnen die Benutzerverwaltung mit Menübefehl **Programm | Benutzer verwalten**.

Das Fenster **Benutzer verwalten** zeigt eine Übersicht aller Benutzer und Benutzerrollen mit ihren Zugriffsrechten.

Als Administrator können Sie neue Benutzer und Benutzerrollen anlegen. Dabei können Sie neuen Benutzerrollen individuelle Zugriffsrechte gewähren.

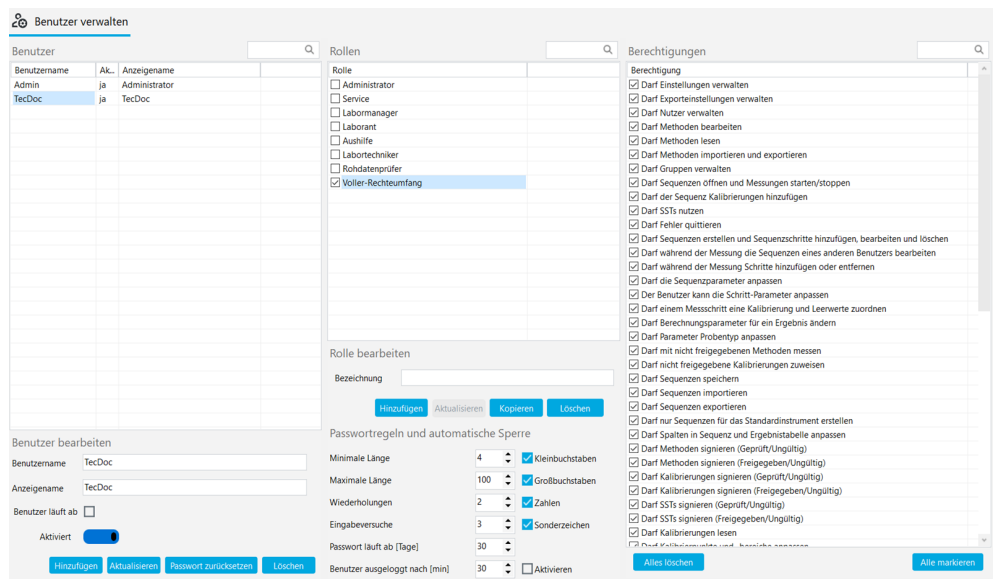


Abb. 23 Fenster Benutzer verwalten

### Benutzer

Bei Auswahl eines Benutzers in Tabelle **Benutzer** können Sie die Einstellungen seines Benutzerprofils einsehen und bearbeiten. Nutzen Sie dafür die Eingabefelder, Checkboxen und Buttons im Bereich **Benutzer bearbeiten**.

Checkbox/Feld/ Button	Beschreibung
<b>Benutzername</b>	Name des Benutzers für Anmeldung im System festlegen
<b>Anzeigename</b>	Benutzername für Anzeige in Statuszeile, Signatur und Report festlegen
<b>Benutzer läuft ab</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Checkbox aktivieren, wenn der Benutzer nur begrenzt gültig sein soll</li> <li>Im Kalender bei <b>Datum</b> den letzten Gültigkeitstag auswählen</li> </ul> <p>Nach Ablauf des Benutzers ist keine Anmeldung im System mehr möglich. Ein Administrator kann den Benutzer wieder aktivieren und ein neues Ablaufdaten festlegen.</p>
<b>Aktiviert/Deaktiviert</b>	<p>Wenn aktiviert, kann sich der Benutzer in Software anmelden</p> <p>Wenn deaktiviert, ist das Benutzerprofil für die Verwendung gesperrt</p>
<b>Benutzer ist extern</b>	<p>Wenn aktiviert, kann sich der Benutzer durch ein externes technisches System mittels LDAP anmelden (nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul)</p> <p>LDAP steht für Lightweight Directory Access Protocol. Mithilfe des Protokolls können Organisationen Benutzerdaten speichern und verwalten.</p>
<b>Hinzufügen</b>	Neuen Benutzer nach Eingabe von Benutzernamen, etc. hinzufügen

Checkbox/Feld/ Button	Beschreibung
	Nach Klick auf <b>Hinzufügen</b> zeigt die Software unterhalb der Tabelle das Initialpasswort für die erste Anmeldung des Benutzers an.
<b>Aktualisieren</b>	Bestehenden Benutzer nach Auswahl in Tabelle <b>Benutzer</b> und Editieren der Felder aktualisieren
<b>Passwort zurückgesetzt</b>	Passwort des Benutzers zurücksetzen Die Software zeigt unterhalb der Tabelle ein neues Initialpasswort an.
<b>Löschen</b>	Benutzer nach Sicherheitsabfrage löschen Die Software löscht den Benutzer, nicht jedoch seine Messdaten.

Bei Auswahl eines Benutzers in der Tabelle **Benutzer** zeigt die Software in Tabelle **Rollen**, welcher Benutzerrolle der Benutzer zugeordnet ist.

Ein Benutzer kann mehrere Benutzerrollen haben. Der Benutzer verfügt dann über die Zugriffsrechte all dieser Benutzerrollen.

## Benutzerrollen

Die Tabelle **Rollen** zeigt eine Übersicht der Benutzerrollen. Nach Auswahl einer Benutzerrolle können Sie die Zugriffsrechte einsehen.

	Beschreibung
Checkbox	Checkbox aktivieren, um dem ausgewählten Benutzer eine Benutzerrolle zuzuordnen

Nutzen Sie für die Bearbeitung der Benutzerrollen das Eingabefeld und die Buttons im Bereich **Rolle bearbeiten**.

Feld/Button	Beschreibung
<b>Hinzufügen</b>	Neue Benutzerrolle nach Eingabe eines Rollennamens hinzufügen
<b>Aktualisieren</b>	Eigene Benutzerrolle nach Änderung der Rollenbezeichnung aktualisieren Änderungen an den Rechteinstellungen müssen nicht gespeichert werden.
<b>Kopie</b>	Benutzerrolle kopieren
<b>Löschen</b>	Benutzerrolle nach Sicherheitsabfrage löschen

In der Software sind Benutzerrollen mit abgestuften Zugriffsrechten vorangelegt.


- Sie können die Zugriffsrechte von vorangelegten Benutzerrollen nicht ändern.
- Für neue Benutzerrollen können Sie individuelle Zugriffsrechte festlegen.

Benutzer	Zugriffsberechtigungen
Administrator	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Administratoren können Benutzer und Zugriffsrechte verwalten.</li> <li>■ Administratoren können die Softwarelizenz ändern.</li> <li>■ Administratoren können das Audittrail einsehen und exportieren.</li> <li>■ Administratoren können Gruppen anlegen. Sie richten Datenspeicherung und Datenexport ein.</li> <li>■ Administratoren sind für den Messbetrieb nicht autorisiert.</li> </ul>
Service	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Die Servicерolle ist Servicetechnikern von Analytik Jena bzw. von Analytik Jena autorisierten Personen vorbehalten.</li> <li>■ Nur der Service hat über Menübefehl <b>Ansicht   Service-Desktop</b> Zugang zu den passwortgeschützten Service-Funktionen.</li> <li>■ Der Service hat weitreichenden Zugriff auf Softwarefunktionen und kann z. B. Messungen starten, Ergebnisse einsehen und bearbeiten.</li> </ul>
Labormanager	Labormanager haben weitreichenden Zugriff auf Softwarefunktionen mit Ausnahme von Benutzerverwaltung und Lizenzmanagement.
Labortechniker	Labortechniker ordnen sich in ihrem Rechteumfang zwischen Labormanagern und Laboranten ein.

<b>Benutzer</b>	<b>Zugriffsberechtigungen</b>
Laborant	Die Rechte von Laboranten beschränken sich auf den Messbetrieb.
Aushilfe	Aushilfen haben geringere Zugriffsrechte als Laboranten.

Benutzer	Zugriffsberechtigungen
Rohdatenprüfer	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Rohdatenprüfer haben eine wichtige Rolle im optionalen FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul. Sie können Methoden, Sequenzen, Kalibrierungen und Messergebnisse einsehen, signieren und kommentieren.</li> <li>▪ Rohdatenprüfer können Reports erzeugen, Daten exportieren und das Audittrail einsehen.</li> </ul>

**Sehen Sie dazu auch**

 Passwort ändern [▶ 51]

### 5.2.2 Zugriffsrechte

In der Software sind Benutzerrollen mit abgestuften Zugriffsrechten vorangelegt.

- Sie können die Zugriffsrechte von vorangelegten Benutzerrollen nicht ändern.
- Für neue Benutzerrollen können Sie individuelle Zugriffsrechte festlegen.

In Tabelle **Berechtigungen** im Fenster **Benutzer verwalten** können Sie die Zugriffsrechte einsehen, die einer Benutzerrolle zugeordnet sind. Die Tabelle **Berechtigungen** regelt den Zugriff auf alle Softwarefunktionen.

Die Zugriffsrechte umfassen das Anlegen, Bearbeiten, Importieren/Exportieren und Freigeben von Daten.

- Software-Einstellungen vornehmen
- Gerätekonfiguration bearbeiten und Software-Lizenzierung ändern
- Datenspeicherung, Datenimport und -export einrichten
- Benutzer verwalten
- Gruppen zur Verwaltung von Daten einrichten
- Sequenz- und Ergebnistabelle anpassen
- Methoden anlegen und bearbeiten
- Sequenzen anlegen, bearbeiten und Messungen durchführen
- Kalibrierungen anlegen und bearbeiten
- Ergebnisse einsehen und bearbeiten
- Daten importieren und exportieren
- Daten mithilfe elektronischer Signaturen freigeben (nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul)
- Fehlermeldungen quittieren
- Audittrail einsehen und manuelle Einträge ergänzen

Für eigene Benutzerrollen können Sie durch Anhaken der Checkboxen Zugriffsrechte aktivieren. Es ist kein Speichern nötig. Die Zugriffsrechte gelten für alle Benutzer mit der Benutzerrolle ab der nächsten Anmeldung in der Software.

Leserechte erlauben lediglich einen schreibgeschützten Zugriff auf Daten. Benutzer können Daten einsehen und verwenden, nicht jedoch bearbeiten. Leserechte sind die Vorbedingungen für Editierrechte: Editierrechte müssen gemeinsam mit Leserechte vergeben werden.

Einige Rechte schränken den Zugriff auf bestimmte Elemente ein, beispielsweise **Darf nur Sequenzen für das Standardinstrument erstellen**.

Wenn ein Benutzer in Menüs und Dialogfenstern nicht über Zugriffsrechte verfügt, werden die entsprechenden Bereiche nicht angezeigt oder sind ausgegraut.

Über die Buttons unter der Tabelle können Sie die Rechteauswahl schnell verändern:

Button	Beschreibung
Alles löschen	Rechteauswahl aufheben
Alle markieren	Alle Rechte auswählen

### 5.2.3 Benutzer bearbeiten

- Neue Benutzerrolle anlegen
- ▶ Sich als Administrator in Software anmelden.
  - ▶ Menübefehl **Programm | Benutzer verwalten** wählen.
  - ▶ Unter **Rolle bearbeiten** neuen Rollennamen eingeben.
  - ▶ Im Bereich **Rollen** auf **Hinzufügen** klicken, um Benutzerrolle zu speichern.
  - ▶ Alternativ eine bestehende Benutzerrolle mit Klick auf Button **Kopie** kopieren.
  - ▶ In Tabelle **Berechtigungen** Zugriffsrechte für Benutzerrolle auswählen. Dafür Check-boxen aktivieren. Ein Speichern ist nicht notwendig.
    - ✓ Sie haben eine neue Benutzerrolle mit individuellen Rechteeinstellungen angelegt. Sie können Benutzern die neue Benutzerrolle jetzt zuweisen.

- Neuen Benutzer anlegen
- ▶ Sich als Administrator in Software anmelden.
  - ▶ Menübefehl **Programm | Benutzer verwalten** wählen.
  - ▶ Im Bereich **Benutzer bearbeiten** im Eingabefeld **Benutzername** Benutzernamen eintragen.
  - ▶ Anzeigenamen eingeben.
  - ▶ Option **Benutzer läuft ab** aktivieren, wenn der Benutzer nur zeitlich begrenzt gültig sein soll. Unter **Datum** Datum der letzten möglichen Softwareanmeldung festlegen.
  - ▶ Im Bereich **Benutzer bearbeiten** auf **Hinzufügen** klicken, um Benutzer zu speichern.
    - ✓ Die Software zeigt unterhalb der Tabelle **Benutzer** das Initialpasswort für die erste Anmeldung des Benutzers an.
  - ▶ Initialpasswort markieren und mit **Strg + C** in die Zwischenablage kopieren und es an den neuen Benutzer weiterleiten.
  - ▶ Benutzerrolle für neuen Benutzer in Tabelle **Rollen** auswählen und über Checkbox aktivieren.
    - ✓ Sie haben einen neuen Benutzer angelegt und dem Benutzer eine Benutzerrolle zugewiesen. Der neue Benutzer ist zum Anmelden im System berechtigt.

Ein Benutzer kann mehrere Benutzerrollen haben. Der Benutzer verfügt dann über die Zugriffsrechte all dieser Benutzerrollen.

Es wird empfohlen, dass ein neuer Benutzer sein Passwort nach der ersten Anmeldung mit dem Menübefehl **Programm | Passwort ändern** ändert.

- Benutzereinstellungen ändern
- ▶ Sich als Administrator in Software anmelden.
  - ▶ Menübefehl **Programm | Benutzer verwalten** wählen.
  - ▶ Benutzer in Tabelle **Benutzer** auswählen.
  - ▶ Benutzerdaten unter **Benutzer bearbeiten** anpassen.
  - ▶ Änderungen mit Klick auf Button **Aktualisieren** speichern.
  - ▶ Bei Bedarf dem Benutzer eine neue Benutzerrolle zuweisen. Dafür Checkbox im Bereich **Rollen** aktivieren.
  - ▶ Für eigene Benutzerrollen: Rolle im Bereich **Rollen** auswählen. In Tabelle **Berechtigungen** Zugriffsrechte ändern. Die Zugriffsrechte der vordefinierten Benutzerrollen sind nicht editierbar.
    - ✓ Sie haben Benutzereinstellungen angepasst.

Alle Benutzer, die einer Benutzerrolle zugeordnet sind, sind von Änderungen in den Zugriffsrechten betroffen.

Benutzer und Benutzerrollen löschen	<p>Sie können Benutzer und eigene Benutzerrollen, denen keine Benutzer zugeordnet sind, löschen.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▶ Sich als Administrator in Software anmelden.</li> <li>▶ Menübefehl <b>Programm   Benutzer verwalten</b> wählen.</li> <li>▶ Benutzer in Tabelle <b>Benutzer</b> auswählen.</li> <li>▶ Benutzer mit Klick auf Button <b>löschen</b> löschen. Der vorangelegte Administrator kann nicht gelöscht werden.</li> <li>▶ Eigene Benutzerrolle im Bereich <b>Rollen</b> auswählen.</li> <li>▶ Benutzerrolle mit Klick auf Button <b>löschen</b> löschen. <ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Sie haben ausgewählte Benutzer oder Benutzerrollen gelöscht.</li> </ul> </li> </ul>
Benutzer deaktivieren	<p>Sie können Benutzer deaktivieren, um ihnen den Zugriff auf die Software zu verwehren. Sie haben die Möglichkeit, die Benutzer später wieder zu entsperren.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▶ Sich als Administrator in Software anmelden.</li> <li>▶ Menübefehl <b>Programm   Benutzer verwalten</b> wählen.</li> <li>▶ Benutzer in Tabelle <b>Benutzer</b> auswählen.</li> <li>▶ Auf Toggle Switch <b>Aktiviert</b> klicken. <ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Der Benutzer wird deaktiviert.</li> </ul> </li> <li>▶ Benutzer bei Bedarf mit Klick auf Toggle Switch wieder aktivieren.</li> </ul>
Passwort zurücksetzen	<p>Sie können das Passwort eines Benutzers zurücksetzen, z. B. wenn ein Benutzer sein Passwort vergessen hat.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▶ Sich als Administrator in Software anmelden.</li> <li>▶ Menübefehl <b>Programm   Benutzer verwalten</b> wählen.</li> <li>▶ Benutzer in Tabelle <b>Benutzer</b> auswählen.</li> <li>▶ Auf Button <b>Passwort zurückgesetzt</b> klicken. <ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Die Software setzt das aktuelle Passwort zurück und erzeugt ein neues Initialpasswort für die erste Anmeldung. Die Software zeigt das Passwort unterhalb der Tabelle <b>Benutzer</b> an.</li> </ul> </li> </ul>

#### 5.2.4 Passwortregeln und automatische Benutzerabmeldung einrichten

Im Fenster **Benutzer verwalten** können Sie Kriterien für die Gültigkeit von Passwörtern festlegen und eine automatische Benutzerabmeldung nach Zeiten der Inaktivität einrichten.

- ▶ Sich als Administrator in Software anmelden.
- ▶ Menübefehl **Programm | Benutzer verwalten** wählen.
- ▶ Die Passwortbedingungen im Bereich **Passwortregeln und automatische Sperre** einstellen (siehe Tabelle).
- ▶ Option **Aktivieren** aktivieren, um Benutzer bei Inaktivität automatisch abzumelden. Zeit der Inaktivität in (min) bei **Benutzer ausgeloggt nach [min]** festlegen.
  - ✓ Die neuen Passwortbedingungen sind für alle neuen Passwörter gültig. Passwörter, die vor der Änderung erstellt wurden, sind weiterhin gültig.

Kriterium	Beschreibung
<b>Minimale Länge</b>	Mindestlänge des Passwortes festlegen (min. 4 Zeichen)
<b>Maximale Länge</b>	Maximale Länge des Passwortes festlegen (max. 100 Zeichen)

Kriterium	Beschreibung
<b>Wiederholungen</b>	Anzahl der erlaubten Wiederholungen für bereits verwendete Passwörter festlegen (max. 10 Wiederholungen)
<b>Eingabeversuche</b>	Anzahl ungültiger Anmeldeversuche bis zur Sperrung des Benutzerprofils festlegen (max. 10 Versuche) Ein Administrator kann ein gesperrtes Benutzerprofil unter <b>Benutzer verwalten</b> freischalten.
<b>Passwort läuft ab [Tage]</b>	Anzahl der Tage festlegen, nach denen das Passwort ungültig wird (1 ... 365 Tage)
<b>Benutzer ausgeloggt nach [min]</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Automatisches Ausloggen von inaktiven Benutzern über Checkbox aktivieren</li> <li>▪ Dauer der Inaktivität festlegen, Voreinstellung: 30 min (1 ... 2000 min)</li> </ul> <p>Die Software sperrt den Bildschirm und verhindert so einen ungewollten Zugriff auf Daten. Messungen laufen weiter.</p>
<b>Kleinbuchstaben</b>	Zeichen festlegen, die das Passwort enthalten muss: <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Groß- und Kleinbuchstaben</li> <li>▪ Ziffern</li> <li>▪ Sonderzeichen</li> </ul>
<b>Großbuchstaben</b>	
<b>Zahlen</b>	
<b>Sonderzeichen</b>	
<b>Häufige PW sperren</b>	Software-interne Liste anwenden, um Trivialpasswörter zurückzuweisen

## 5.3 Passwort ändern

- ▶ Mit Menübefehl **Programm | Passwort ändern** Fenster **Passwort ändern** öffnen.
- ▶ Im Eingabefeld **Passwort:** das alte Passwort eingeben.
- ▶ Unter **Neues Passwort:** das neue Passwort eingeben.
- ▶ Bei **Neues Passwort bestätigen:** neues Passwort wiederholen.
- ▶ Eingaben mit **Ok** bestätigen.
- ▶ Wenn das Passwort nicht den unter **Programm | Benutzer verwalten** festgelegten Passwortregeln genügt, gibt die Software eine Fehlermeldung aus. Passwort bei Bedarf anpassen.
- ▶ Fenster mit **Ok** verlassen.
  - ✓ Sie haben Ihr Passwort geändert.

# 6 Menü Methode

In einer Methode legen Sie die Einstellungen für den Verfahrensablauf fest. Die Einstellungen hängen vom Methodentyp (TC, TOC, TN, etc.) ab.

Im Menü **Methode** erstellen und verwalten Sie Methoden.

## 6.1 Fenster Methoden

Sie öffnen Fenster **Methoden** über Menübefehl **Methode | Methoden**.

Im Fenster Methoden

- Sie können mit Klick auf Button **Hinzufügen** eine neue Methode anlegen. Den Methodentyp wählen Sie im Dropdown-Menü aus.
- Sie editieren Methodeneinstellungen auf der rechten Fensterseite in der Detailansicht **Methode**.
- Sie löschen Methoden mit Klick auf Button **löschen**.
- Das optionale FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul verhindert das Löschen von Daten.
- Sie ordnen Methoden nach Klick auf **Gruppe zuweisen** im Fenster **Gruppe auswählen** in Gruppen.
- Sie importieren und exportieren Methoden mithilfe der Buttons **Import** und **Export** im XML-Format.
- Mit Klick auf **Kopie** kopieren Sie eine ausgewählte Methode, um sie als Vorlage für eine neue Methode zu verwenden.
- Mit Klick auf **Report** öffnen Sie die Druckvorschau. Hier können Sie einen Methodenreport drucken oder im pdf-Format speichern.

Layout des Fensters

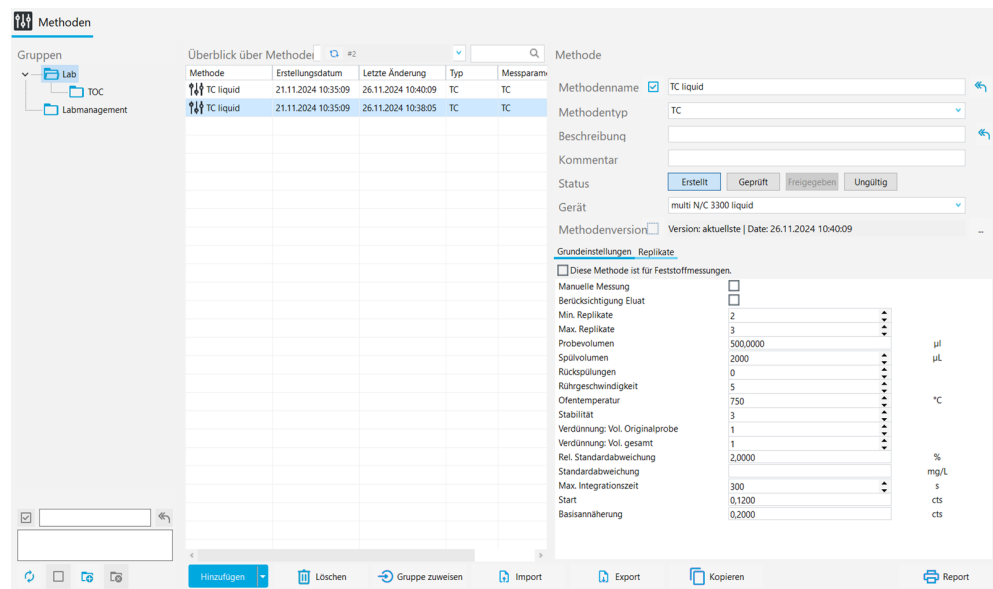


Abb. 24 Fenster Methoden





Bereich	Beschreibung
<b>Gruppen</b> (links)	Gruppenverwaltung
<b>Überblick über Methoden</b> (Mitte)	Tabellarische Übersicht der angelegten Methoden <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Methodename</li> <li>■ Datum von Erstellung und letzter Änderung</li> <li>■ Methodentyp und Messkanäle, beispielsweise: <b>Typ:</b> NPOCTN, <b>Messparameter:</b> NPOC, TN <b>Typ:</b> TOC, <b>Messparameter:</b> TC, IC, TOC</li> <li>■ Signierstatus der Methode</li> </ul>
<b>Methode</b> (rechts)	Detailansicht für ausgewählte Methode mit editierbaren Methodenparametern und Information zum Signierstatus

Elektronische Signaturen sind ein wichtiger Bestandteil des optionalen FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmoduls. Mithilfe von Signaturen und entsprechender Rechtevergabe schränken Sie die Nutzung nicht-freigegebener Daten ein. Beim Signieren ist die Eingabe von Benutzername und Passwort zwingend erforderlich.

In der Standardsoftware können Sie den Status von Daten, z. B. auf **Geprüft**, setzen. Sie können Daten jedoch nicht mit einer elektronischen Signatur versehen. Das Tab **Signaturen** bleibt ohne Einträge. An den Status der Daten sind keine Einschränkungen gekoppelt. So bleiben auch gesperrte Daten weiterhin nutzbar.

#### Sehen Sie dazu auch

-  Elektronische Signaturen [▶ 138]
-  In Gruppen ordnen [▶ 32]

## 6.2 Editierbare Methodenparameter



Sie erstellen und bearbeiten Methoden im Fenster **Methoden**.

In der Detailansicht **Details der Methode** können Sie die Methodenparameter für eine ausgewählte Methode innerhalb festgelegter Grenzen an Ihre Messaufgabe anpassen. Die in der Software voreingestellten Werte liefern für die meisten Messungen gute Ergebnisse.

### Allgemeine Methodeneinstellungen

In den ersten Zeilen der Detailansicht legen Sie allgemeine Methodeneinstellungen fest. Änderungen speichern Sie mit Button  neben Eingabefeld **Methodenname**.

Parameter	Beschreibung
<b>Methodenname</b>	Methodennamen festlegen
<b>Methodentyp</b>	Methodentyp ändern <ul style="list-style-type: none"> <li>■ TC: Bestimmung des gesamten Kohlenstoffgehaltes der Probe</li> <li>■ TIC: Bestimmung des gesamten anorganischen Kohlenstoffs aus Carbonaten und Hydrogencarbonaten sowie des gelösten Kohlendioxids</li> <li>■ TN: Bestimmung des gesamten gebundenen Stickstoffs in Ammoniumsalzen, Nitriten/Nitrat, Aminosäuren, Proteinen, etc.</li> <li>■ NPOC: Bestimmung von nicht ausblasbarem organischem Kohlenstoff</li> </ul> Wenden Sie diese Methode nicht an, wenn die Probe leicht austreibbare organische Substanzen enthält, da diese Substanzen mit dem CO <sub>2</sub> ausgetrieben werden.

Parameter	Beschreibung
	<ul style="list-style-type: none"> <li>NPOC plus: Bestimmung niedriger TOC-Gehalte in Proben mit hohen TIC-Gehalten oder einem hohen Anteil an gelöstem Kohlendioxid</li> <li>TOC: Bestimmung des in der Probe enthaltenen gesamten organischen Kohlenstoffs nach der Differenzmethode Wenden Sie die Differenzmethode an, wenn die Probe leicht austreibbare organische Substanzen wie Benzol, Cyclohexan, Chloroform etc. enthält. Verwenden Sie die Differenzmethode nicht, wenn der TIC-Gehalt der Probe deutlich über dem TOC-Gehalt liegt.</li> <li>POC: Bestimmung des gesamten ausblasbaren organischen Kohlenstoff (nicht bei allen Analysatoren verfügbar)</li> </ul> <p>Sie können in Methoden die Bestimmung mehrerer Parameter kombinieren: TOC-TN, TC-TN, NPOC-TN oder NPOC plus-TN.</p>
<b>Beschreibung</b> <b>Kommentar</b>	Beschreibung und Kommentar eingeben
<b>Status</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Signierstatus der Methode einsehen</li> <li>Methode nach Prüfung stufenweise freigeben oder sperren</li> </ul> <p>Nur für FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul: Detailinformation zu Signatures auf Tab <b>Signatures</b> einsehen.</p>
<b>Gerät</b>	<p>Methode bei Bedarf einer Gerätekonfiguration zuordnen</p> <p>Die Software ordnet die Methode automatisch der aktiven Gerätekonfiguration zu.</p>
<b>Methodenversion</b>	<p>Version der Methode</p> <p>Immer wenn Sie eine Methode bearbeiten, legt die Software eine neue Version an.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Nach Klick auf Icon  in den Versionen navigieren</li> <li>Mit Klick auf Icon  zur letzten Version zurückkehren</li> </ul>

### Tab Grundeinstellungen

Parameter	Beschreibung
<b>Diese Methode ist für Feststoffmessungen.</b>	<p>Über Checkbox Feststoffmessung für TC- und IC-Methoden aktivieren</p> <p>Die Software passt die Methodenparameter entsprechend an.</p>
<b>Manuelle Messung</b>	Über Checkbox manuelle Probenaufgabe aktivieren
<b>Berücksichtigung Eluat</b>	Über Checkbox für eluierte Proben festlegen, dass die Software den Eluatblindwert berücksichtigt
<b>Min. Replikate</b> <b>Max. Replikate</b>	<p>Minimale und maximale Anzahl der Wiederholmessungen aus demselben Probengefäß festlegen</p> <p>Wenn Sie für minimale und maximale Anzahl unterschiedliche Werte eingegeben, selektiert die Software automatisch Ausreißer gemäß den unter relativer bzw. absoluter Standardabweichung vorgegebenen Kriterien.</p>
<b>Probenvolumen</b>	Probenvolumen für Messung flüssiger Proben wählen
<b>Spülvolumen</b>	Spülvolumen für Spülen des Probenwegs mit Probe wählen
<b>Rührgeschwindigkeit</b>	Rührintensität stufenweise einstellen (nur bei Probenaufgabe mit Probengeber)

Parameter	Beschreibung
<b>Ofentemperatur</b>	<p>Ofentemperatur wählen (nur bei Analysatoren mit Hochtemperaturoxidation)</p> <p>Empfohlene Temperaturen:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Platinkatalysator Pt(Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>): 750 °C, bei stark salzhaltigen Proben: 720 ... 750 °C, mit Salzkitt: 680 °C</li> <li>■ Spezialkatalysator (CeO<sub>2</sub>): 850 °C</li> <li>■ Feststoffmodul HT 1300: 900 ... 1300 °C</li> </ul>
<b>Verdünnung: Vol. Originalprobe</b> <b>Verdünnung: Vol. gesamt</b>	<p>Verdünnungsverhältnis eingeben</p> <p>Angabe des Verdünnungsverhältnisses:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Anteile der Primärprobe (<b>Verdünnung: Vol. Originalprobe</b>) in Gesamtanteilen (<b>Verdünnung: Vol. gesamt</b>) (z. B. 1 in 10 heißt 1 ml Primärprobe in 10 ml Gesamtvolumen)</li> <li>■ Eine Verdünnung 1 in 1 bedeutet, dass die Probe unverdünnt vorliegt.</li> </ul>
<b>Rel. Standardabweichung</b> <b>Standardabweichung</b>	<p>Relative oder absolute Standardabweichung als Abbruchkriterien für Wiederholmessungen vorgeben</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Wenn die vorgegebene Standardabweichung nach der minimalen Anzahl der Bestimmungen unterschritten wird, führt der Analysator keine weiteren Bestimmungen durch.</li> <li>■ Wenn der vorgegebene Wert überschritten wird, führt der Analysator weitere Messungen aus demselben Probengefäß durch, bis die maximalen Anzahl der Bestimmungen erreicht ist.</li> </ul> <p>Sie können die Kriterien für jeden Messkanal getrennt festlegen.</p>
<b>Stabilität</b>	<p>Anzahl der Messwerte festlegen, die in Routine zur Ermittlung des Integrationsendes eingehen</p> <p>Der voreingestellte Wert ist optimiert und gilt für alle Methodentypen.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Wenn Sie den Stabilitätswert vergrößern, führt das mit hoher Sicherheit zum richtigen Integrationsende, die Analysen dauern jedoch länger.</li> <li>■ Wenn Sie den Stabilitätswert verringern, führt das zu einem schnellen Integrationsende, möglicherweise wird aber nicht der gesamte Gehalt erfasst.</li> </ul>
<b>Max. Integrationszeit</b>	<p>Maximale Integrationszeit als Kriterium für Abbruch der Integration vorgeben</p> <p>Die max. Integrationszeit ist der Zeitraum von Beginn bis Ende der Integration. Sie dient als Abbruchkriterium, wenn alle anderen Kriterien nicht bereits die Integration beendet haben.</p> <p>Die erforderliche Integrationszeit hängt vom Kohlenstoff- bzw. Stickstoffgehalt der Proben ab.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Die Integrationszeit der erwarteten Konzentration anpassen.</li> <li>■ Die Integrationszeit nicht zu hoch setzen, sonst dauert die Analyse lange.</li> </ul>
<b>Start</b>	<p>Abstand zur Basislinie festlegen, ab dem die Integration startet</p> <p>Die Integration beginnt, wenn der Messwert den Start-Wert überschreitet. Der voreingestellte Wert ist optimiert.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Start-Wert für niedrige Konzentrationen geringfügig senken. Ein zu niedrig gewählter Wert kann jedoch zur Erfassung des Basislinienrauschens führen.</li> <li>■ Bei zu hoch gewählten Werten könnten niedrige Messpeaks nicht erkannt werden.</li> </ul>

Parameter	Beschreibung
<b>Basisannäherung</b>	<p>Abstand zur Basislinie festlegen, ab dem Integration endet</p> <p>Die Integration endet, wenn der Messwert unter den Wert sinkt. Der voreingestellte Wert ist optimiert.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Zu niedrige Werte verlängern die Analysenzeit.</li> <li>■ Zu hohe Werte beenden die Integration zu früh. Möglicherweise wird nicht der gesamte Gehalt erfasst.</li> </ul>
<b>Reagenz verwenden</b>	<p>Über Checkbox festlegen, dass Natriumperoxodisulfat in den UV-Reaktor dosiert wird (nur für Analysatoren mit UV-Oxidation)</p> <p>Option aktivieren, wenn TOC-Konzentration &gt;1 mg/l ist</p>
<b>Automatisches Ansäuern</b>	<p>Proben über Probengeber automatisch ansäuern (nur für NPOC-Methoden)</p> <p>Wenn aktiviert, entnimmt der Probengeber Säure aus dem Säuregefäß auf dem Probengeber und säuert die Proben an (nicht für alle Probengeber).</p>
<b>TIC-Kontrolle</b>	<p>Festlegen, dass unmittelbar nach dem Ausblasen der TIC zur Kontrolle bestimmt wird (nur für NPOC-Methoden)</p> <p>Die TIC-Kontrolle prüft, ob TIC vollständig ausgeblasen wurde. Der ermittelte Wert wird im Messergebnis nicht berücksichtigt.</p>
<b>Ausblaszeit 1</b> <b>Ausblaszeit 2</b>	<p>Festlegen, wie lange Proben vor der ersten NPOC-Bestimmung ausgeblasen werden</p> <p>Die zweite Ausblaszeit liegt zwischen Wiederholmessungen und kann nur im manuellen Betrieb oder bei nichtparallelem Ausblasen mit Probengeber umgesetzt werden.</p>
<b>CSB-Berechnung aktiv</b>	<p>Für TOC- und NPOC-Methoden Berechnung des CSB (COD, Chemical Oxygen Demand) auf Grundlage des TOC/NPOC aktivieren</p> <p>Formel: <math>c(\text{CSB}) = A \times c(\text{TOC}) + B</math></p>
<b>CSB-Umrechnungsfaktor A</b> <b>CSB-Offset B</b>	<p>Anstieg (A) und Achsenabschnitt (B) für die Berechnung des CSB festlegen, Voreinstellung: A = 3,000, B = 0,000</p>
<b>BOD<sub>5</sub>-Berechnung aktiv</b>	<p>Für TOC- und NPOC-Methoden Berechnung des BSB<sub>5</sub> (BOD<sub>5</sub>, Biochemical Oxygen Demand) auf Grundlage des TOC/NPOC aktivieren</p> <p>Formel: <math>c(\text{BSB}_5) = A \times c(\text{TOC}) + B</math></p>
<b>BOD<sub>5</sub> Umrechnungsfaktor C</b> <b>BOD<sub>5</sub> Offset D</b>	<p>Anstieg (A) und Achsenabschnitt (B) für die Berechnung des BSB<sub>5</sub> festlegen, Voreinstellung: A = 3,000, B = 0,000</p>
<b>CO<sub>2</sub>-Berechnung aktiv</b>	<p>Für TIC-Methoden für Flüssigproben Berechnung der Kohlenstoffdioxidkonzentration auf Grundlage des TIC aktivieren</p> <p>Formel: <math>c(\text{CO}_2) = 2,833 \times c(\text{TIC})</math></p>
<b>Umrechnung in Gesamtprotein aktiv</b>	<p>Für TN-Methoden Berechnung des Gesamtproteingehalts auf Grundlage des TN aktivieren</p> <p>Formel: <math>c(\text{Total Protein}) = A \times c(\text{TN})</math></p>
<b>Gesamtprotein Umrechnungsfaktor A</b>	<p>Faktor für die Berechnung des Gesamtproteingehalts zwischen 0 und 10 festlegen, Voreinstellung: A = 6,250 (Vergleichssubstanz: BSA – Rinderserumalbumin)</p>

## Automatisierte Feststoffanalyse

Parameter	Beschreibung
Wartezeitposition Ofen	Haltepunkt im Ofen des Feststoffmoduls für Zufuhr der Schiffchen mit Probengeber
Wartezeit	Wartezeit an erster Ofenposition
Zufuhrgeschwindigkeit Ofen	Vorschubgeschwindigkeit für Schiffchenzufuhr (nach Passieren von <b>Wartezeitposition Ofen</b> )

## Integrationskriterien

Die Software bestimmt die Basislinie vor jeder Messung. Die folgenden Parameter legen die Integrationskriterien fest: **Stabilität**, **Max. Integrationszeit**, **Start** und **Basisannäherung**. Sie können die Integrationskriterien für Kohlenstoff und Stickstoff getrennt festlegen. Die voreingestellten Integrationskriterien sind bereits optimiert.

**i** HINWEIS! Wenn Sie die Integrationskriterien sehr stark ändern, verfälschen Sie die Messergebnisse.

## Tab Replikate

Parameter	Beschreibung
Spülvorgänge	Anzahl der Spülzyklen vor der Probenaufgabe festlegen Der Probengeber spült den Probenweg vor jeder Wiederholmessung x-mal mit Probe.
Ausblasen	Für NPOC-Messungen Ausblasen der Probe vor einer Wiederholmessung aktivieren oder deaktivieren Ein zusätzliches zweites Ausblasen der Probe ist nur im manuellen Betrieb oder bei nichtparallelem Ausblasen mit Probengeber möglich.
Probenmenge	Probenmasse für Feststoffmessungen festlegen, geeignet für Feststoffmessungen mit stets der gleichen Probenmasse wie bei der Adsorption von Luftschadstoffen an Aktivkohle
Probenposition	Probenpositionen für die Wiederholmessungen von Feststoffen festlegen


## 6.3 Neue Methode erstellen

- ▶ Mit Menübefehl **Methode | Methoden** Fenster **Methoden** öffnen.
- ▶ Auf Pfeil neben Button **Hinzufügen** klicken. Im Dropdown-Menü Methodentyp auswählen.
  - ✓ Die Software legt eine neue Methode an. Die Methode hat die voreingestellte Bezeichnung: Method + Zeitstempel.
- ▶ Bei Klick auf **Hinzufügen** legt die Software eine TC-Methode an (Voreinstellung).
- ▶ Methode in Tabelle **Überblick über Methoden** auswählen.
- ▶ Methodeneinstellungen im Bereich **Methode** editieren.
- ▶ Bei Bedarf unter **Methodentyp** Methodentyp noch einmal anpassen.
- ▶ Die Software ordnet die Methode automatisch der aktiven Gerätekonfiguration zu. Bei Bedarf Methode über Dropdown-Menü bei **Gerät** einer anderen Gerätekonfiguration zuordnen.
- ▶ Für Feststoffmethoden Checkbox **Diese Methode ist für Feststoffmessungen** aktivieren. Die Methodenparameter passen sich entsprechend an. Feststoffmethoden sind für TC und TIC möglich.

- ▶ Unter **Methodenname** Methodennamen ändern.  
Empfehlung: Wenn Sie Methoden für verschiedene Gerätekonfigurationen erstellen, Kürzel für Gerätekonfiguration im Methodennamen ergänzen.
- ▶ Optional Beschreibung und Kommentar zur Methode eingeben.
- ▶ Auf Tab **Grundeinstellungen** Methodenparameter innerhalb festgelegter Grenzen an Messaufgabe anpassen. Die voreingestellten Werte liefern für die meisten Messungen gute Ergebnisse.
- ▶ Auf Tab **Replikate** festlegen, ob und wie oft der Probengeber vor einer Wiederholungsmessung den Probenweg mit Probe spült.  
Für NPOC-Methoden festlegen, ob die Probe vor einer Wiederholungsmessung erneut ausgeblasen wird. Das Analysensystem kann Proben nur im manuellen Betrieb oder bei nichtparallelem Ausblasen mit Probengeber erneut ausblasen.
- ▶ Methode mit Klick auf Button  speichern.  
✓ Sie haben eine neue Methode angelegt.

## 6.4 Methode bearbeiten

- ▶ Mit Menübefehl **Methode | Methoden** Fenster **Methoden** öffnen.
- ▶ Methode in Tabelle **Überblick über Methoden** auswählen.
- ▶ Methodentyp bei Bedarf unter **Methodentyp** ändern. Wenn Sie Methodentyp ändern, passt sich Parameterauswahl an Methodentyp an.
- ▶ Methodeneinstellungen im Bereich **Methode** editieren.
- ▶ Methode mit Klick auf Button  speichern.  
✓ Beim Speichern wird eine neue Version der Methode angelegt. Die bearbeitete Methode wird mit Änderungsdatum gespeichert.

Mit Klick auf Icon  bei **Methodenversion** können Sie in den Methodenversionen navigieren. Mit Klick auf Icon  kehren Sie zur aktuellen Version zurück.

## 6.5 Methode kopieren

Sie können Methoden als Vorlage für die Entwicklung neuer Methoden verwenden. Erstellen Sie dafür eine Kopie der Methode.

- ▶ Mit Menübefehl **Methode | Methoden** Fenster **Methoden** öffnen.
- ▶ Methode in Tabelle **Überblick über Methoden** auswählen.
- ▶ Auf Button **Kopie** klicken.  
✓ Die Software kopiert die Methode. Die neue Methode hat die voreingestellte Bezeichnung: Method + Zeitstempel.
- ▶ Methode in Tabelle **Überblick über Methoden** auswählen.
- ▶ Unter **Methodenname** Methodennamen ändern.  
Empfehlung: Wenn Sie Methoden für verschiedene Gerätekonfigurationen erstellen, Kürzel für Gerätekonfiguration im Methodennamen ergänzen.
- ▶ Methodeneinstellungen im Bereich **Methode** editieren.
- ▶ Methode mit Klick auf Button  speichern.

- ✓ Sie haben eine neue Methode auf Grundlage einer vorhandenen Methode erstellt.

## 6.6 Methode importieren oder exportieren

### Methode importieren

Importieren Sie eine Methode im XML-Format wie folgt:

- ▶ Mit Menübefehl **Methode | Methoden** Fenster **Methoden** öffnen.
- ▶ Auf Button **Import** klicken.
- ▶ Im Fenster **Öffnen** in Windows-Dateiverwaltung Methode auswählen.
- ▶ Auf **Öffnen** klicken.
  - ✓ Die Software importiert die Methode. Wenn bereits eine Methode mit demselben Namen existiert, fordert die Software Sie auf, einen neuen Namen zu vergeben.

### Methode exportieren

Exportieren Sie eine Methode im XML-Format wie folgt:

- ▶ Mit Menübefehl **Methode | Methoden** Fenster **Methoden** öffnen.
- ▶ Methode in Tabelle **Überblick über Methoden** auswählen.
- ▶ Auf Button **Export** klicken.
- ▶ Speicherort im Fenster **Speichern unter** auswählen. Voreingestellter Exportordner: *C:/ProgramData/Analytik Jena/multiWinPro/export/methods*.
- ▶ Dateiname bei Bedarf anpassen und auf **Speichern** klicken.
  - ✓ Die Software exportiert die Methode.

## 6.7 Methodenreport drucken und speichern

### Report drucken

- ▶ Mit Menübefehl **Methode | Methoden** Fenster **Methoden** öffnen.
- ▶ Methode in Tabelle **Überblick über Methoden** auswählen.
- ▶ Mit Klick auf **Report** Druckvorschau öffnen.
- ▶ Für eine bessere Übersicht mit Klick auf Button **Navigator** den Navigationsbereich mit einer Seitenübersicht links neben dem Report einblenden. Ansicht mit Klick auf **Vergrößern** und **Verkleinern** vergrößern bzw. verkleinern.
- ▶ Firmenlogo in Report ergänzen. Nach Klick auf Button **Laden** im Bereich **Report-Logo** Logo in Windows-Dateiverwaltung auswählen und mit **Öffnen** in Report laden.
- ▶ Nach Klick auf **Drucker-Optionen** Drucker einrichten.
- ▶ Nach Klick auf **Seite einrichten** Seiteneinstellungen wie Seitengröße oder Seitenausrichtung festlegen. Voreinstellung: A4, Hochformat. Layout auf aktuelle Seite oder alle Report-Seiten anwenden.
- ▶ Druck mit Klick auf **Drucken** starten.

### Report speichern

- ▶ Mit Menübefehl **Methode | Methoden** Fenster **Methoden** öffnen.
- ▶ Methode in Tabelle **Überblick über Methoden** auswählen.
- ▶ Mit Klick auf Button **Report** Druckvorschau öffnen.
- ▶ Nach Klick auf **Speichern** Dateiname, Speicherverzeichnis und Dateityp im Fenster **Speichern unter** festlegen.

- ▶ Report mit Klick auf Button **Speichern** speichern.

Sie können Reporte in folgenden Dateiformaten speichern: PDF (voreingestellt), RTF, HTML, TXT, FP3.

Wenn Sie eine Methode bearbeiten, werden die Änderungen erst nach dem Speichern in den Report übernommen.



## 7 Menü Messung

Im Menü **Messung** erstellen und verwalten Sie Sequenzen für die Messung von Proben, Kalibrierungen, Tagesfaktoren, QC Standards, Blindwerten und SST-Tests. SST-Tests sind nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul möglich.



Im Menü Messung

- Mit Menübefehl **Neue Sequenz hinzufügen** öffnen Sie Fenster **Neue Sequenz**. Hier legen Sie Sequenzen an und starten die Messung.
- Mit Menübefehl **Sequenzen** öffnen Sie Fenster **Sequenzen** zum Verwalten gespeicherter Sequenzen.

### 7.1 Probentypen

Sie können in der Software verschiedene Probentypen messen. Dafür legen Sie in der Sequenz für jeden Messschritt den Probentyp fest.

Probentyp wählen

- ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz hinzufügen** neue Sequenz anlegen.
- ▶ In Sequenz Messschritt über **Hinzufügen nach Methode** anlegen. Aus Dropdown-Menü Methode wählen.
  - ✓ Die Software legt einen neuen Messschritt mit Probentyp **Probe** an.
- ▶ Bei Bedarf Probentyp anpassen:
  - Einen oder mehrere Messschritte in Sequenz markieren.
  - Im Dropdown-Menü bei **Probentyp** Probentyp wählen.
  - Probentyp **Kalibrierung** nur wählen, wenn Sie Kalibrierpunkte nachträglich in Kalibrierung ergänzen oder nachmessen wollen.
- ▶ Zum Anlegen der Messreihe für Kalibrierung Wizard **Kalibrierungs-Assistent** mit Klick auf Icon  öffnen.
- ▶ Zum Anlegen der Messreihe für Systemeignungstest (SST) Wizard **SST erstellen** mit Klick auf Icon  öffnen (nur mit FDA 21CFR Part 11 Konformitätsmodul).
  - ✓ Sie haben den Probentyp für einzelne Messschritte oder eine Messreihe in der Sequenz festgelegt.

#### 7.1.1 Probe

Wählen Sie Probentyp **Probe** für die Messung von Proben und Eluat. Die Software berechnet als Ergebnis eine Konzentration.

Wenn Sie eine Probe vor der Messung manuell verdünnen, tragen Sie die Verdünnung unter **Schritt-Parameter | Schritt | Verdünnung: Vol. Originalprobe** und **Verdünnung: Vol. gesamt** ein. Die Software berücksichtigt die Verdünnung bei der Ergebnisberechnung.

Die Software analysiert die Probe mit der gewählten Methode und berechnet die Ergebnisse auf Grundlage der gewählten Kalibrierung.

Wenn Sie Reagenzienblindwerte für  $\text{H}_3\text{PO}_4$  und  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8$  (nur für Analytoren mit UV-Oxidation) bestimmen oder manuell festlegen, berücksichtigt die Software die Blindwerte bei der Ergebnisberechnung.

### 7.1.2 Kalibrierung

In einer Kalibrierung messen Sie eine Reihe von Kalibrierstandards bekannter Konzentration.

Sie legen eine Kalibrierung innerhalb der Sequenz mithilfe des Wizards **Kalibrierungs-Assistent** an. Klicken Sie dafür auf Icon .


Wählen Sie die Kalibrierart aus:

- Führen Sie vorzugsweise Mehrpunktkalibrierungen mit konstantem Probenvolumen und variablen Standard-Konzentrationen durch. Option: **Festes Volumen**
- Verwenden Sie alternativ einen Standard konstanter Konzentration und dosieren Sie unterschiedliche Volumina des Standards. Option: **Feste Konzentration**

Sie können Kalibrierstandards zu einem späteren Zeitpunkt nachmessen oder Standards in einer Kalibrierung ergänzen. Wählen Sie dafür in der Sequenz Probentyp **Probentyp | Kalibrierung**.

Sie können den Ansatzwasserblindwert in der Kalibriersequenz messen oder manuell in den Wizard eintragen. Wenn für die durchgeführte Messung ein Reagenz verwendet wird, können Sie den Reagenzienblindwert messen oder manuell festlegen. Die Software bereinigt die Messwerte der Kalibrierstandards um Ansatzwasserblindwert und Reagenzienblindwert.

**Sehen Sie dazu auch**

-  Kalibrierung durchführen [► 87]

### 7.1.3 Tagesfaktor

Über Tagesfaktoren können Sie die Kalibrierung mit einer Standardlösung überprüfen und korrigieren. Die Software multipliziert alle nachfolgenden Messungen mit dem Tagesfaktor.

$$\text{Tagesfaktor} = c_{\text{soll}} / c_{\text{ist}}$$

Sie können den Tagesfaktor manuell festlegen oder über eine Messung bestimmen.

Wählen Sie dafür **Probentyp | Tagesfaktor**.

- Wenn Sie eine neue Kalibrierung durchführen oder einen Kalibrierbereich ergänzen, rechnet die Software mit Tagesfaktor = 1.
- Die Software wendet den Tagesfaktor so lange auf die Berechnung der Ergebnisse an, bis Sie einen neuen Tagesfaktor messen oder eingeben.
- Bestimmen Sie vor der Messung von Tagesfaktoren für niedrige Konzentrationsbereiche (< 10 mg/l) den aktuellen Ansatzwasserblindwert.
- Wenn für die Messung ein Reagenz verwendet wird, bereinigt die Software den Tagesfaktor um den Reagenzienblindwert.

In der Sequenz legen Sie Grenzen für den Tagesfaktor fest. Bei Unter- oder Überschreiten der Grenzen ist eine vollständige Kalibrierung erforderlich.

Wenn der gemessene Wert außerhalb des Toleranzbereiches liegt, ergänzt die Software einen Vermerk in den Ergebnissen.

Für den Probengeberbetrieb können Sie Aktionen für den Fall auswählen, dass der Wert außerhalb der Grenzen liegt.

<b>Ignorieren</b>	Die Software ignoriert die Über- oder Unterschreitung der Grenzen.
<b>Fragen</b>	Die Software blendet eine Abfrage ein. Sie haben die Möglichkeit, die Sequenz zu stoppen oder fortzuführen.
<b>Abgebrochen</b>	Die Software bricht die Sequenz ab.

### 7.1.4 QC Standard

Wählen Sie Probentyp **QC Standard**, wenn Sie Standards zur analytischen Qualitätskontrolle messen möchten. Die Analyse erfolgt mit der gewählten Methode und der Kalibrierung, die Sie im Panel **Parameter Probentyp** auswählen.

Bestimmen Sie vor der Messung eines QC Standards für niedrige Konzentrationsbereiche (< 10 mg/l) den Ansatzwasserblindwert.

Wenn für die Messung ein Reagenz verwendet wird, bereinigt die Software das Ergebnis um den Reagenzienblindwert.

Im Panel **Parameter Probentyp** hinterlegen Sie die Sollkonzentration des QC Standards. Unter **Untergrenze** und **Obergrenze** können Sie einen Toleranzbereich festlegen.

Wenn der gemessene Wert außerhalb des Toleranzbereiches liegt, ergänzt die Software einen Vermerk in den Ergebnissen.

Für den Probengeberbetrieb können Sie Aktionen für den Fall auswählen, dass der Wert außerhalb der Grenzen liegt.

<b>Ignorieren</b>	Die Software ignoriert die Über- oder Unterschreitung der Grenzen.
<b>Fragen</b>	Die Software blendet eine Abfrage ein. Sie haben die Möglichkeit, die Sequenz zu stoppen oder fortzuführen.
<b>Abgebrochen</b>	Die Software bricht die Sequenz ab.

### 7.1.5 Ansatzwasserblindwert

Der Ansatzwasserblindwert ist der Blindwert des Wassers, das Sie zum Ansetzen von Standards verwenden.

Die Software bereinigt alle Standardmessungen (QC Standard, Tagesfaktor, Kalibrierung) um den Ansatzwasserblindwert. Ermitteln Sie den Blindwert besonders für die Messung niedriger Konzentrationen (im µg/l-Bereich).

Sie können im Wizard für eine Kalibrierung festlegen, dass der Ansatzwasserblindwert vor der Kalibrierung gemessen wird. Stellen Sie dafür Ansatzwasser bereit. Die Software bestimmt für das Ansatzwasser das mittlere Integral. Alternativ können Sie den Blindwert separat bestimmen und in die Software eintragen.

Der Blindwert kann sich mit der Zeit ändern. Bestimmen Sie den Ansatzwasserblindwert vor der Messung von Standards neu. Andernfalls verwendet die Software den letzten Blindwert.

Wenn für die Messung ein Reagenz verwendet wird, bereinigt die Software den Blindwert um den Reagenzienblindwert.

Zur Überwachung des Blindwertes können Sie in der Sequenz unter **Parameter Probentyp** Grenzwerte vorgeben.

Die Angaben erfolgen in Flächeneinheiten FE/ml.

Wenn der gemessene Wert außerhalb des Toleranzbereiches liegt, ergänzt die Software einen Vermerk in den Ergebnissen.

Für den Probengeberbetrieb können Sie Aktionen für den Fall auswählen, dass der Wert außerhalb der Grenzen liegt.

<b>Ignorieren</b>	Die Software ignoriert die Über- oder Unterschreitung der Grenzen.
<b>Fragen</b>	Die Software blendet eine Abfrage ein. Sie haben die Möglichkeit, die Sequenz zu stoppen oder fortzuführen.
<b>Abgebrochen</b>	Die Software bricht die Sequenz ab.

## 7.1.6 Reagenzienblindwert

Der Reagenzienblindwert ist der Blindwert der eingesetzten Reagenzien:

- Phosphorsäure  $H_3PO_4$  (Reagenz für TIC-Zweig) – TIC-Blindwert
- Natriumperoxodisulfat  $Na_2S_2O_8$  (Reagenz für TC-Zweig, d.h. UV-Reaktor) – TC-Blindwert

Der Reagenzienblindwert für  $Na_2S_2O_8$  ist nur für Analysatoren mit UV-Oxidation verfügbar.

Die Software bereinigt die Ergebnisse von Proben und alle weiteren Blindwerten um den Reagenzienblindwert. Berücksichtigen Sie den Reagenzienblindwert besonders dann, wenn Sie niedrige Konzentrationen (im  $\mu g/l$ -Bereich) messen.

Sie können den Blindwert in einer Sequenz messen. Alternativ können Sie den Blindwert separat bestimmen und in die Software eintragen.

- Die Reagenzienblindwerte können nicht mit Mischmethoden, wie z. B. TOC, gemessen werden.
- Der Phosphorsäureblindwert muss mit einer IC-Methode gemessen werden.
- Der Blindwert der Natriumperoxodisulfat-Lösung kann mit einer NPOC- oder TC-Methode gemessen werden.

Der Blindwert kann sich mit der Zeit ändern. Bestimmen Sie den Blindwert deshalb am Beginn einer Messreihe neu. Andernfalls verwendet die Software den letzten Blindwert.

Zur Überwachung des Blindwertes können Sie in der Sequenz unter **Parameter Probentyp** Grenzwerte vorgeben.

Das Injektionsvolumen von Reagenzien ist konstant und unabhängig vom Probenvolumen. Die Angabe des Reagenzienblindwertes erfolgt daher als Absolutwert in Flächeneinheiten (FE).

Wenn der gemessene Wert außerhalb des Toleranzbereiches liegt, ergänzt die Software einen Vermerk in den Ergebnissen.

Für den Probengeberbetrieb können Sie Aktionen für den Fall auswählen, dass der Wert außerhalb der Grenzen liegt.

<b>Ignorieren</b>	Die Software ignoriert die Über- oder Unterschreitung der Grenzen.
<b>Fragen</b>	Die Software blendet eine Abfrage ein. Sie haben die Möglichkeit, die Sequenz zu stoppen oder fortzuführen.
<b>Abgebrochen</b>	Die Software bricht die Sequenz ab.

## 7.1.7 Verdünnungsblindwert

Der Verdünnungsblindwert ist der Blindwert des Wassers, das Sie zum Verdünnen von Proben verwenden.

Wenn Sie eine Probe mit Verdünnung messen, bereinigt die Software das Ergebnis um den Verdünnungsblindwert. Die Software berücksichtigt dabei das verwendete Volumen an Verdünnungsmittel.

Sie können den Blindwert in einer Sequenz messen. Alternativ können Sie den Blindwert separat bestimmen und in die Software eintragen.

Der Blindwert kann sich mit der Zeit ändern. Bestimmen Sie den Blindwert deshalb am Beginn einer Messreihe neu. Andernfalls verwendet die Software den letzten Blindwert.

Angabe der Verdünnung:

- Anteile der Primärprobe in Gesamtanteilen  
(z.B. 1 Teile in 10 Teilen heißt 1 ml Primärprobe werden zu 10 ml Gesamtvolumen mit Verdünnungswasser aufgefüllt.)

- Eine Verdünnung 1 in 1 bedeutet, die Probe liegt unverdünnt vor.

Wenn für die Messung ein Reagenz verwendet wird, bereinigt die Software den Blindwert um den Reagenzienblindwert.

Zur Überwachung des Blindwertes können Sie in der Sequenz unter **Parameter Proben-typ** Grenzwerte vorgeben.

Die Angaben erfolgen in Flächeneinheiten FE/ml.

Wenn der gemessene Wert außerhalb des Toleranzbereiches liegt, ergänzt die Software einen Vermerk in den Ergebnissen.

Für den Probengeberbetrieb können Sie Aktionen für den Fall auswählen, dass der Wert außerhalb der Grenzen liegt.

<b>Ignorieren</b>	Die Software ignoriert die Über- oder Unterschreitung der Grenzen.
<b>Fragen</b>	Die Software blendet eine Abfrage ein. Sie haben die Möglichkeit, die Sequenz zu stoppen oder fortzuführen.
<b>Abgebrochen</b>	Die Software bricht die Sequenz ab.

### 7.1.8 Eluatblindwert

Der Eluatblindwert ist ein Blindwert für Proben aus der Reinigungsvalidierung oder Eluatherstellung. Der Blindwert entspricht dem TOC-Gehalt des verwendeten Reinstwassers, das Sie z. B. zum Extrahieren/Eluieren von Swabs verwenden.

Die Berücksichtigung des Eluatblindwertes legen Sie in der Methode fest. Dafür aktivieren Sie die Option Berücksichtigung Eluat.

Sie können den Blindwert in einer Sequenz messen. Alternativ können Sie den Blindwert separat bestimmen und in die Software eintragen.

Der Blindwert kann sich mit der Zeit ändern. Bestimmen Sie den Blindwert deshalb am Beginn einer Messreihe neu. Andernfalls verwendet die Software den letzten Blindwert.

Die Software bereinigt das Messergebnis um den Blindwert und berücksichtigt dabei das Injektionsvolumen. Die Software wendet den Eluatblindwert nicht bei Kalibriermessungen an, da Sie Standards im Allgemeinen nicht eluieren.

Wenn für die Messung ein Reagenz verwendet wird, bereinigt die Software den Blindwert um den Reagenzienblindwert.

Zur Überwachung des Blindwertes können Sie in der Sequenz unter **Parameter Proben-typ** Grenzwerte vorgeben.

Die Angaben erfolgen als Absolutwert in Flächeneinheiten FE/ml.

Wenn der gemessene Wert außerhalb des Toleranzbereiches liegt, ergänzt die Software einen Vermerk in den Ergebnissen.

Für den Probengeberbetrieb können Sie Aktionen für den Fall auswählen, dass der Wert außerhalb der Grenzen liegt.

<b>Ignorieren</b>	Die Software ignoriert die Über- oder Unterschreitung der Grenzen.
<b>Fragen</b>	Die Software blendet eine Abfrage ein. Sie haben die Möglichkeit, die Sequenz zu stoppen oder fortzuführen.
<b>Abgebrochen</b>	Die Software bricht die Sequenz ab.

### 7.1.9 Schiffchenblindwert

Der Schiffchenblindwert ist der Blindwert der Schiffchen, mit denen Sie feste Proben in den Analysator einbringen.

Sie bestimmen den Schiffchenblindwert, indem Sie ein leeres Schiffchen oder ein Schiffchen mit Probenzusätzen in den Verbrennungsofen einbringen und analysieren.

Sie können den Blindwert in einer Sequenz messen. Alternativ können Sie den Blindwert separat bestimmen und in die Software eintragen.

Der Blindwert kann sich mit der Zeit ändern. Bestimmen Sie den Blindwert deshalb am Beginn einer Messreihe neu. Andernfalls verwendet die Software den letzten Blindwert.

Zur Überwachung des Blindwertes können Sie in der Sequenz unter **Parameter Proben-  
typ** Grenzwerte vorgeben.

Die Angaben erfolgen als Absolutwert in FE.

Wenn der gemessene Wert außerhalb des Toleranzbereiches liegt, ergänzt die Software einen Vermerk in den Ergebnissen.

Für den Probengeberbetrieb können Sie Aktionen für den Fall auswählen, dass der Wert außerhalb der Grenzen liegt.

<b>Ignorieren</b>	Die Software ignoriert die Über- oder Unterschreitung der Grenzen.
<b>Fragen</b>	Die Software blendet eine Abfrage ein. Sie haben die Möglichkeit, die Sequenz zu stoppen oder fortzuführen.
<b>Abgebrochen</b>	Die Software bricht die Sequenz ab.


## 7.2 Fenster Neue Sequenz

Sie öffnen das Fenster **Neue Sequenz** mit dem Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz hinzufügen**.

Sie gelangen zum Fenster auch, wenn Sie eine gespeicherte Sequenz im Fenster **Sequenzen** mit Klick auf Button **Laden** oder mit Doppelklick laden. Das Fenster trägt dann den Namen der gespeicherten Sequenz.

Im Fenster Neue Sequenz

Im Fenster **Neue Sequenz** erstellen Sie Sequenzen und starten die Messung.

- In der Sequenz legen Sie mit Button **Hinzufügen nach Methode** einzelne Messschritte an und wählen für jeden Messschritt Methode und Proben-  
typ aus. Über Befehl **Mehrere Schritte hinzufügen** (im Kontextmenü) können Sie schnell mehrere Messschritte anlegen.
- Nach Klick auf Button  oder  legen Sie die Messreihen für Systemeignungstests (SST) und Kalibrierungen mithilfe von Wizards an. (Systemeignungstests nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul)
- Im Panel **Schritt-Parameter** passen Sie ausgewählte Methodenparameter an die Messaufgabe an. Sie wählen die Kalibrierung aus. Sie sehen Blindwerte ein und editieren die Blindwerte bei Bedarf.
- Im Panel **Parameter Proben-  
typ** legen Sie für den Proben-  
typ spezifische Parameter wie Sollwerte, Grenzwerte und Aktionen bei Grenzüberschreitung fest.
- Im Panel **Sequenzparameter** legen Sie sequenzübergreifende Einstellungen wie automatische Verdünnung fest.
- Über den Button **Ergebnistabelle** wählen Sie eine Ergebnistabelle für die Ergebnisspeicherung aus.

- Nach Start der Messung mit Klick auf Icon ► verfolgen Sie die Aufzeichnung aktueller Messergebnisse im unteren Fensterbereich. Die Ergebnisse bereits gemessener Proben sehen Sie im Panel **Schritt-Ergebnisse** ein.

Layout des Fensters

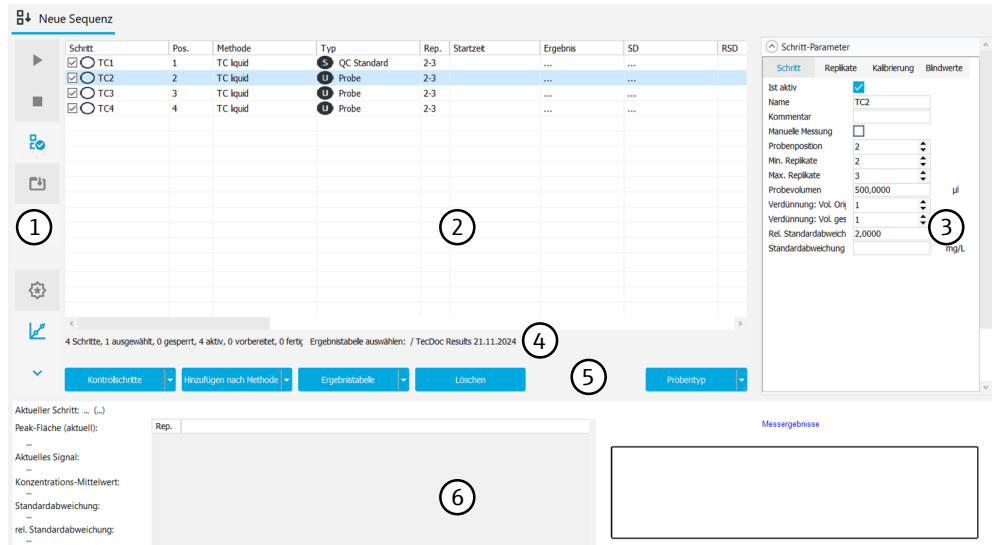




Abb. 25 Fenster Neue Sequenz

Element	Beschreibung
Werkzeugleiste mit Icons (1)	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Mit Icon ► Messung der Sequenz starten oder mit ■ abbrechen</li> <li>■ Nach Abbruch einer Sequenz können Sie mit Klick auf Icon ► die nicht bearbeiteten Schritte messen. Dafür in der Abfrage auf <b>ja</b> klicken. Bei Klick auf <b>nein</b> führt die Software keine Messung aus.</li> <li>■ Mit Icon  Sequenz auf Plausibilität prüfen</li> <li>■ Mit Icon  Sequenz speichern oder speichern unter</li> <li>■ Mit Icon  leere Sequenz einer anderen Gerätekonfiguration zuordnen</li> <li>■ Mit Icon  Wizard <b>SST erstellen</b> öffnen und Systemeignungstest vorbereiten (nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul)</li> <li>■ Mit Icon  Wizard <b>Kalibrierungs-Assistent</b> öffnen und Kalibrierung vorbereiten</li> </ul>
Sequenztafel (2)	Sequenz mit Messschritten in tabellarischer Übersicht einsehen
Ausklappbare Panels (3)	Einstellungen und Ergebnisse für ausgewählte Schritte einsehen und bearbeiten <b>Schritt-Parameter</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Probenamen vergeben und Probenpositionen festlegen</li> <li>■ Methodenparameter an Messaufgabe anpassen</li> <li>■ Kalibrierung auswählen</li> <li>■ Blindwerte einsehen und editieren</li> </ul> <b>Parameter Probenotyp</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Grenzwerte und Aktionen bei Grenzüberschreitung festlegen</li> <li>■ Bei Probenotyp <b>Kalibrierung</b> (nur Nachmessungen) und <b>Tagesfaktor</b> Sollwerte von Standards festlegen und Kalibrierung auswählen, der der Messwert zugeordnet werden soll</li> </ul>

Element	Beschreibung
	<p><b>Schritt-Ergebnisse</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Messergebnisse für ausgewählte Schritte einsehen, mit Integralen, Massen und Konzentrationen, relativen und absoluten Standardabweichungen</li> </ul> <p><b>Sequenzparameter</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Sequenzübergreifende Einstellungen aktivieren: Feststoffmessung, automatische/intelligente Verdünnung, intelligente Volumenreduktion und paralleles Ausblasen für NPOC-Methoden</li> </ul> <p>Die Software passt die verfügbaren Einstellungen an die Gerätekonfiguration an.</p>
Zeile Sequenz-Info (4)	<p>Zusammenfassende Infos zu Sequenz und aktuellen Bearbeitungsstatus einsehen:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Anzahl der Gesamtschritte sowie der ausgewählten, gesperrten und aktiven Schritte</li> <li>Anzahl der vorbereiteten und durchgeführten Analysen</li> <li>Gewählte Ergebnistabelle</li> <li>Zugeordnete Gerätekonfiguration</li> </ul>
Button-Leiste (5)	Sequenz bearbeiten (siehe unten)
Ausklappbare Ergebnisansicht (6)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Messablauf und Aufzeichnung aktueller Messergebnisse in tabellarischer und grafischer Ansicht verfolgen</li> <li>Anzeige mit Icons  /  ein- oder ausklappen</li> </ul>

Buttons

Button	Beschreibung
<b>Kontrollschritte</b>	<p>Kontrollschritte in Sequenz einfügen</p> <p><b>Pause</b> Abarbeitung der Sequenz pausieren, unter <b>Schritt-Parameter</b> Pausendauer in (s) festlegen, Sequenz mit oder ohne Bestätigung des Benutzers fortsetzen</p> <p><b>Spülen</b> Zusätzlichen Spülschritt in Sequenz einfügen</p> <p><b>Rückspülung</b> Probenweg mit Reinstwasser rückspülen (nicht bei allen Analysatoren)</p> <p><b>Ausblasen</b> NPOC-Proben ausblasen, dafür unter <b>Schritt-Parameter</b> Position auf Probentablett und Ausblaszeit festlegen. Bei Bedarf manuelle Messung aktivieren</p> <p><b>Gerät ausschalten</b> Gerät am Ende der Sequenz herunterfahren</p> <p><b>Gerät in Standby</b> Gerät in Standby schalten. Das Gerät senkt die Ofentemperatur auf die unter <b>Schritt-Parameter</b> gewählte Temperatur und schaltet den Gasfluss ab.</p> <p><b>Gasfluss setzen</b> Gasfluss an- oder ausschalten</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Kontrollschritt <b>Gasfluss setzen</b> in Sequenz einfügen, um Gasfluss z. B. am Messende auszuschalten</li> <li>Kontrollschritt <b>Gasfluss setzen</b> in Sequenz einfügen und in Panel <b>Schritt-Parameter</b> Checkbox <b>GasFlowActive</b> aktivieren, um Gasfluss wieder anzuschalten</li> </ul> <p><b>Gerät aufwecken</b> Gerät nach Standby initialisieren</p>



Button	Beschreibung
Hinzufügen nach Methode	Schritt in Sequenz ergänzen, Methode aus Dropdown-Menü oder im Fenster <b>Methode auswählen</b> auswählen Tipp: Mit dem Befehl <b>Mehrere Schritte hinzufügen</b> (im Kontextmenü der Sequenztafel) mehrere Schritte ergänzen
Ergebnistabelle	<ul style="list-style-type: none"> <li>Ergebnistabelle für die Ergebnisspeicherung aus Dropdown-Menü auswählen</li> <li>Neue Ergebnistabelle anlegen</li> </ul> <p>Wenn Sie keine Ergebnistabelle auswählen, speichert die Software die Ergebnisse in der voreingestellten Ergebnistabelle. Voreinstellung siehe: <b>Programm   Einstellungen   Standard-Ergebnistabelle</b></p> <p><b>i</b> HINWEIS! Ohne Ergebnistabelle kann die Sequenz nicht gestartet werden.</p>
löschen	Ausgewählten Schritt löschen
Probentyp	<ul style="list-style-type: none"> <li>Probentyp aus Dropdown-Menü auswählen: Kalibrierstandard, Tagesfaktor, QC Standard und verschiedene Blindwerte</li> <li>Mit Klick auf Button <b>Probentyp</b> Probentyp zurück auf Probe ändern</li> </ul>

### 7.2.1 Sequenztafel

Die Sequenztafel ist Teil des Fensters **Neue Sequenz**. Die Sequenztafel fasst in tabellarischer Übersicht Informationen zu allen Messschritten zusammen.

Layout der Sequenztafel

Sie können das Layout der Sequenztafel über den Befehl **Anzeigespalten verwalten** (im Kontextmenü) anpassen.

Spalte	Beschreibung
Schritt	<p>Checkbox und Probenbezeichnung</p> <p>Mithilfe der Checkboxes Kontrollschritte in der Sequenz aktivieren bzw. deaktivieren</p> <p>Folgende Sonderzeichen sind bei der Probenbezeichnung nicht erlaubt: % &amp; ( ) = ` ´ + ~ ' # , ; - _</p> <p>Sie können die Probenbezeichnung auf verschiedene Weise ändern:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Mit schnellem Doppelklick auf den Messschritt Fenster <b>Eigenschaften der Schritte festlegen</b> öffnen. Im Fenster Probenbezeichnung festlegen.</li> <li>Nach langsamen Doppelklick Messschritt direkt in Sequenztafel umbenennen</li> <li>Probenbezeichnung im Panel <b>Schritt-Parameter</b> bei <b>Name</b> editieren.</li> </ul>
Pos.	<p>Position auf Probenplatte</p> <p>Probenposition nach Doppelklick im Fenster <b>Eigenschaften der Schritte festlegen</b> oder im Panel <b>Schritt-Parameter</b> editieren.</p>
Methode	Messmethode
Typ	<p>Probentyp (Probe, Kalibrierstandard, Tagesfaktor, QC Standard, Blindwert)</p> <p>Probentyp über Button <b>Probentyp</b> anpassen</p>
Rep.	Minimale und maximale Anzahl an Wiederholmessungen, Angabe: min-max
Startzeit	Startzeit der Messung
Ergebnis	Messergebnis (mittlere Konzentration)

Spalte	Beschreibung
SD	Standardabweichung des Messergebnisses
RSD	Relative Standardabweichung des Messergebnisses in (%)
c(TC), etc.	Mittlere Konzentration für die verschiedenen Messkanäle
SD(TC), etc.	Standardabweichung für die Ergebnisse der verschiedenen Messkanäle
RSD(TC), etc.	Relative Standardabweichung für die Ergebnisse der verschiedenen Messkanäle in (%)
Volumen	Probenvolumen
Masse	Probenmasse für Feststoffmessungen
Info	Individuelle Information
Soll-Konzentration	Soll-Konzentration Soll-Konzentration in Panel <b>Parameter Probentyp</b> vorgeben
Messparameter	Messkanäle
Verdünnung	Verdünnungsverhältnis für manuell oder automatisch verdünnte Proben
CSB	Für TOC- und NPOC-Methoden ermittelter CSB (COD, Chemical Oxygen Demand)
BSB <sub>5</sub>	Für TOC- und NPOC-Methoden ermittelter BSB <sub>5</sub> (BOD <sub>5</sub> , Biochemical Oxygen Demand)
Ges. Protein	Für TN-Methoden ermittelter TP-Gehalt (Total Protein)
CO <sub>2</sub>	Für TIC-Methoden ermittelte Kohlenstoffdioxidkonzentration








## Kontextmenü

Befehl	Beschreibung
<b>Position</b>	Messschritt in Sequenztabelle verschieben  <b>Nach oben verschieben</b> Eine Zeile nach oben verschieben  <b>Nach unten verschieben</b> Eine Zeile nach unten verschieben  <b>An Listenanfang verschieben</b> An Listenanfang verschieben  <b>Ans Listenende verschieben</b> An Listenende verschieben  <b>An Position verschieben</b> Im Fenster <b>An Position verschieben</b> gewünschte Position auswählen und Messschritt mit Klick auf Button <b>Ok</b> verschieben
<b>Ausgewählte Schritte löschen</b>	Ausgewählte Schritte löschen
<b>Schritttyp ändern</b>	Für ausgewählte Schritte Probentyp ändern
<b>Methode zuweisen</b>	Für ausgewählte Schritte neue Methode wählen
<b>Diesen Schritt als Nächstes abarbeiten</b>	Ausgewählten Schritt als Nächstes messen  Die Software verschiebt den Schritt an den Anfang der Sequenz bzw. bei laufenden Messungen an die nächste Position.
<b>Sequenz importieren</b>	Sequenz im XML- oder CSV-Format importieren
<b>Diese Sequenz exportieren</b>	Sequenz im XML-Format exportieren

Befehl	Beschreibung
<b>Mehrere Schritte hinzufügen</b>	Mehrere Schritte in Sequenz ergänzen, die mit derselben Methode gemessen und nach einem einheitlichen Schema benannt werden <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Methode unter <b>Methode:</b> auswählen</li> <li>▪ Schrittzahl unter <b>Anzahl:</b> festlegen</li> <li>▪ Wortstamm unter <b>Probename:</b> festlegen</li> <li>▪ Startnummer in Eingabefeld <b>Nummerierung ab:</b> eintragen, um Proben zu nummerieren</li> <li>▪ Probenserie mit Klick auf Button <b>Erstellen</b> in Sequenz übernehmen</li> </ul>
<b>Benutzerdefinierte Spalten</b>	Eigene Sequenzspalten mit ID und Spaltennamen anlegen
<b>Schritteigenschaften</b>	Probenbezeichnung und Position auf Probentablett für Messschritt anpassen, individuelle Information ergänzen
<b>Anzeigespalten verwalten</b>	Auswahl und Reihenfolge der Sequenzspalten anpassen
<b>Ausgabeeinheiten auswählen</b>	Nach Rechtsklick außerhalb der Tabelle mit Befehl <b>Ausgabeeinheiten auswählen</b> Einheiten und Nachkommastellen für die Ergebnisanzeige im Fenster <b>Neue Sequenz</b> anpassen
<b>Eingabeeinheiten auswählen</b>	Nach Rechtsklick außerhalb der Tabelle mit Befehl <b>Eingabeeinheiten auswählen</b> Einheiten und Nachkommastellen für die Eingabe von Probeninformationen im Fenster <b>Neue Sequenz</b> anpassen

## 7.2.2 Sequenztabelle anpassen

Sie können das Layout der Sequenztabelle über den Befehl **Anzeigespalten verwalten** (im Kontextmenü) anpassen.

- ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
- ▶ In Sequenztabelle mit Rechtsklick Kontextmenü öffnen.
- ▶ Zum Anlegen eigener Spalten Befehl **Benutzerdefinierte Spalten** wählen.
- ▶ Im Fenster **Benutzerdefinierte Spalten** unter **Spalten-ID** eine ID für die Spalte festlegen. Unter **Spaltenname** Namen festlegen. Der Name wird im Tabellenkopf angezeigt.
- ▶ Eingaben mit **Ok** bestätigen.
- ▶ Befehl **Anzeigespalten verwalten** wählen.
- ▶ Im Fenster **Anzeigespalten verwalten** Anzeige und Reihenfolge der Tabellenspalten anpassen:
  - Mit Icon  Spalte aus Vorschlägen (links) in Tabelle (rechts) übernehmen.
  - Mit Icon  Spalte aus Tabelle (rechts) entfernen.
  - Mit Icon  alle Spalten aus Vorschlägen (links) in Tabelle (rechts) übernehmen.
  - Mit Icon  alle Spalten aus Tabelle (rechts) entfernen.
  - Mit Icon  Spalte nach unten bzw. in Sequenztabelle nach rechts verschieben.
  - Mit Icon  Spalte nach oben bzw. in Sequenztabelle nach links verschieben.
  - Mit Icon  zu voreingestellter Spaltenauswahl zurückkehren.
- ▶ Eingaben mit **Ok** bestätigen.
  - ✓ Sie haben die Tabellenspalten angepasst.

### 7.3 Fenster Sequenzen

Sie öffnen das Fenster **Sequenzen** mit dem Menübefehl **Sequenzen | Sequenzen**.

Im Fenster Sequenzen

Im Fenster **Sequenzen** verwalten Sie die gespeicherten Sequenzen.

- Sie können gespeicherte Sequenzen mit Doppelklick auf die Sequenz oder Klick auf Button **Laden** laden. Sie können die Sequenz anschließend editieren oder die Messung starten.
- Sie löschen Sequenzen mit Klick auf Button **löschen**.
- Das optionale FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul verhindert das Löschen von Daten.
- Sie ordnen Sequenzen nach Klick auf **Gruppe zuweisen** im Fenster **Gruppe auswählen** in Gruppen.
- Sie importieren und exportieren Sequenzen mithilfe der Buttons **Import** und **Export** im XML-Format.

Layout des Fensters

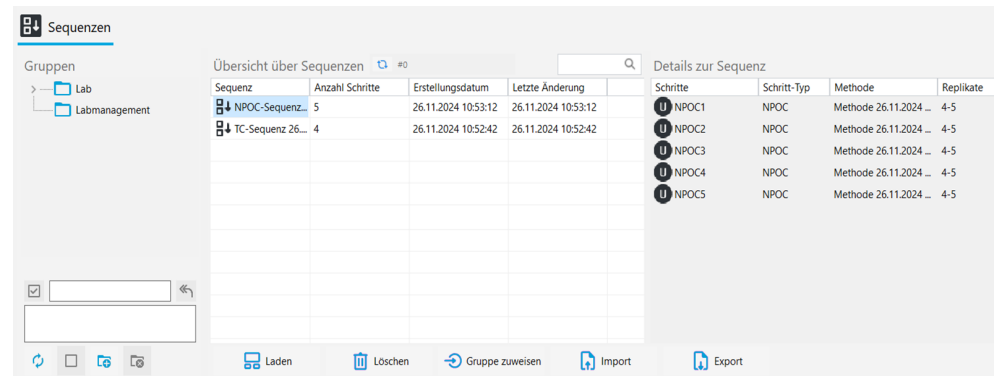


Abb. 26 Fenster Sequenzen

Bereich	Beschreibung
<b>Gruppen</b> (links)	Gruppenverwaltung
<b>Übersicht über Sequenzen</b> (Mitte)	Tabellarische Übersicht der gespeicherten Sequenzen mit den Angaben: <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Sequenzname</li> <li>■ Anzahl der Messschritte</li> <li>■ Datum von Erstellung und letzter Änderung</li> </ul>
<b>Details zur Sequenz</b> (rechts)	Detailansicht für ausgewählte Sequenz mit Spalten: <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Messschritt mit Bezeichnung</li> <li>■ Messtyp oder Kontrollschritt</li> <li>■ Methode</li> <li>■ Minimale und Maximale Anzahl der Wiederholmessungen (min-max)</li> </ul>

Sehen Sie dazu auch

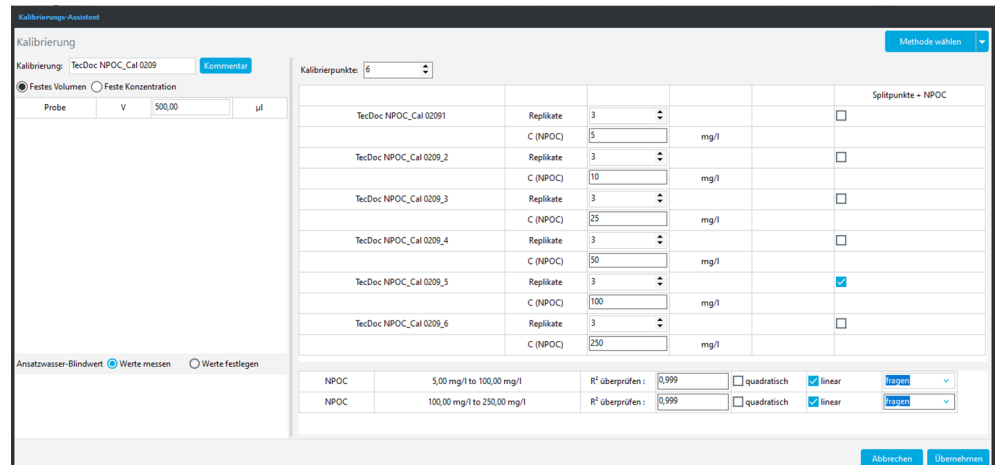
In Gruppen ordnen [► 32]

## 7.4 Wizard Kalibrierungs-Assistent

Im Wizard **Kalibrierungs-Assistent** können Sie eine Kalibrierung vorbereiten.

Sie öffnen den Wizard über Icon  im Fenster **Neue Sequenz**.

Layout




**Abb. 27 Wizard Kalibrierungs-Assistent**

Element	Beschreibung
Button <b>Methode wählen</b>	Nach Klick auf <b>Methode wählen</b> Methode im Fenster <b>Methode auswählen</b> auswählen
Eingabefeld <b>Kalibrierung</b>	Name für Kalibrierung vergeben Die voreingestellte Bezeichnung lautet: Methodentyp_Cal.
Button <b>Kommentar</b>	Nach Klick auf <b>Kommentar</b> im Fenster <b>Kommentar</b> Kommentar eingeben
Radio Buttons <ul style="list-style-type: none"> <li>■ <b>Festes Volumen</b></li> <li>■ <b>Feste Konzentration</b></li> </ul>	Option auswählen: <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Mehrpunktkalibrierung mit konstantem Dosiervolumen und mehreren Standards unterschiedlicher Konzentration durchführen</li> <li>■ Alternativ Mehrpunktkalibrierung mit einem Standard konstanter Konzentration und variablen Dosiervolumina durchführen</li> </ul>
Eingabefeld <b>Probe</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Bei Kalibrierung mit konstantem Volumen: Die Software übernimmt das Volumen aus der Methode. Volumen optional anpassen.</li> <li>■ Bei Kalibrierung mit konstanter Konzentration: Konzentration des Kalibrierstandards eingeben.</li> </ul>
<b>Ansatzwasser-Blindwert:</b> mit Radio Buttons <ul style="list-style-type: none"> <li>■ <b>Werte messen</b></li> <li>■ <b>Werte festlegen</b></li> </ul>	Ansatzwasserblindwert berücksichtigen: <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Ansatzwasserblindwert direkt vor der Kalibrierung messen. Die Software legt die Blindwertbestimmung in Sequenz an.</li> <li>■ Alternativ Ansatzwasserblindwert separat bestimmen und in (FE/ml) eingeben (Wert 0 eingeben, wenn Ansatzwasserblindwert unberücksichtigt bleiben soll)</li> </ul>
Feld <b>Kalibrierpunkte:</b>	Anzahl der Kalibrierpunkte festlegen


Element	Beschreibung
Tabelle mit Kalibrierpunkten	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Die Software legt die Bezeichnung für Kalibrierpunkte fest: Methodentyp_Cal_Nr Bei Bedarf Bezeichnung im Fenster <b>Neue Sequenz zufügen</b> anpassen.</li> <li>■ Für Kalibrierpunkte unter <b>Replikate</b> Anzahl der Wiederholmessungen festlegen. Die Software schlägt die maximale Anzahl der Bestimmungen aus der Methode vor.</li> <li>■ Für Kalibrierpunkte Konzentration bzw. Volumen der Standards eintragen</li> </ul>
Checkbox <b>Splitpunkte</b> + Messkanal	Für jeden Messkanal Trennpunkte aktivieren und damit mehrere Kalibrierbereiche festlegen die jeweils einen gemeinsamen Trennpunkt haben
Tabelle der Kalibrierbereiche	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Für jeden Kalibrierbereich Bestimmtheitsmaß <math>R^2</math> als Grenzwert festlegen, Voreinstellung 0,999</li> <li>■ Regressionstyp linear oder quadratisch auswählen</li> <li>■ Aus dem Dropdown-Menü Aktion auswählen, für den Fall dass das Bestimmtheitsmaß den Grenzwert nicht erreicht, z. B. <b>Abgebrochen</b></li> </ul>
Button <b>Abgebrochen</b>	Vorbereitung der Kalibrierung abbrechen
Button <b>Übernehmen</b>	Kalibrierung in Sequenz übernehmen



#### Sehen Sie dazu auch



 Kalibrierung durchführen [▶ 87]

## 7.5 Sequenz anlegen und mit manueller Probenaufgabe messen

Vorüberlegungen:

- Blindwerte ändern sich mit der Zeit. Entscheiden Sie deshalb, ob Sie am Beginn der Sequenz Blindwerte neu messen.
- Bei Bedarf können Sie die Kalibrierung mit einem Tagesfaktor korrigieren. Messen Sie dafür am Beginn der Sequenz eine oder mehrere Standardlösungen zur Bestimmung des oder der Tagesfaktoren. Die Software übernimmt die Tagesfaktoren automatisch in die Kalibrierung.
- ▶ Eine oder mehrere Methoden für manuelle Probenaufgabe vorbereiten. Dafür in Methodenparametern Checkbox **Manuelle Messung** aktivieren.  
Eine Sequenz kann Probenschritte mit verschiedenen Methoden enthalten. Flüssigkeiten und Feststoffe können aber nicht in einer Sequenz gemessen werden.  
Methodenparameter **Automatisches Ansäuern** für manuelle Messungen deaktivieren.
- ▶ Alternativ: Checkbox **Manuelle Messung** erst beim Erstellen der Sequenz in Methodenparametern aktivieren.
- ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
- ▶ Für manuelle Feststoffmessung im Panel **Sequenzparameter** Checkbox **Feststoffmessung** aktivieren.
- ▶ Als Voreinstellung ordnet die Software eine neue Sequenz der aktiven Gerätekonfiguration zu. Bei Bedarf nach Klick auf Icon  die leere Sequenz einer anderen Gerätekonfiguration zuordnen.  
Dafür im Fenster **Gerätekonfiguration auswählen** eine Gerätekonfiguration auswählen. Auswahl mit Klick auf Button **Ok** bestätigen.



- ▶ Alternativ eine bereits vorbereitete Sequenz öffnen. Fenster **Sequenzen** mit Menübefehl **Sequenzen | Sequenzen** öffnen. Aus Tabelle **Übersicht über Sequenzen** vorbereitete Sequenz auswählen. Sequenz mit Doppelklick oder **Laden** öffnen.
- ▶ Mit **Hinzufügen nach Methode** Messschritte in Sequenz anlegen. Darauf achten, dass Methodeneinstellungen, wie z. B. das Probenvolumen, zur Gerätekonfiguration passen.
- ▶ Aus Dropdown-Menü oder im Fenster **Hinzufügen nach Methode** Methode wählen.
- ▶ Probenbezeichnung in Sequenztabelle mit Doppelklick auf Messschritt oder im Panel **Schritt-Parameter**, Tab **Schritt** eintragen.  
Die voreingestellte Bezeichnung lautet: Methodentyp + Schrittnummer.  
Optional einen Kommentar ergänzen.
- ▶ Bei Bedarf mehrere Probenschritte mit Befehl **Mehrere Schritte hinzufügen** (im Kontextmenü) anlegen.
  - Im Fenster **Mehrere Schritte zur Sequenz hinzufügen** Methode auswählen.
  - Anzahl der Messschritte unter **Anzahl**: festlegen.
  - Für Benennung der Schritte unter **Probenname**: einen gemeinsamen Wortstamm festlegen. Die voreingestellte Bezeichnung lautet: Sample + Methodentyp.
  - Startnummer in Eingabefeld **Nummerierung ab**: eintragen, um Messschritte zu nummerieren.
  - Messschritte mit Klick auf **Erstellen** in Sequenz übernehmen.
- ▶ Bei manuell verdünnten Proben Verdünnungsverhältnis unter **Verdünnung: Vol. Originalprobe** und **Verdünnung: Vol. gesamt** eintragen: Anteile der Primärprobe in Gesamtteile.  
Die Software berücksichtigt die Verdünnung bei Berechnung der Ergebnisse.
- ▶ Bei Bedarf einen oder mehrere Messschritte in Sequenztabelle auswählen und Methodeneinstellungen im Panel **Schritt-Parameter** an Messaufgabe anpassen.  
Nach Auswahl einer Methodeneinstellung können Sie mit Klick auf die Enter-Taste von Messschritt zu Messschritt navigieren.
- ▶ Im Panel **Schritt-Parameter**, Tab **Kalibrierung** für jeden Messkanal Kalibrierung für Berechnung der Messergebnisse aus Dropdown-Menü auswählen.
- ▶ Auf Tab **Blindwerte** Blindwerte für jeden Messkanal einsehen. Bei Bedarf Blindwerte editieren.  
Die Software bereinigt die Messergebnisse automatisch um die Blindwerte. Wenn Sie die Blindwerte nicht zu Beginn der Sequenz neu bestimmen, verwendet die Software die letzten Blindwerte.
- ▶ Die Software legt Messschritte mit Probentyp **Probe** an. Messschritt auswählen und nach Klick auf Button **Probentyp** anderen Probentyp, wie z. B. **Tagesfaktor**, aus Dropdown-Menü wählen.
- ▶ Im Panel **Parameter Probentyp** optional unteren und oberen Grenzwert für das Messergebnis vorgeben. Aktionen für den Fall der Grenzüberschreitung aus Dropdown-Menü wählen, wie z. B. **Abgebrochen** für Messabbruch.
- ▶ Nach Klick auf **Ergebnistabelle** Ergebnistabelle aus Dropdown-Menü auswählen.  
Oder: Mit **Neue Ergebnistabelle erstellen** neue Ergebnistabelle anlegen.  
Wenn Sie keine Ergebnistabelle auswählen, speichert die Software die Ergebnisse in der voreingestellten Ergebnistabelle. Voreinstellung siehe: **Programm | Einstellungen | Standard-Ergebnistabelle**
- ▶  **HINWEIS!** Ohne Ergebnistabelle ist kein Messstart möglich.
- ▶ Fertige Sequenz mit Klick auf Icon  auf Plausibilität prüfen. Die Software prüft, ob die angelegten Messschritte gemessen werden können.

- ▶ Bei Bedarf Sequenz mit Icon  speichern. Im Fenster **Save as** Namen für Sequenz festlegen und mit **Ok** bestätigen. Die Software benennt das Fenster entsprechend.
- ▶ Proben bereitstellen. Für Flüssigmessungen Probenansaugkanüle in Probe tauchen. Für NPOC-Messungen zusätzlich Ausblaskanüle in Probe einführen.
- ▶ Vor Messstart: Gerätebereitschaft im Panel **Gerätestatus** prüfen.
- ▶ Messung mit Klick auf Icon  starten. Anweisungen auf Bildschirm folgen. Auch während Wiederholmessungen neben dem Gerät bleiben, um Anweisungen befolgen und quittieren zu können.
  - ✓ Das Analysensystem arbeitet die Sequenz ab. Sie können während der Messung weitere Schritte in der Sequenz ergänzen.

Die Software zeigt die aktuellen Messergebnisse während der Aufzeichnung im unteren Fensterbereich grafisch und in einer Ergebnistabelle an.


Im Panel **Schritt-Ergebnisse** können Sie Ergebnisse bereits gemessener Proben einsehen. Nach Abarbeitung der Sequenz sehen Sie Ergebnisse im Menü **Ergebnisse** ein.

#### Sehen Sie dazu auch

-  Blindwerte messen und editieren [▶ 85]
-  Tagesfaktor bestimmen [▶ 91]




## 7.6 Sequenz anlegen und mit automatischer Probenaufgabe messen

Vorüberlegungen:

- Blindwerte ändern sich mit der Zeit. Entscheiden Sie deshalb, ob Sie am Beginn der Sequenz Blindwerte neu messen.
- Bei Bedarf können Sie die Kalibrierung mit einem Tagesfaktor korrigieren. Messen Sie dafür am Beginn der Sequenz eine oder mehrere Standardlösungen zur Bestimmung des oder der Tagesfaktoren. Die Software übernimmt die Tagesfaktoren automatisch in die Kalibrierung.
- ▶ Eine oder mehrere Methoden für die Messung vorbereiten. Eine Sequenz kann Messschritte mit verschiedenen Methoden enthalten. Flüssig- und Feststoffmethoden können aber beispielsweise nicht in einer Sequenz gemessen werden.
- ▶ Proben auf Probentablett bereitstellen.
- ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
- ▶ Im Panel **Sequenzparameter** sequenzübergreifende Einstellungen vornehmen: Feststoffmessung, automatische oder intelligente Verdünnung, intelligente Reduktion des Probenvolumens und paralleles Ausblasen bei NPOC-Methoden. Dafür die entsprechende Checkbox aktivieren. Die verfügbaren Optionen hängen von der Gerätekonfiguration ab.
- ▶ Als Voreinstellung ordnet die Software eine neue Sequenz der aktiven Gerätekonfiguration zu. Bei Bedarf nach Klick auf Icon  die leere Sequenz einer anderen Gerätekonfiguration zuordnen. Dafür im Fenster **Gerätekonfiguration auswählen** eine Gerätekonfiguration auswählen. Auswahl mit Klick auf Button **Ok** bestätigen.
- ▶ Alternativ eine bereits vorbereitete Sequenz öffnen. Fenster **Sequenzen** mit Menübefehl **Sequenzen | Sequenzen öffnen**. Aus Tabelle **Übersicht über Sequenzen** vorbereitete Sequenz auswählen. Sequenz mit Doppelklick oder **Laden** öffnen.







- ▶ Mit **Hinzufügen nach Methode** Messschritte in Sequenz anlegen. Darauf achten, dass Methodeneinstellungen, wie z. B. das Probenvolumen, zur Gerätekonfiguration passen.
- ▶ Aus Dropdown-Menü oder im Fenster **Hinzufügen nach Methode** Methode wählen.
- ▶ Probenbezeichnung in Sequenztabelle mit Doppelklick auf Messschritt oder im Panel **Schritt-Parameter**, Tab **Schritt** eintragen.  
Die voreingestellte Bezeichnung lautet: Methodentyp + Schrittnummer.  
Optional einen Kommentar ergänzen.
- ▶ Bei Bedarf mehrere Probenschritte mit Befehl **Mehrere Schritte hinzufügen** (im Kontextmenü) anlegen.
  - Im Fenster **Mehrere Schritte zur Sequenz hinzufügen** Methode auswählen.
  - Anzahl der Messschritte unter **Anzahl**: festlegen.
  - Für Benennung der Schritte unter **Probenname**: einen gemeinsamen Wortstamm festlegen. Die voreingestellte Bezeichnung lautet: Sample + Methodentyp.
  - Startnummer in Eingabefeld **Nummerierung ab**: eintragen, um Messschritte zu nummerieren.
  - Messschritte mit Klick auf **Erstellen** in Sequenz übernehmen.
- ▶ Die Software legt Messschritte mit Probentyp **Probe** an. Messschritt auswählen und nach Klick auf Button **Probentyp** anderen Probentyp, wie z. B. **Tagesfaktor**, aus Dropdown-Menü wählen.
- ▶ Unter **Schritt-Parameter** | Tab **Schritt** unter **Probenposition** Position auf Probenplatte festlegen.  
Sie können in einer Sequenz Positionen auf dem Probengebertablett mehrfach belegen.
- ▶ Bei Bedarf einen oder mehrere Messschritte in Sequenztabelle auswählen und Methodeneinstellungen im Panel **Schritt-Parameter** an Messaufgabe anpassen.  
Nach Auswahl einer Methodeneinstellung können Sie mit Klick auf die Enter-Taste von Messschritt zu Messschritt navigieren.
- ▶ Bei manuell verdünnten Proben Verdünnungsverhältnis unter **Verdünnung: Vol. Originalprobe** und **Verdünnung: Vol. gesamt** eintragen: Anteile der Primärprobe in Gesamtteile.  
Die Software berücksichtigt die Verdünnung bei Berechnung der Ergebnisse.
- ▶ Im Panel **Schritt-Parameter**, Tab **Kalibrierung** für jeden Messkanal Kalibrierung für Berechnung der Messergebnisse aus Dropdown-Menü auswählen.
- ▶ Auf Tab **Blindwerte** Blindwerte für jeden Messkanal einsehen. Bei Bedarf Blindwerte editieren.  
Die Software bereinigt die Messergebnisse automatisch um die Blindwerte. Wenn Sie die Blindwerte nicht zu Beginn der Sequenz neu bestimmen, verwendet die Software die letzten Blindwerte.
- ▶ Im Panel **Parameter Probentyp** optional unteren und oberen Grenzwert für das Messergebnis vorgeben. Aktionen für den Fall der Grenzüberschreitung aus Dropdown-Menü wählen, wie z. B. **Abgebrochen** für Messabbruch.
- ▶ Mit Klick auf Button **Kontrollschritte** Kontrollschritte wie Pausen oder zusätzliche Spülschritte in Sequenz ergänzen.
- ▶ Kontrollschritte **Rückspülung**, **Standby** oder **Gerät ausschalten** am Ende der Sequenz ergänzen, um Analysensystem nach Abarbeitung der Sequenz herunterzufahren.

- ▶ Nach Klick auf **Ergebnistabelle** Ergebnistabelle aus Dropdown-Menü auswählen. Oder: Mit **Neue Ergebnistabelle erstellen** neue Ergebnistabelle anlegen. Wenn Sie keine Ergebnistabelle auswählen, speichert die Software die Ergebnisse in der voreingestellten Ergebnistabelle. Voreinstellung siehe: **Programm | Einstellungen | Standard-Ergebnistabelle**
- ▶ **i** HINWEIS! Ohne Ergebnistabelle ist kein Messstart möglich.
- ▶ Fertige Sequenz mit Klick auf Icon  auf Plausibilität prüfen. Die Software prüft, ob die angelegten Messschritte gemessen werden können.
- ▶ Bei Bedarf Sequenz mit Icon  speichern. Im Fenster **Save as** Namen für Sequenz festlegen und mit **Ok** bestätigen. Die Software benennt das Fenster entsprechend.
- ▶ Vor Messstart: Gerätebereitschaft im Panel **Gerätstatus** prüfen.
- ▶ Messung mit Klick auf Icon  starten.
  - ✓ Das Analysensystem arbeitet die Sequenz ab. Sie können während der Messung weitere Mess- oder Kontrollschritte in der Sequenz ergänzen.

Die Software zeigt die aktuellen Messergebnisse während der Aufzeichnung im unteren Fensterbereich grafisch und in einer Ergebnistabelle an.

Im Panel **Schritt-Ergebnisse** können Sie Ergebnisse bereits gemessener Proben einsehen. Nach Abarbeitung der Sequenz sehen Sie Ergebnisse im Menü **Ergebnisse** ein.

#### Sehen Sie dazu auch

-  Blindwerte messen und editieren [▶ 85]
-  Tagesfaktor bestimmen [▶ 91]
-  Probenvolumen intelligent reduzieren [▶ 98]
-  Proben automatisch oder intelligent verdünnen [▶ 93]

## 7.7 Probendaten importieren und exportieren

Im Fenster **Sequenzen** können Sie Sequenzen im XML-Format importieren und exportieren.

#### Sequenz importieren

- ▶ Fenster **Sequenzen** mit Menübefehl **Sequenzen | Sequenzen** öffnen.
- ▶ Auf Button **Import** klicken
- ▶ Im Fenster **Öffnen** in der Windows-Dateiverwaltung eine Sequenz auswählen.
- ▶ Auf **Öffnen** klicken.
  - ✓ Die Software importiert die Sequenz. Wenn bereits eine Sequenz mit demselben Namen existiert, fordert Sie die Software auf, einen neuen Namen zu vergeben.

#### Sequenz exportieren

- ▶ Fenster **Sequenzen** mit Menübefehl **Sequenzen | Sequenzen** öffnen.
- ▶ Sequenz aus Übersicht **Übersicht über Sequenzen** auswählen.
- ▶ Auf **Export** klicken.
- ▶ Speicherort im Fenster **Speichern unter** auswählen. Voreingestellter Exportordner: *C:/ProgramData/Analytik-Jena/multiWinPro/export/sequences.*
- ▶ Dateiname bei Bedarf anpassen und auf **Speichern** klicken.
  - ✓ Die Software exportiert die Sequenz.

Die exportierte Sequenz enthält Probanddaten. Wenn Sie die Sequenz bereits gemessen haben, sind die Messergebnisse nur in der Ergebnistabelle, nicht aber in der Sequenz gespeichert.

Sie können alternativ Sequenzen im Fenster **Neue Sequenz** importieren oder exportieren. Nutzen Sie dafür die Befehle **Sequenz importieren** und **Diese Sequenz exportieren** im Kontextmenü der Sequenztabelle. Hier können Sie auch Sequenzen im CSV-Format importieren.

Sequenz im CSV-Format importieren

- ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
- ▶ Mit einem Rechtsklick in die Sequenztabelle das Kontextmenü öffnen.
- ▶ Menübefehl **Sequenz importieren | Aus Datei importieren** wählen.
- ▶ Im Fenster **Öffnen** Dateityp **CSV-File** auswählen.
- ▶ CSV-Datei im Windows-Dateiverwaltung auswählen.
- ▶ CSV-Datei mit Klick auf Button **Öffnen** importieren.
  - ✓ Die Software importiert die CSV-Datei in das Fenster **Neue Sequenz zufügen**. Sie können Sie Sequenztabelle jetzt erweitern und die Messung starten.

Voraussetzungen für einen erfolgreichen CSV-Import:

- Die Bezeichnung und Reihenfolge der Datenfelder in der CSV-Datei muss mit den Datenfeldern übereinstimmen, die Sie unter **Software-Einstellungen**, Tab **Speicherung, Export und Report** festgelegt haben.
- Das Datenfeld **Methodenname** muss in der CSV-Datei mit der Bezeichnung einer bereits in der Software angelegten Methode befüllt sein.

Sequenz aus der Zwischenablage importieren

- ▶ Sequenz als Excel-Tabelle erstellen.
- ▶ Tabelle kopieren.
- ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
- ▶ Mit einem Rechtsklick in die Sequenztabelle das Kontextmenü öffnen.
- ▶ Menübefehl **Sequenz importieren | Importieren aus der Zwischenablage** wählen.
  - ✓ Die Software importiert die Sequenz aus der Zwischenablage.

## 7.8 Methodeneinstellungen in der Sequenz anpassen

Im Fenster **Neue Sequenz** können Sie im Panel **Schritteigenschaften** für jeden Messschritt ausgewählte Methodeneinstellungen einsehen und bearbeiten. Wählen Sie dafür einen oder mehrerer Messschritte in der Sequenztabelle aus.

Wenn Sie mehrere Messschritte in der Sequenztabelle markieren, können Sie die Methodeneinstellungen für mehrere Messschritte ändern. Die Software hebt unterschiedliche Methodeneinstellungen farbig hervor.

Das optionale FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul schränkt die Bearbeitung freigegebener Methoden stark ein. Sie können nur wenige Methodeneinstellungen wie das Probenvolumen in der Sequenz anpassen.

### Tab Schritt

Parameter	Beschreibung
Ist aktiv	Messschritt aktivieren oder deaktivieren.
Name	Probenbezeichnung
Kommentar	Kommentar

---

<b>Parameter</b>	<b>Beschreibung</b>
<b>Probenposition</b>	Position auf Probenblett
<b>Manuelle Messung</b>	Über Checkbox manuelle Probenaufgabe aktivieren

Parameter	Beschreibung
Min. Replikate Max. Replikate	Minimale und maximale Anzahl der Wiederholmessungen aus demselben Probengefäß festlegen  Wenn Sie für minimale und maximale Anzahl unterschiedliche Werte eingegeben, selektiert die Software automatisch Ausreißer gemäß den unter relativer bzw. absoluter Standardabweichung vorgegebenen Kriterien.
Probenvolumen	Probenvolumen für Messung flüssiger Proben wählen
Spülvolumen	Spülvolumen für Spülen des Probenwegs mit Probe wählen
Verdünnung: Vol. Originalprobe Verdünnung: Vol. gesamt	Verdünnungsverhältnis eingeben  Angabe des Verdünnungsverhältnisses: <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Anteile der Primärprobe (<b>Verdünnung: Vol. Originalprobe</b>) in Gesamtanteilen (<b>Verdünnung: Vol. gesamt</b>) (z. B. 1 in 10 heißt 1 ml Primärprobe in 10 ml Gesamtvolumen)</li> <li>■ Eine Verdünnung 1 in 1 bedeutet, dass die Probe unverdünnt vorliegt.</li> </ul>
Rel. Standardabweichung Standardabweichung	Relative oder absolute Standardabweichung als Abbruchkriterien für Wiederholmessungen vorgeben <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Wenn die vorgegebene Standardabweichung nach der minimalen Anzahl der Bestimmungen unterschritten wird, führt der Analysator keine weiteren Bestimmungen durch.</li> <li>■ Wenn der vorgegebene Wert überschritten wird, führt der Analysator weitere Messungen aus demselben Probengefäß durch, bis die maximalen Anzahl der Bestimmungen erreicht ist.</li> </ul> <p>Sie können die Kriterien für jeden Messkanal getrennt festlegen.</p>
Automatisches Ansäuern	Proben über Probengeber automatisch ansäuern (nur für NPOC-Methoden)  Wenn aktiviert, entnimmt der Probengeber Säure aus dem Säuregefäß auf dem Probengeber und säuert die Proben an (nicht für alle Probengeber).
Ausblaszeit 1 Ausblaszeit 2	Festlegen, wie lange Proben vor der ersten NPOC-Bestimmung ausgeblasen werden  Die zweite Ausblaszeit liegt zwischen Wiederholmessungen und kann nur im manuellen Betrieb oder bei nichtparallelem Ausblasen mit Probengeber umgesetzt werden.
Reagenz verwenden	Über Checkbox festlegen, dass Natriumperoxodisulfat in den UV-Reaktor dosiert wird (nur für Analysatoren mit UV-Oxidation)  Option aktivieren, wenn TOC-Konzentration >1 mg/l ist
CSB-Berechnung aktiv	Für TOC- und NPOC-Methoden Berechnung des CSB (COD, Chemical Oxygen Demand) auf Grundlage des TOC/NPOC aktivieren  Formel: $c(\text{CSB}) = A \times c(\text{TOC}) + B$
CSB-Umrechnungsfaktor A CSB-Offset B	Anstieg (A) und Achsenabschnitt (B) für die Berechnung des CSB festlegen, Voreinstellung: A = 3,000, B = 0,000

Parameter	Beschreibung
<b>BOD<sub>5</sub>-Berechnung aktiv</b>	Für TOC- und NPOC-Methoden Berechnung des BSB <sub>5</sub> (BOD <sub>5</sub> , Biochemical Oxygen Demand) auf Grundlage des TOC/NPOC aktivieren  Formel: $c(\text{BSB}_5) = A \times c(\text{TOC}) + B$
<b>BOD<sub>5</sub> Umrechnungsfaktor C</b> <b>BOD<sub>5</sub> Offset D</b>	Anstieg (A) und Achsenabschnitt (B) für die Berechnung des BSB <sub>5</sub> festlegen, Voreinstellung: A = 3,000, B = 0,000
<b>CO<sub>2</sub>-Berechnung aktiv</b>	Für TIC-Methoden für Flüssigproben Berechnung der Kohlenstoffdioxidkonzentration auf Grundlage des TIC aktivieren  Formel: $c(\text{CO}_2) = 2,833 \times c(\text{TIC})$
<b>Umrechnung in Gesamtprotein aktiv</b>	Für TN-Methoden Berechnung des Gesamtproteingehalts auf Grundlage des TN aktivieren  Formel: $c(\text{Total Protein}) = A \times c(\text{TN})$
<b>Gesamtprotein Umrechnungsfaktor A</b>	Faktor für die Berechnung des Gesamtproteingehalts zwischen 0 und 10 festlegen, Voreinstellung: A = 6,250 (Vergleichssubstanz: BSA – Rinderserumalbumin)

### Tab Replikate

Parameter	Beschreibung
<b>Spülvorgänge</b>	Anzahl der Spülzyklen vor der Probenaufgabe festlegen  Der Probengeber spült den Probenweg vor jeder Wiederholmessung x-mal mit Probe.
<b>Ausblasen</b>	Für NPOC-Messungen Ausblasen der Probe vor einer Wiederholmessung aktivieren oder deaktivieren  Ein zusätzliches zweites Ausblasen der Probe ist nur im manuellen Betrieb oder bei nichtparallelem Ausblasen mit Probengeber möglich.
<b>Probenmenge</b>	Probenmasse für Feststoffmessungen festlegen, geeignet für Feststoffmessungen mit stets der gleichen Probenmasse wie bei der Adsorption von Luftschadstoffen an Aktivkohle
<b>Probenposition</b>	Probenpositionen für die Wiederholmessungen von Feststoffen festlegen

### Tab Kalibrierung

Auf Tab **Kalibrierung** wählen Sie für jeden Messkanal die Kalibrierung für die Berechnung der Messergebnisse aus dem entsprechenden Dropdown-Menü aus. Die Software zeigt die Kalibrierparameter unter dem Dropdown-Menü.



### Tab Blindwerte

Tab **Blindwerte** zeigt für jeden Messkanal die in der Software hinterlegten Blindwerte an. Wenn Sie über das entsprechende Recht verfügen, können Sie Blindwerte manuell editieren.

Wenn Sie die Messung eines Blindwerts in der Sequenz anlegen, berücksichtigt die Software den neuen Blindwert automatisch bei der Berechnung aller folgenden Messergebnisse.

## 7.9 Gespeicherte Sequenz bearbeiten

Sie können gespeicherte Sequenzen zu einem späteren Zeitpunkt laden und die Messung starten. Sie können gespeicherte Sequenzen bearbeiten oder als Vorlage für neue Sequenzen verwenden.

- ▶ Fenster **Sequenzen** mit Menübefehl **Sequenzen | Sequenzen** öffnen.
- ▶ Sequenz aus Übersicht **Übersicht über Sequenzen** auswählen.
- ▶ Sequenzeinstellungen in Detailansicht **Details zur Sequenz** prüfen.
- ▶ Ausgewählte Sequenz mit Doppelklick oder Klick auf Button **Laden** laden.
- ▶ Messschritte der Sequenz einsehen und editieren.
- ▶ Bei Bedarf editierte Sequenz mit Klick auf Icon  unter demselben Namen speichern oder nach Klick auf Icon  unter einem neuen Namen speichern.
- ▶ Wenn Sie die gespeicherte Sequenz als Vorlage für eine neue Sequenz verwendet haben, neue Sequenz unter neuem Namen speichern.
  - ✓ Sie haben eine gespeicherte Sequenz bearbeitet oder als Vorlage für eine neue Sequenz verwendet.

## 7.10 NPOC-Messung durchführen



Bei der NPOC-Analyse bestimmen Sie den gesamten nicht ausblasbaren organischen Kohlenstoff. Nach Ansäuern der Probe blasen Sie das gebildete Kohlenstoffdioxid manuell oder auf dem Probengeber aus. Anschließend bestimmt der Analysator den in der Probe verbliebenen Kohlenstoff.

Analysatoren mit Fließinjektionstechnik können eine Probe ansaugen und parallel dazu eine zweite Probe auf dem Probengeber ausblasen. Einige Probengeber können Proben automatisch ansäuern. Dadurch erreicht das Verfahren einen hohen Automatisierungsgrad.

- ▶ NPOC-Ausblasfluss einstellen.  
Der Ausblasfluss ist voreingestellt, kann aber an Messaufgabe angepasst werden.
  - Ausblasfluss über Menübefehl **Gerät | Manuelle Einzelansteuerung | Ausblasen** aktivieren.  
Gasfluss am Nadelventil „NPOC“ einstellen.
- ▶ NPOC-Methode vorbereiten.
- ▶ In Methodeneinstellungen bei **Ausblaszeit 1** Ausblaszeit festlegen.
- ▶ Im manuellen Betrieb oder bei nichtparallelem Ausblasen auf Probengeber können Sie Proben zwischen den Mehrfachbestimmungen erneut ausblasen.
  - Dafür zweite Ausblaszeit unter **Ausblaszeit 2** festlegen.
  - Auf Tab **Replikate** Wiederholmessungen auswählen, vor denen Proben erneut ausgeblasen werden sollen. Dafür Checkbox unter **Ausblasen** aktivieren.
- ▶ Für effizientes Ausblasen Proben auf Probengeber rühren. Dafür bei **Rührgeschwindigkeit** Rührintensität festlegen.
- ▶ Bei Bedarf Checkbox **TIC-Kontrolle** aktivieren. Dann prüft die Software mit TIC-Messung, ob TIC vollständig ausgeblasen wurde. Der ermittelte Wert hat nur Kontrollcharakter und wird im Messergebnis nicht berücksichtigt.

- ▶ Für automatisches Ansäuern der Proben in Methodeneinstellungen Checkbox **Automatisches Ansäuern** aktivieren.
  - AS 60: Säuregefäß in Säureposition stellen.
  - AS vario: Säuregefäß auf Säureposition des Probentabletts stellen:  
Die Säureposition ist in der Sequenz bei NPOC-Methoden gesperrt und kann nicht mit Proben belegt werden.  
Tipp: Bei unbekannter Säureposition mit Menübefehl **Gerät | Justierung Auto-sampler | Säureposition**: Säureposition auf Probentablett anfahren.

Probentablett	Säureposition
47 (dilut)	28
52	42
72	55
100	85
146	131

- EPA-Sampler: Säuregefäß auf Säureposition 54 des Probentabletts stellen.
- ▶ Alternativ Proben außerhalb des Probengebers auf pH <2 ansäuern.
- ▶ Proben auf Probentablett bereitstellen.
- ▶ Für manuelle Probenaufgabe Proben- und Ausblaskanüle in angesäuerte Probe tauchen.
- ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
- ▶ Für paralleles Ausblasen der Proben im Panel **Sequenzparameter** Option **Paralleles Ausblasen** wählen.
- ▶ Mit Button **Hinzufügen nach Methode** Messschritte mit NPOC-Methode in Sequenz anlegen.
- ▶ Um nach NPOC-Messungen weitere Nicht-NPOC-Messungen durchzuführen, zwischen den Messungen eine Position auf dem Probentablett freilassen.
  - Die Software gibt eine entsprechende Meldung aus. Wenn die Proben auf dem Probentablett richtig positioniert sind, Meldung mit **Ok** quittieren. Die Software setzt die Messung fort.
  - Sonst Meldung mit **Abgebrochen** quittieren. Proben richtig positionieren. Sequenz mit Klick auf Icon ▶ fortsetzen.
- ▶ Nach Klick auf **Ergebnistabelle** Ergebnistabelle aus Dropdown-Menü auswählen. Oder: Mit **Neue Ergebnistabelle erstellen** neue Ergebnistabelle anlegen. Wenn Sie keine Ergebnistabelle auswählen, speichert die Software die Ergebnisse in der voreingestellten Ergebnistabelle. Voreinstellung siehe: **Programm | Einstellungen | Standard-Ergebnistabelle**
- ▶ **i** HINWEIS! Ohne Ergebnistabelle ist kein Messstart möglich.
- ▶ Fertige Sequenz mit Klick auf Icon  auf Plausibilität prüfen. Die Software prüft, ob die angelegten Messschritte gemessen werden können.
- ▶ Bei Bedarf Sequenz mit Icon  speichern. Im Fenster **Save as** Namen für Sequenz festlegen und mit **Ok** bestätigen. Die Software benennt das Fenster entsprechend.
- ▶ Statt eine neue Sequenz anzulegen, ist es auch möglich eine gespeicherte Sequenz zu verwenden. Gespeicherte Sequenz im Fenster **Sequenzen** auswählen und durch Doppelklick laden. Für paralleles Ausblasen der Proben im Panel **Sequenzparameter** Option **Paralleles Ausblasen** wählen.
- ▶ Messung mit Klick auf Icon ▶ starten.



- ✓ Das Analysensystem arbeitet die Sequenz ab. Sie können während der Messung weitere Mess- oder Kontrollschritte in der Sequenz ergänzen.

### NPOC-Analyse nach der Methode NPOC plus

Diese Methode wurde speziell für die Bestimmung niedriger TOC-Gehalte in Proben mit hohen TIC-Gehalten oder einem hohen Anteil an gelöstem CO<sub>2</sub> entwickelt. Allgemein wird für die Analyse solcher Proben die NPOC-Analyse empfohlen. Bei hohen und vor allem unbekanntem TIC-Gehalten sind jedoch mitunter sehr lange Zeiten ( $t > 10$  min) zum vollständigen Ausblasen des CO<sub>2</sub> erforderlich. Deshalb wird der anorganisch gebundene Kohlenstoff bei dieser Methode extern ausgeblasen.

Vom Ablauf gesehen ist die Methode NPOC plus eine Kombination aus NPOC- und Differenzmethode.

- Säuern Sie die Probe außerhalb des Analysators an ( $\text{pH} < 2$ ).
- Blasen Sie unmittelbar vor der Analyse den größten Teil des gebildeten Kohlendioxids extern aus.
- Bereiten Sie eine NPOC plus-Methode vor und analysieren die Proben.
- Der Analysator bestimmt den TC und TIC-Gehalt der vorbereiteten Proben und ermittelt aus der Differenz den NPOC-Gehalt.

Da Sie den größten Teil des anorganisch gebundenen Kohlenstoffs extern ausgeblasen haben, ist der mit dieser Methode ermittelte TIC-Wert nur eine Rechengröße und hat keine analytische Relevanz.

Leichtflüchtige organische Substanzen werden bei der Probenvorbereitung ebenfalls ausgetrieben und deshalb nicht mitbestimmt.

Die Gerätemodelle multi N/C 3300 und multi N/C 3100 können Proben automatisch und intelligent verdünnen.

**i** HINWEIS! Automatisches Ansäuern im NPOC-Modus und automatisches bzw. intelligentes Verdünnen sind in den meisten Fällen nicht gleichzeitig möglich.

## 7.11 Blindwerte messen und editieren




Sie legen die Bestimmung von Blindwerten in der Sequenz fest. Die Software übernimmt die Messergebnisse automatisch für alle folgenden Messungen, bis Sie neue Blindwerte bestimmen.

### Blindwerte messen

- ▶ Blindwertproben bereitstellen.
- ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
- ▶ Mit **Hinzufügen nach Methode** Messschritte in Sequenz anlegen. Darauf achten, dass Methodeneinstellungen, wie z. B. das Probenvolumen, zur Gerätekonfiguration passen.
- ▶ Aus Dropdown-Menü oder im Fenster **Hinzufügen nach Methode** Methode wählen. Für die Messung eines Blindwertes benötigt die Software eine passende Methode. Die Software speichert Blindwerte jedoch unabhängig von Methoden für den entsprechenden Messkanal (TC, IC, NPOC, TN).
- ▶ Nach Klick auf **Probentyp** Probentyp aus Dropdown-Menü auswählen:
  - **Ansatzwasserblindwert (PB)**: Blindwert des Ansatzwassers für Standards (QC Standards, Tagesfaktoren, Kalibrierungen)
  - **H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> Reagenzienblindwert (RB)** und **Na<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>8</sub> Reagenzienblindwert (RB)**: Blindwerte für Reagenzien Phosphorsäure und Natriumperoxodisulfatlösung (Na<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>8</sub>). Der Ablauf ist in der Software festgelegt: Die Reagenzien für die Blind-



wertbestimmung werden aus den Reagenzienflaschen entnommen.

**i** HINWEIS! Reagenzienblindwerte können nicht mit Differenzmethoden gemessen werden.

- **Verdünnungsblindwert (DB)**: Blindwert für Verdünnungsmittel Wasser. Auf dem Proben-Tablett für die Blindwertbestimmung ein Probenglas mit Reinstwasser bereitstellen.
- **Eluatblindwert (EB)**: Blindwert des Wassers, das Sie zum Eluieren von Swabs verwenden
- **Schiffchenblindwert (BB)**: Blindwert der Schiffchen, mit denen Sie feste Proben in den Analysator einbringen
- ▶ Im Panel **Parameter Probenotyp** Grenzwerte für Blindwert festlegen.
- ▶ Aktion für den Fall der Grenzüberschreitung aus Dropdown-Menü bei **Aktion**: auswählen, z. B. **Abgebrochen** für Abbruch der Sequenz.
- ▶ Nach Klick auf **Ergebnistabelle** Ergebnistabelle aus Dropdown-Menü auswählen. Oder: Mit **Neue Ergebnistabelle erstellen** neue Ergebnistabelle anlegen. Wenn Sie keine Ergebnistabelle auswählen, speichert die Software die Ergebnisse in der voreingestellten Ergebnistabelle. Voreinstellung siehe: **Programm | Einstellungen | Standard-Ergebnistabelle**
- i** HINWEIS! Ohne Ergebnistabelle ist kein Messstart möglich.
- ▶ Fertige Sequenz mit Klick auf Icon  auf Plausibilität prüfen. Die Software prüft, ob die angelegten Messschritte gemessen werden können.
- ▶ Bei Bedarf Sequenz mit Icon  speichern. Im Fenster **Save as** Namen für Sequenz festlegen und mit **Ok** bestätigen. Die Software benennt das Fenster entsprechend.
- ▶ Messung mit Klick auf Icon  starten.
  - ✓ Das Analysensystem arbeitet die Sequenz ab. Sie können während der Messung weitere Mess- oder Kontrollschritte in der Sequenz ergänzen.

Blindwerte einsehen und editieren

Die Software speichert Blindwerte unabhängig von der Methode. Sie können die in der Software gespeicherten Blindwerte in der Sequenz einsehen. Wenn Sie über das entsprechende Recht verfügen, können Sie die Blindwerte in der Sequenz editieren. Die Änderungen gelten nur für die Sequenz.


- ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
- ▶ Mit **Hinzufügen nach Methode** Messschritte in Sequenz anlegen. Darauf achten, dass Methodeneinstellungen, wie z. B. das Probenvolumen, zur Gerätekonfiguration passen.
- ▶ Aus Dropdown-Menü oder im Fenster **Hinzufügen nach Methode** Methode wählen.
- ▶ Einen oder mehrere Messschritte aus Sequenztabelle auswählen.
- ▶ Gespeicherte Blindwerte im Panel **Schritt-Parameter**, Tab **Blindwerte** für jeden Messkanal einsehen.
- ▶ Blindwerte bei Bedarf manuell editieren. Die Änderungen gelten für die vorliegende Sequenz.
- ▶ Bei Bedarf Sequenz mit Icon  speichern. Im Fenster **Save as** Namen für Sequenz festlegen und mit **Ok** bestätigen. Die Software benennt das Fenster entsprechend.
- ▶ Messung mit Klick auf Icon  starten.
  - ✓ Das Analysensystem arbeitet die Sequenz ab. Sie können während der Messung weitere Mess- oder Kontrollschritte in der Sequenz ergänzen.

Die Software berücksichtigt die Blindwerte bei der Ergebnisberechnung.





Blindwerte in der Gerätekonfiguration einsehen und bearbeiten

Alternativ können Sie die für die Berechnung verwendeten Blindwerte auch in den Messergebnissen einsehen und dort editieren.

Die Software speichert Blindwerte unabhängig von der Methode. Sie können die in der Software gespeicherten Blindwerte im Fenster **Geräte verwalten** einsehen. Wenn Sie über das entsprechende Recht verfügen, können Sie die Blindwerte in der Gerätekonfiguration editieren. Die Änderungen gelten softwareübergreifend.


- ▶ Mit Menübefehl **Gerät | Geräte verwalten** Fenster **Geräte verwalten** aufrufen.
- ▶ Gerätekonfiguration in der Tabelle **Geräteübersicht** auswählen.
- ▶ Kontextmenü mit Rechtsklick öffnen und Befehl **Blindwerte** wählen.
- ▶ Blindwerte im Fenster **Blindwerte** auf den unterschiedlichen Tabs einsehen.
- ▶ Bei Bedarf Blindwerte nach Klick auf Icon  editieren.
- ▶ Änderungen mit Klick auf Button **Ok** bestätigen.
  - ✓ Die geänderten Blindwerte gelten softwareübergreifend.



#### Sehen Sie dazu auch


-  Reagenzienblindwert [▶ 64]
-  Verdünnungsblindwert [▶ 64]
-  Eluatblindwert [▶ 65]
-  Schiffchenblindwert [▶ 66]

## 7.12 Kalibrierung durchführen

Damit die Software Messergebnisse berechnen kann, müssen Sie mit der vorbereiteten Methode für jeden Messkanal eine Kalibrierung durchführen.

- ▶ Im Fenster **Methoden** Methode vorbereiten.
- ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
- ▶ Mit Klick auf Icon  Wizard **Kalibrierungs-Assistent** öffnen.
- ▶ Im Wizard **Kalibrierungs-Assistent** mit Klick auf **Methode wählen** Fenster **Methode auswählen** öffnen. Vorbereitete Methode aus Tabelle **Übersicht** wählen. Auswahl mit **Ok** bestätigen.
- ▶ Unter **Kalibrierung** Namen für Kalibrierung festlegen. Die voreingestellte Bezeichnung lautet: Methodentyp\_Cal.
- ▶ Optional: Nach Klick auf **Kommentar** Kommentar eintragen. Kommentar mit **Übernehmen** bestätigen.
- ▶ Kalibrierart auswählen. Vorzugsweise Mehrpunktkalibrierungen mit konstantem Probenvolumen und variablen Standard-Konzentrationen durchführen. Dafür Option **Festes Volumen** wählen.
- ▶ Bei einer Kalibrierung mit konstantem Volumen: Die Software übernimmt automatisch das in der Methode eingestellte Probenvolumen. Volumen nur ändern, wenn das Standard-Volumen von dem in der Methode eingestellten Volumen abweichen soll.
- ▶ Für eine Kalibrierung mit konstanter Konzentration Option **Feste Konzentration** wählen. Die Konzentration des Standards in die Tabelle eintragen.
- ▶ Bei **Ansatzwasser-Blindwert**: auswählen, wie der Ansatzwasserblindwert ermittelt werden soll.

- Bei Auswahl **Werte messen** misst die Software unmittelbar vor der Kalibrierung den Gehalt des Ansatzwassers. Dafür auf Probengeber Gefäß mit Ansatzwasser bereitstellen. Bei manueller Probenaufgabe fordert Sie die Software auf, Ansatzwasser bereitzustellen.
- Bei Auswahl **Werte festlegen** Gehalt des Ansatzwassers separat bestimmen und für jeden Parameter in (FE/ml) in Eingabefelder eintragen.
- Wenn die Software den Ansatzwasserblindwert nicht berücksichtigen soll, Wert „0“ in Eingabefeld eintragen.
- ▶ Unter **Kalibrierpunkte**: Anzahl der Kalibrierpunkte festlegen. Sie können maximal 50 Kalibrierpunkte in einer Kalibrierung anlegen.
- ▶ Kalibriertabelle ausfüllen.
  - Die Software legt die Bezeichnung für die Kalibrierpunkte fest. Bei Bedarf Bezeichnung später im Fenster **Neue Sequenz zufügen** anpassen.
  - Bei **Replikate** trägt die Software die in der Methode eingestellte maximale Anzahl an Wiederholmessungen ein. Bei Bedarf Anzahl ändern.
  - Bei Kalibrierung mit konstantem Volumen: Konzentration der vorbereiteten Standards für jeden Messkanal (TC, TN, etc.) in Eingabefelder eintragen.
  - Bei Kalibrierung mit konstanter Konzentration: Volumina der Standards für jeden Messkanal in Eingabefelder eintragen.
- ▶ Für jeden Messkanal über Checkboxes in Spalte **Splitpunkte** Trennpunkte aktivieren. Damit können Sie mehrere Kalibrierbereiche festlegen.
- ▶ Bei Bedarf für jeden Messkanal und Kalibrierbereich minimales Bestimmtheitsmaß  $R^2$  und Regressionstyp festlegen.
- ▶ Aus Dropdown-Menü Aktion für Fall auswählen, dass Kalibrierung Bestimmtheitsmaß nicht erreicht, wie z. B. **Abgebrochen** für Abbruch der Kalibrierung.
- ▶ Vorbereitete Kalibrierung mit **Übernehmen** in Sequenz übernehmen.
  - ✓ Die Software übernimmt die Kalibrierschritte in die Sequenz. Für die Prüfung des Bestimmtheitsmaßes legt die Software in der Sequenz einen Schritt „QS...“ (Qualitätssicherung) fest. Hier findet keine Messung statt.
- ▶ Die Software schlägt für Kalibrierschritte automatisch die ersten freien Plätze auf Probentablett vor. Bei Bedarf Schritt auswählen und unter **Schritt-Parameter | Schritt | Probenposition** Position ändern.
- ▶ Methodeneinstellungen unter **Schritt-Parameter** einsehen und bei Bedarf anpassen.
- ▶ Bei Bedarf weitere Messschritte in Sequenz ergänzen. Sie können neben der Kalibrierung weitere Messungen in derselben Sequenz durchführen.
- ▶ Für die Berechnung der Messergebnisse die erstellte Kalibrierung im Panel **Schritt-Parameter**, Tab **Kalibrierung** aus Dropdown-Menü auswählen.
- ▶ Nach Klick auf **Ergebnistabelle** Ergebnistabelle aus Dropdown-Menü auswählen. Oder: Mit **Neue Ergebnistabelle erstellen** neue Ergebnistabelle anlegen. Wenn Sie keine Ergebnistabelle auswählen, speichert die Software die Ergebnisse in der voreingestellten Ergebnistabelle. Voreinstellung siehe: **Programm | Einstellungen | Standard-Ergebnistabelle**
- ▶ **i** HINWEIS! Ohne Ergebnistabelle ist kein Messstart möglich.
- ▶ Fertige Sequenz mit Klick auf Icon  auf Plausibilität prüfen. Die Software prüft, ob die angelegten Messschritte gemessen werden können.
- ▶ Bei Bedarf Sequenz mit Icon  speichern. Im Fenster **Save as** Namen für Sequenz festlegen und mit **Ok** bestätigen. Die Software benennt das Fenster entsprechend.




- ▶ Sequenz mit Icon  starten.
  - ✓ Das Analysensystem arbeitet die Sequenz ab.

Die Software zeigt die aktuellen Messergebnisse während der Aufzeichnung im unteren Fensterbereich grafisch und in einer Ergebnistabelle an.


Im Panel **Schritt-Ergebnisse** können Sie Ergebnisse bereits gemessener Proben einsehen. Nach Abarbeitung der Sequenz sehen Sie Ergebnisse im Menü **Ergebnisse** ein.




Im Fenster **Kalibrierungen** können Sie Kalibrierungen einsehen und bearbeiten.

#### Sehen Sie dazu auch

-  Kalibrierung [▶ 62]
-  Ansatzwasserblindwert [▶ 63]
-  Menü Kalibrierung [▶ 100]

## 7.13 Feststoffkalibrierung durchführen

- ▶ Im Fenster **Geräte verwalten** Gerätekonfiguration für Feststoffmessung vorbereiten.
  - Im Bereich **Gerätekonfiguration** für manuelle oder automatisierte Feststoffmessungen mit externem Feststoffmodul aus Dropdown-Menü bei **Ofentyp**: Option **extern** wählen.
  - Für Arbeit mit internem Feststoffmodul Option **intern horizontal** wählen.
  - Für automatisierte Feststoffanalyse Probengeber FPG 48 bei **Autosampler-Typ**: wählen.
  - Gerätekonfiguration mit Button  speichern und mit Klick auf Button **Default setzen** aktivieren.
- ▶ TC-Methode für die Feststoffmessung vorbereiten.
  - In Methodeneinstellungen auf Tab **Grundeinstellungen** Checkbox **Diese Methode ist für Feststoffmessungen.** aktivieren.
  - Für manuelle Probenaufgabe: In den Methodenparametern Checkbox **Manuelle Messung** aktivieren.
  - Ofentemperatur gemäß den Vorgaben in der Bedienungsanleitung des Analysators einstellen.
  - Für automatische Probenaufgabe: Methodenparameter **Wartezeit Ofen**, **Wartezeit** und **Zufuhrgeschwindigkeit Ofen** festlegen.
- ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
- ▶ In Panel **Sequenzparameter** Checkbox **Feststoffmessung** aktivieren.
- ▶ Mit Klick auf Icon  Wizard **Kalibrierungs-Assistent** öffnen.
- ▶ Im Wizard **Kalibrierungs-Assistent** mit Klick auf **Methode wählen** Fenster **Methode auswählen** öffnen. Vorbereitete Methode aus Tabelle **Übersicht** wählen. Auswahl mit **Ok** bestätigen.
- ▶ Option **Feste Konzentration** aktivieren.
- ▶ Kohlenstoffgehalt des Feststoffstandards in mg/kg in den Wizard eintragen.
- ▶ Schiffchenblindwert am Beginn der Kalibriersequenz messen oder separat bestimmen und in Wizard eintragen.
- ▶ Unter **Kalibrierpunkte**: Anzahl der Kalibrierpunkte festlegen.

- ▶ Unterschiedliche Massen des Feststoffstandards in Schiffchen einwiegen.
- ▶ Kalibriertabelle ausfüllen. Dafür Einwaagen in ( $\mu\text{g}$ ) in Tabelle eintragen.
- ▶ Vorbereitete Kalibrierung mit **Übernehmen** in Sequenz übernehmen.
- ▶ Nach Klick auf **Ergebnistabelle** Ergebnistabelle aus Dropdown-Menü auswählen. Oder: Mit **Neue Ergebnistabelle erstellen** neue Ergebnistabelle anlegen. Wenn Sie keine Ergebnistabelle auswählen, speichert die Software die Ergebnisse in der voreingestellten Ergebnistabelle. Voreinstellung siehe: **Programm | Einstellungen | Standard-Ergebnistabelle**
- ▶ **i** HINWEIS! Ohne Ergebnistabelle ist kein Messstart möglich.
- ▶ Fertige Sequenz mit Klick auf Icon  auf Plausibilität prüfen. Die Software prüft, ob die angelegten Messschritte gemessen werden können.
- ▶ Bei Bedarf Sequenz mit Icon  speichern. Im Fenster **Save as** Namen für Sequenz festlegen und mit **Ok** bestätigen. Die Software benennt das Fenster entsprechend.
- ▶ Messung mit Klick auf Icon  starten.
  - ✓ Das Analysensystem arbeitet die Sequenz ab. Sie können während der Messung weitere Mess- oder Kontrollschritte in der Sequenz ergänzen.

Für die Durchführung manueller und automatisierter Feststoffmessungen siehe Benutzeranleitung des Feststoffmoduls HT 1300.

## 7.14 Kalibrierstandards nachmessen oder ergänzen

Sie können nachträglich die Messung von Kalibrierpunkten wiederholen oder weitere Kalibrierpunkte in einer Kalibrierung ergänzen.




Die Messung einzelner Kalibrierpunkte erfolgt über die Auswahl des Probentyps **Kalibrierung** in der Sequenz. Die Software übernimmt die Kalibrierpunkte automatisch in die ausgewählte Kalibrierung.

### Kalibrierpunkte messen

- ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
- ▶ Mit **Hinzufügen nach Methode** Messschritte in Sequenz anlegen. Darauf achten, dass Methodeneinstellungen, wie z. B. das Probenvolumen, zur Gerätekonfiguration passen.
- ▶ Aus Dropdown-Menü oder im Fenster **Methode auswählen** Methode wählen. **i** HINWEIS! Methode verwenden, die als Grundlage der Kalibrierung diene.
- ▶ Nach Klick auf Button **Probentyp** aus Dropdown-Menü Probentyp **Kalibrierung** wählen.
- ▶ Im Panel **Schritt-Parameter** im Tab **Kalibrierung** zum gewünschten Messkanal navigieren. Aus Dropdown-Menü Kalibrierung auswählen.
- ▶ Im Panel **Parameter Probentyp** unter **Soll-Konzentration** Konzentration des Standards eintragen.
- ▶ Im Panel **Parameter Probentyp** Kalibrierung im Dropdown-Menü auswählen, für die Sie Standards nachmessen bzw. ergänzen wollen. Alternativ Kalibrierung nach Klick auf **...** im Fenster **Kalibrierung auswählen** wählen.
- ▶ Nach Klick auf **Ergebnistabelle** Ergebnistabelle aus Dropdown-Menü auswählen. Oder: Mit **Neue Ergebnistabelle erstellen** neue Ergebnistabelle anlegen. Wenn Sie keine Ergebnistabelle auswählen, speichert die Software die Ergebnisse in

der voreingestellten Ergebnistabelle. Voreinstellung siehe: **Programm | Einstellungen | Standard-Ergebnistabelle**

**i** HINWEIS! Ohne Ergebnistabelle ist kein Messstart möglich.

- ▶ Fertige Sequenz mit Klick auf Icon  auf Plausibilität prüfen. Die Software prüft, ob die angelegten Messschritte gemessen werden können.
- ▶ Bei Bedarf Sequenz mit Icon  speichern. Im Fenster **Save as** Namen für Sequenz festlegen und mit **Ok** bestätigen. Die Software benennt das Fenster entsprechend.
- ▶ Messung mit Klick auf Icon  starten.
  - ✓ Das Analysensystem arbeitet die Sequenz ab. Sie können während der Messung weitere Mess- oder Kontrollschritte in der Sequenz ergänzen.

Die Software subtrahiert von den Messergebnissen den Ansatzwasserblindwert. Ansatzwasserblindwert siehe Panel **Schritt-Parameter**, Tab **Blindwerte**, Feld **Wasser**.

Kalibrierpunkte manuell in Kalibrierung aufnehmen

Im Fenster **Ergebnisse** können Sie alternativ Kalibrierpunkte manuell in eine Kalibrierung aufnehmen.

- ▶ Mit Menübefehl **Ergebnisse | Ergebnisse** Fenster **Ergebnisse** öffnen.
- ▶ Aus Tabelle **Ergebnistabellen-Übersicht** Ergebnistabelle mit neuen Kalibrierpunkten auswählen.
- ▶ Ergebnistabelle mit Doppelklick oder über Button **Laden** öffnen.
- ▶ Gewünschte Messung im Fenster **Ergebnistabelle** in Tabelle **Ergebniseinträge der Tabelle** auswählen.
- ▶ Nach Klick auf Button **Zur Kalibrierung hinzufügen** Kalibrierpunkt im Fenster **Kalibrierung auswählen** der Kalibrierung zuordnen.
- ▶ Auswahl mit **Ok** bestätigen.
  - ✓ Sie haben einen neuen Kalibrierpunkt in eine Kalibrierung aufgenommen.

## 7.15 Tagesfaktor bestimmen

Mithilfe von Tagesfaktoren können Sie eine Kalibrierung überprüfen und korrigieren. Für die Bestimmung von Tagesfaktoren wählen Sie in der Sequenz den Probenotyp **Tagesfaktor** und messen eine oder mehrere Standardlösungen.

Wenn der Tagesfaktor innerhalb der festgelegten Grenzen liegt, übernimmt die Software den Tagesfaktor automatisch in die ausgewählte Kalibrierung.





Die Software multipliziert die Ergebnisse aller nachfolgenden Messungen mit dem Tagesfaktor. Die Software wendet den Tagesfaktor an, bis Sie einen neuen Tagesfaktor in die Kalibrierung übernehmen.

Sie können für jeden Kalibrierbereich einen Tagesfaktor bestimmen und in die Kalibrierung übernehmen. Die Software ordnet den Tagesfaktor automatisch dem passenden Kalibrierbereich zu. Der Tagesfaktor gilt nur für diesen Kalibrierbereich.


Tagesfaktor messen

- ▶ Eine oder mehrere Standardlösungen bereitstellen.
- ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
- ▶ Mit **Hinzufügen nach Methode** Messschritte in Sequenz anlegen. Darauf achten, dass Methodeneinstellungen, wie z. B. das Probenvolumen, zur Gerätekonfiguration passen.
- ▶ Aus Dropdown-Menü oder im Fenster **Hinzufügen nach Methode** Methode wählen.



- ▶ Nach Klick auf **Probentyp** Probentyp **Tagesfaktor** im Dropdown-Menü wählen.
- ▶ Im Panel **Parameter Probentyp** unter **Soll-Konzentration** Konzentration des Standards eingeben.
- ▶ Unter **Untergrenze** und **Obergrenze** Grenzen für den Tagesfaktor in (mg/l) festlegen. Empfehlung: Untergrenze  $0,8 \times c(\text{Standard})$  und Obergrenze  $1,2 \times c(\text{Standard})$
- ▶ Aktionen für den Fall der Grenzüberschreitung aus Dropdown-Menü auswählen. Empfehlung: Bei Grenzüberschreitung Sequenz abbrechen und neu kalibrieren.
- ▶ Im Panel **Parameter Probentyp** Kalibrierung im Dropdown-Menü auswählen, für die der Tagesfaktor gelten soll. Alternativ Kalibrierung nach Klick auf ... im Fenster **Kalibrierung auswählen** wählen.
- ▶ Im Panel **Schritt-Parameter**, Tab **Kalibrierung** für jeden Messkanal Kalibrierung für Berechnung der Messergebnisse aus Dropdown-Menü auswählen.
- ▶ Nach Klick auf **Ergebnistabelle** Ergebnistabelle aus Dropdown-Menü auswählen. Oder: Mit **Neue Ergebnistabelle erstellen** neue Ergebnistabelle anlegen. Wenn Sie keine Ergebnistabelle auswählen, speichert die Software die Ergebnisse in der voreingestellten Ergebnistabelle. Voreinstellung siehe: **Programm | Einstellungen | Standard-Ergebnistabelle**  
 **HINWEIS!** Ohne Ergebnistabelle ist kein Messstart möglich.
- ▶ Fertige Sequenz mit Klick auf Icon  auf Plausibilität prüfen. Die Software prüft, ob die angelegten Messschritte gemessen werden können.
- ▶ Bei Bedarf Sequenz mit Icon  speichern. Im Fenster **Save as** Namen für Sequenz festlegen und mit **Ok** bestätigen. Die Software benennt das Fenster entsprechend.
- ▶ Messung mit Klick auf Icon  starten.
  - ✓ Das Analysensystem arbeitet die Sequenz ab. Sie können während der Messung weitere Mess- oder Kontrollschritte in der Sequenz ergänzen.

#### Tagesfaktoren einsehen

- ▶ Berechneten Tagesfaktor in den Ergebnissen im Fenster **Ergebnistabelle** einsehen.
- ▶ Mit Menübefehl **Kalibrierungen | Kalibrierungen** Fenster **Kalibrierungen** öffnen.
- ▶ Kalibrierung in Tabelle **Kalibrierübersicht** auswählen. Davor Kalibrierübersicht mit Klick auf Icon  (oberhalb der Tabelle) aktualisieren.
- ▶ Kalibrierdaten in Detailansicht **Kalibriereigenschaften** auf Tab **Kalibriereigenschaften** einsehen.
- ▶ Tagesfaktor in Tabelle mit Kalibrierkoeffizienten unter **Tagesfaktor** prüfen und bei Bedarf ändern.

#### Sehen Sie dazu auch

-  Tagesfaktor [[▶ 62](#)]



## 7.16 Proben automatisch oder intelligent verdünnen

Die Software kann bei multi N/C 3300 und multi N/C 3100 Proben auf den folgenden Probengebern automatisch und intelligent verdünnen:

Probengeber	Probentablett	Automatisches Verdünnen	Intelligentes Verdünnen	Automatisches Ansäuern
AS vario	47 (dilut)	ja	nein	nein
	72	ja	ja	ja (intell. Verdünnen) nein (auto. Verdünnen)
	100	ja	ja	ja (intell. Verdünnen) nein (auto. Verdünnen)
AS 21hp	10 (dilut)	ja	ja	nein
AS 10e (ohne Rührfunktion)	10 (dilut)	ja	ja	nein

Bei automatischer und intelligenter Verdünnung ist im Standardfall die Option zum automatischen Ansäuern einer Probe in der Software deaktiviert.

- Für NPOC-Methoden müssen Sie die Originalproben deshalb manuell ansäuern.
- Für automatische Verdünnung können Sie alternativ Säure in die leeren Probengläser pipettieren, in die der Probengeber die Proben verdünnt.
- Prüfen Sie in beiden Fällen, ob der pH-Wert der Proben  $< 2$  ist. Nur dann kann der Probengeber anorganische Kohlenstoffverbindungen (TIC) beim Ausblasen als  $\text{CO}_2$  vollständig entfernen.

Ausnahme ist die intelligente Verdünnung unter Verwendung von Probengeber AS vario und Probentablett 72 oder 100. Hier ist automatisches Ansäuern möglich. Folgende Positionen müssen für das Säuregefäß frei bleiben:

- Position 55 (Probentablett 72)
- Position 85 (Probentablett 100)

### 7.16.1 Automatische Verdünnung

Verwenden Sie die automatische Verdünnung, wenn Sie Proben mit sehr hohen TC- oder  $\text{TN}_b$ -Gehalten bzw. in unbekannter hochbelasteter Probenmatrix untersuchen. Dabei legen Sie das Verdünnungsverhältnis in der Software fest.

Die Verdünnung hat folgende Vorteile:

- Sie steigern die Lebensdauer des Reaktors.
- Sie sparen durch die Automatisierung Arbeitszeit.
- Sie müssen keine extra Kalibrierung für hohe Konzentrationsbereiche durchführen.
- ▶ Probengeber mit passendem Probentablett verwenden, beispielsweise Probengeber AS vario mit Tablett 72. Passende Kanülenhalterung am Probengeber AS vario installieren.

Gerätekonfiguration anlegen und aktivieren

- ▶ Gerätekonfiguration für automatische Verdünnung anlegen. Fenster **Geräte verwalten** über Menübefehl **Gerät | Geräte verwalten** öffnen.
- ▶ Unter **Gerätetyp**: Modell multi N/C 3300 oder multi N/C 3100 wählen.

- ▶ Bei **Autosampler-Typ:** und **Rack:** Probengeber und Probentablett auswählen, beispielsweise AS vario und Tablett 72. Bei **Vial-Größe [ml]:** 50 ml auswählen. Bei Auswahl von Tablett 100 bei **Vial-Größe [ml]:** 20 ml auswählen. Bei Auswahl von Tablett 47 (dilut) bei **Vial-Größe [ml]:** 50 ml auswählen.
- ▶ Wenn von Software angezeigt, Checkbox **Automatische Verdünnung** aktivieren.
- ▶ Gerätekonfiguration mit Klick auf Button  speichern.
- ▶ Gerätekonfiguration aus Tabelle **Geräteübersicht** auswählen und mit Klick auf **Default setzen** als Standardkonfiguration aktivieren. Alternativ Gerätekonfiguration durch Doppelklick aktivieren.

## Probentablett 72 bestücken

- ▶ Das Probentablett auf den Positionen 1 ... 36 mit leeren Probengläsern (50 ml) bestücken.
- ▶ Die Originalproben in Probengläser (50 ml) füllen. Probentablett auf den Positionen 37 ... 72 mit den Proben bestücken.
- ▶ Proben, die nicht verdünnt werden sollen, auf einer freien Position 1 ... 36 platzieren.
- ▶ Reinstwasser in die Reinstwasserflasche füllen.

## Probentablett 100 bestücken

- ▶ Das Probentablett auf den Positionen 1 ... 50 mit leeren Probengläsern (20 ml) bestücken.
- ▶ Die Originalproben in Probengläser (20 ml) füllen. Probentablett auf den Positionen 51 ... 100 mit den Proben bestücken.
- ▶ Proben, die nicht verdünnt werden sollen, auf einer freien Position 1 ... 50 platzieren.
- ▶ Reinstwasser in die Reinstwasserflasche füllen.

## Probentablett 47 (dilut) bestücken

- ▶ Das Probentablett mit leeren Probengläsern (50 ml) bestücken.
- ▶ Die Originalproben in Probengläser (12 ml) füllen. Das Probentablett mit den Proben bestücken.
- ▶ Proben, die nicht verdünnt werden sollen, in Probengläser (50 ml) füllen und in der äußeren Reihe des Tablett platzen.
- ▶ Reinstwasser in die Reinstwasserflasche füllen.

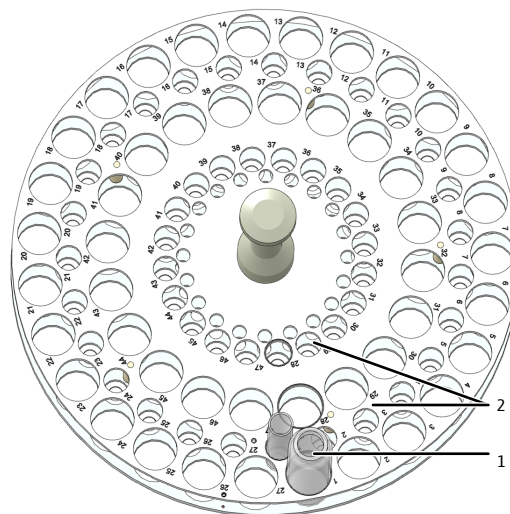






Abb. 28 Verdünnungstablett

1 Position 1 ... 47 für Gefäße (50 ml)

2 Position 1 ... 47 für Gefäße (12 ml)

- Probengeber AS vario justieren
- ▶ Mit Menübefehl **Gerät | Justierung Autosampler** Fenster **Justierung Autosampler** aufrufen.
  - ▶ Probenansaugkanüle zum Probentablett justieren. Dafür in der Tabelle **Samplerpositionen** Justierposition **Position 1** auswählen.
    - ✓ Der Probengeberarm bewegt sich über Position 1, bei Tablett 47 (dilut) in der äußeren Reihe.
  - ▶ Position 1 in einem Probenglas (50 ml) justieren. Bei Tablett 100 Probenglas (20 ml) verwenden.
  - ▶ Die Eintauchtiefe bei **- höher / + tiefer** schrittweise anpassen.
  - ▶ Nach jeder Änderung mit Klick auf Button **Anfahren** Position anfahren und prüfen.
  - ▶ Justierte Position mit **Speichern** speichern.
  - ▶ Bei Tablett 47 (dilut) anschließend Position 1 in einem kleinen Probenglas (12 ml) prüfen. Dafür Position 1 im Bereich **Position anfahren** auswählen und auf Button **Anfahren** klicken.  
Bei Aktivierung der Checkbox **Verdünnungsposition** fährt der Probengeber Position 1 in der inneren Reihe an.
- Methode und Sequenz anlegen
- ▶ Methode vorbereiten. In Detailansicht **Methode** Methodeneinstellungen bearbeiten:
  - ▶ Bei **Verdünnung: Vol. Originalprobe** und **Verdünnung: Vol. gesamt** Verdünnungsverhältnis auswählen.
  - ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
  - ▶ Im Panel **Sequenzparameter** Checkbox **Automatische Verdünnung** aktivieren.
  - ▶ Mit **Hinzufügen nach Methode** Messschritte in Sequenz anlegen. Darauf achten, dass Methodeneinstellungen, wie z. B. das Probenvolumen, zur Gerätekonfiguration passen.
  - ▶ Aus Dropdown-Menü oder im Fenster **Hinzufügen nach Methode** Methode wählen.
  - ▶ Nach Klick auf **Probentyp** Option **Verdünnungsblindwert (DB)** wählen, um Verdünnungsblindwert zu bestimmen. Auf dem Probentablett für die Blindwertbestimmung ein Probenglas mit Reinstwasser bereitstellen.
  - ▶ Optional in Sequenz Verdünnungsverhältnis für einzelne Messschritte in Methodeneinstellungen anpassen. Dafür Angaben unter **Verdünnung: Vol. Originalprobe** und **Verdünnung: Vol. gesamt** im Panel **Schritt-Parameter**, Tab **Schritt** editieren.
  - ▶ Für Proben, die nicht verdünnt werden sollen, bei **Verdünnung: Vol. Originalprobe** und **Verdünnung: Vol. gesamt** jeweils **1** eintragen.
  - ▶ Im Panel **Schritt-Parameter**, Tab **Kalibrierung** für jeden Messkanal Kalibrierung für Berechnung der Messergebnisse aus Dropdown-Menü auswählen.
  - ▶ Nach Klick auf **Ergebnistabelle** Ergebnistabelle aus Dropdown-Menü auswählen. Oder: Mit **Neue Ergebnistabelle erstellen** neue Ergebnistabelle anlegen. Wenn Sie keine Ergebnistabelle auswählen, speichert die Software die Ergebnisse in der voreingestellten Ergebnistabelle. Voreinstellung siehe: **Programm | Einstellungen | Standard-Ergebnistabelle**  
 **HINWEIS!** Ohne Ergebnistabelle ist kein Messstart möglich.
  - ▶ Fertige Sequenz mit Klick auf Icon  auf Plausibilität prüfen. Die Software prüft, ob die angelegten Messschritte gemessen werden können.
  - ▶ Bei Bedarf Sequenz mit Icon  speichern. Im Fenster **Save as** Namen für Sequenz festlegen und mit **Ok** bestätigen. Die Software benennt das Fenster entsprechend.
  - ▶ Messung mit Klick auf Icon  starten.

- ✓ Das Analysensystem arbeitet die Sequenz ab. Sie können während der Messung weitere Mess- oder Kontrollschritte in der Sequenz ergänzen.
- Verdünnung mit Probengeber AS 21hp und AS 10e
- Verwenden Sie das Tablett 10 (dilat).
  - Füllen Sie die Proben in 50 ml Probengefäße.
  - Positionieren Sie die unverdünnten Originalproben auf den Positionen 11 ... 20.
  - Stellen Sie leere 50 ml Probengefäße für die Verdünnung auf den Positionen 1 ... 10 bereit. Die Probe auf Position 11 wird in das Probengefäß auf Position 1 verdünnt, und so weiter.
  - Platzieren Sie Proben, die nicht verdünnt werden sollen, auf einer Position 1 ... 10. Tragen Sie bei **Verdünnung: Vol. Originalprobe** und **Verdünnung: Vol. gesamt** jeweils **1** ein.
  - Justieren Sie den Probengeber, bevor Sie mit Messungen beginnen, wie in der Bedienungsanleitung des Analysators beschrieben.
- Beachten Sie bei der automatischen Verdünnung Folgendes:
- Der Probengeber verdünnt die Originalproben im gewählten Verdünnungsverhältnis in die bereitgestellten Probengläser.
  - Bei Arbeit im NPOC-Modus verdünnt der Probengeber die Proben einer gesamten Reihe und analysiert sie anschließend. Der Probengeber bläst die verdünnten Proben aus.
  - Die Anzahl der möglichen Mehrfachbestimmungen ergibt sich aus der gewählten Methode, dem Injektionsvolumen und der Anzahl der Spülzyklen.
  - Die Software zeigt die Flächenintegrale für die verdünnten Proben an und berechnet aus diesen Werten automatisch die Konzentration der unverdünnten Primärproben.

## 7.16.2 Intelligente Verdünnung



Die intelligente Verdünnung ist besonders für Proben unbekannter TC- oder  $TN_b$ -Konzentration oder Proben in einer unbekanntem Probenmatrix sehr hilfreich.

Bei der intelligenten Verdünnung misst der Analysator zunächst die Originalprobe. Nach der ersten Bestimmung entscheidet die Software anhand des TC- bzw.  $TN_b$ -Gehalts, ob sie die Probe automatisch verdünnt oder mit Wiederholmessungen fortfährt. Die Software legt dabei das Verdünnungsverhältnis selbst fest.

- ▶ Probengeber mit passendem Probentablett verwenden, beispielsweise Probengeber AS vario mit Tablett 72. Passende Kanülenhalterung am Probengeber AS vario installieren.
- Gerätekonfiguration anlegen und aktivieren
- ▶ Gerätekonfiguration für intelligente Verdünnung anlegen. Fenster **Geräte verwalten** über Menübefehl **Gerät | Geräte verwalten** öffnen.
  - ▶ Unter **Gerätetyp**: Modell multi N/C 3300 oder multi N/C 3100 wählen.
  - ▶ Bei **Autosampler-Typ** und **Rack**: Probengeber und Probentablett auswählen, beispielsweise AS vario und Tablett 72. Bei **Vial-Größe [ml]**: 50 ml auswählen. Bei Auswahl von Tablett 100 bei **Vial-Größe [ml]**: 20 ml auswählen. Bei Auswahl von Tablett 47 (dilat) bei **Vial-Größe [ml]**: 50 ml auswählen.
  - ▶ Gerätekonfiguration mit Klick auf Button  speichern.
  - ▶ Gerätekonfiguration aus Tabelle **Geräteübersicht** auswählen und mit Klick auf **Default setzen** als Standardkonfiguration aktivieren. Alternativ Gerätekonfiguration durch Doppelklick aktivieren.
- Probentablett 72 bestücken
- ▶ Die Originalproben in Probengläser (50 ml) füllen. Die Positionen 1 ... 36 auf dem Probentablett mit den Proben bestücken.

- ▶ Das Probentablett auf Position 37 ... 72 mit leeren Probengläsern (50 ml) bestücken. Die Probe auf Position 1 wird in das Probenglas auf Position 37 verdünnt, und so weiter.
  - ▶ Bei NPOC-Methoden mit aktivierter Option **Automatisches Ansäuern** Position 19 und 55 nicht mit Proben belegen. Säuregefäß auf Position 55 platzieren.
  - ▶ Reinstwasser in die Reinstwasserflasche füllen.
- Probentablett 100 bestücken
- ▶ Die Originalproben in Probengläser (20 ml) füllen. Die Positionen 1 ... 50 auf dem Probentablett mit den Proben bestücken.
  - ▶ Das Probentablett auf Position 51 ... 100 mit leeren Probengläsern (20 ml) bestücken. Die Probe auf Position 1 wird in das Probenglas auf Position 51 verdünnt, und so weiter.
  - ▶ Bei NPOC-Methoden mit aktivierter Option **Automatisches Ansäuern** Position 35 und 85 nicht mit Proben belegen. Säuregefäß auf Position 85 platzieren.
  - ▶ Reinstwasser in die Reinstwasserflasche füllen.
- Probengeber AS vario justieren
- ▶ Mit Menübefehl **Gerät | Justierung Autosampler** Fenster **Justierung Autosampler** aufrufen.
  - ▶ Probenansaugkanüle zum Probentablett justieren. Dafür in der Tabelle **Samplerpositionen** Justierposition **Position 1** auswählen.
    - ✓ Der Probengeberarm bewegt sich über Position 1.
  - ▶ Position 1 in einem Probenglas (50 ml) justieren. Bei Tablett 100 Probenglas (20 ml) verwenden.
  - ▶ Die Eintauchtiefe bei **- höher / + tiefer** schrittweise anpassen.
  - ▶ Nach jeder Änderung mit Klick auf Button **Anfahren** Position anfahren und prüfen.
  - ▶ Justierte Position mit **Speichern** speichern.
- Methode und Sequenz vorbereiten
- ▶ Methode vorbereiten. In Detailansicht **Methode** Methodenparameter bearbeiten. Die Eingaben bei **Verdünnung: Vol. Originalprobe** und **Verdünnung: Vol. gesamt** haben keine Auswirkung auf die intelligente Verdünnung.
  - ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
  - ▶ Im Panel **Sequenzparameter** Checkbox **Intelligente Verdünnung** aktivieren.
  - ▶ Mit **Hinzufügen nach Methode** Messschritte in Sequenz anlegen. Darauf achten, dass Methodeneinstellungen, wie z. B. das Probenvolumen, zur Gerätekonfiguration passen.
  - ▶ Aus Dropdown-Menü oder im Fenster **Hinzufügen nach Methode** Methode wählen.
  - ▶ Nach Klick auf **Probentyp** Option **Verdünnungsblindwert (DB)** wählen, um Verdünnungsblindwert zu bestimmen. Auf dem Probentablett für die Blindwertbestimmung ein Probenglas mit Reinstwasser bereitstellen.
  - ▶ Im Panel **Schritt-Parameter**, Tab **Kalibrierung** für jeden Messkanal Kalibrierung für Berechnung der Messergebnisse aus Dropdown-Menü auswählen.
  - ▶ Nach Klick auf **Ergebnistabelle** Ergebnistabelle aus Dropdown-Menü auswählen. Oder: Mit **Neue Ergebnistabelle erstellen** neue Ergebnistabelle anlegen. Wenn Sie keine Ergebnistabelle auswählen, speichert die Software die Ergebnisse in der voreingestellten Ergebnistabelle. Voreinstellung siehe: **Programm | Einstellungen | Standard-Ergebnistabelle**
  - ▶ **i** HINWEIS! Ohne Ergebnistabelle ist kein Messstart möglich.
  - ▶ Fertige Sequenz mit Klick auf Icon  auf Plausibilität prüfen. Die Software prüft, ob die angelegten Messschritte gemessen werden können.

Verdünnung mit Probengeber  
AS 21hp und AS 10e




- ▶ Bei Bedarf Sequenz mit Icon  speichern. Im Fenster **Save as** Namen für Sequenz festlegen und mit **Ok** bestätigen. Die Software benennt das Fenster entsprechend.
- ▶ Messung mit Klick auf Icon  starten.
  - ✓ Das Analysensystem arbeitet die Sequenz ab. Sie können während der Messung weitere Mess- oder Kontrollschritte in der Sequenz ergänzen.
- Verwenden Sie das Tablett 10 (dilut).
- Füllen Sie die Proben in 50 ml Probengefäße.
- Positionieren Sie die unverdünnten Originalproben auf den Positionen 1 ... 10.
- Stellen Sie leere 50 ml Probengefäße für die Verdünnung auf den Positionen 11 ... 20 bereit. Die Probe auf Position 1 wird in das Probengefäß auf Position 11 verdünnt, und so weiter.
- Justieren Sie den Probengeber, bevor Sie mit Messungen beginnen, wie in der Bedienungsanleitung des Analysators beschrieben.

Beachten Sie bei der intelligenten Verdünnung Folgendes:

- Die Anzahl der möglichen Mehrfachbestimmungen ergibt sich aus der gewählten Methode, dem Injektionsvolumen und der Anzahl der Spülzyklen.
- Die Software zeigt die Flächenintegrale für die verdünnten Proben an und berechnet aus diesen Werten automatisch die Konzentration der unverdünnten Primärproben.
- Die verdünnte Probe erscheint in der Ergebnistabelle unmittelbar nach der Originalprobe. Die Software kennzeichnet verdünnte Proben.

## 7.17 Probenvolumen intelligent reduzieren

Die Software kann das Injektionsvolumen für hochkonzentrierte Proben automatisch reduzieren, sodass die Ergebnisse innerhalb des kalibrierten Bereiches liegen. Die Option ist nur für die Analysatoren multi N/C 2300 und multi N/C 3300 verfügbar.

- Die Software startet die intelligente Volumenreduktion, wenn die Probenkonzentration außerhalb des Kalibrierbereiches liegt.
- Die Software kann das Probenvolumen bis auf das minimale Injektionsvolumen verringern, siehe technische Daten des Analysators.
- ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
- ▶ Im Panel **Sequenzparameter** Checkbox **Intelligente Volumenreduktion** aktivieren.
- ▶ Mit **Hinzufügen nach Methode** Messschritte in Sequenz anlegen. Darauf achten, dass Methodeneinstellungen, wie z. B. das Probenvolumen, zur Gerätekonfiguration passen.
- ▶ Aus Dropdown-Menü oder im Fenster **Hinzufügen nach Methode** Methode wählen.
- ▶ Im Panel **Schritt-Parameter**, Tab **Kalibrierung** für jeden Messkanal Kalibrierung für Berechnung der Messergebnisse aus Dropdown-Menü auswählen.
- ▶ Nach Klick auf **Ergebnistabelle** Ergebnistabelle aus Dropdown-Menü auswählen. Oder: Mit **Neue Ergebnistabelle erstellen** neue Ergebnistabelle anlegen. Wenn Sie keine Ergebnistabelle auswählen, speichert die Software die Ergebnisse in der voreingestellten Ergebnistabelle. Voreinstellung siehe: **Programm | Einstellungen | Standard-Ergebnistabelle**
- ▶  **HINWEIS!** Ohne Ergebnistabelle ist kein Messstart möglich.
- ▶ Fertige Sequenz mit Klick auf Icon  auf Plausibilität prüfen. Die Software prüft, ob die angelegten Messschritte gemessen werden können.
- ▶ Bei Bedarf Sequenz mit Icon  speichern. Im Fenster **Save as** Namen für Sequenz festlegen und mit **Ok** bestätigen. Die Software benennt das Fenster entsprechend.

- ▶ Messung mit Klick auf Icon ▶ starten.
  - ✓ Das Analysensystem arbeitet die Sequenz ab. Sie können während der Messung weitere Mess- oder Kontrollschritte in der Sequenz ergänzen.

Der Analysator misst zunächst die Originalprobe. Nach der ersten Bestimmung entscheidet die Software anhand des Gehalts, ob sie das Probenvolumen reduziert oder mit den Wiederholmessungen fortfährt.

Für die Messung mit reduziertem Probenvolumen legt die Software automatisch einen neuen Messschritt in der Sequenz an. Für die Ergebnistabelle berechnet die Software die Konzentration der Probe unter Berücksichtigung des geringeren Injektionsvolumens.

In der Ergebnistabelle können Sie die Ergebnisse beider Messschritte einsehen:

- Originalprobe mit ursprünglichem Probenvolumen
- Originalprobe mit reduziertem Probenvolumen

Wenn Sie in den Sequenzeinstellungen unter **Sequenzparameter** automatische Volumenreduktion und intelligente Verdünnung auswählen, führt die Software bevorzugt die Volumenreduktion durch. Erst wenn die Volumenreduktion nicht ausreicht, um den Kalibrierbereich zu erreichen, führt die Software eine intelligente Verdünnung durch.

## 8 Menü Kalibrierung

Im Menü **Kalibrierungen** verwalten Sie die durchgeführten Kalibrierungen. Sie sehen Kalibrierdaten ein und bearbeiten sie.

Hinweis:

- Wählen Sie Menü **Sequenzen**, wenn Sie eine Kalibrierung vorbereiten und messen möchten.
- Wählen Sie Menü **Ergebnisse**, wenn Sie die Messkurven für einzelne Kalibrierpunkte einsehen oder weitere Kalibrierpunkte manuell in einer Kalibrierung ergänzen möchten.

**Sehen Sie dazu auch**

- 📖 Kalibrierung durchführen [▶ 87]
- 📖 Ergebnisse einsehen [▶ 112]

### 8.1 Fenster Kalibrierungen

Sie öffnen Fenster **Kalibrierungen** mit Menübefehl **Kalibrierungen | Kalibrierungen**.

Im Fenster Kalibrierungen

- Sie sehen Kalibrierdetails wie Kalibrierpunkte, Kalibrierdiagramme oder Verfahrenskenndaten in der Detailansicht **Kalibriereigenschaften** ein. Wenn Sie über entsprechende Rechte verfügen, können Sie Kalibrierungen editieren.
- Mit Klick auf Button **Hinzufügen** legen Sie eine leere Kalibrierung an, zu der Sie über den Button **Zur Kalibrierung hinzufügen** im Fenster **Ergebnistabelle** Kalibrierpunkte hinzufügen können.
- Sie löschen Kalibrierungen mit Klick auf Button **löschen**.
- Das optionale FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul verhindert das Löschen von Daten.
- Sie ordnen Kalibrierungen nach Klick auf **Gruppe zuweisen** im Fenster **Gruppe auswählen** in Gruppen.
- Sie importieren und exportieren Kalibrierungen mithilfe der Buttons **Import** und **Export** im XML-Format.
- Nach Klick auf **Report** sehen Sie den Kalibrierreport ein. Sie drucken den Report oder speichern den Report im pdf-Format.



Layout des Fensters

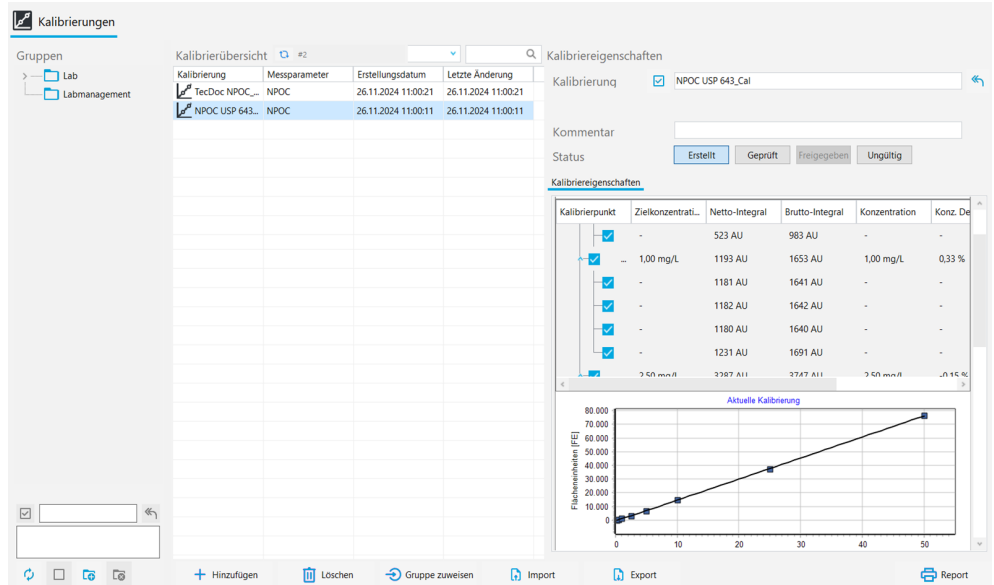


Abb. 29 Fenster Kalibrierungen

Bereich	Beschreibung
Gruppen (links)	Gruppenverwaltung
Kalibrierübersicht (Mitte)	Tabellarische Übersicht der gespeicherten Kalibrierungen mit: <ul style="list-style-type: none"> <li>Name der Kalibrierung und kalibrierte Messparameter</li> <li>Datum von Erstellung und letzter Änderung</li> </ul>
Kalibriereigenschaften (rechts)	Detailansicht für die ausgewählte Kalibrierung: <ul style="list-style-type: none"> <li>Allgemeine Infos: Name der Kalibrierung, Beschreibung, Kommentar und Freigabestatus</li> <li>Tab <b>Kalibriereigenschaften</b>, Panel <b>Kalibriereigenschaften</b> mit Kalibrierdetails</li> <li>Tab <b>Kalibriereigenschaften</b>, Panel <b>Methode</b> mit Methodenparametern</li> <li>Tab <b>Signaturen</b> mit Informationen zu den Signaturen (nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul)</li> </ul>

Elektronische Signaturen sind ein wichtiger Bestandteil des optionalen FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmoduls. Mithilfe von Signaturen und entsprechender Rechtevergabe schränken Sie die Nutzung nicht-freigegebener Daten ein. Beim Signieren ist die Eingabe von Benutzername und Passwort zwingend erforderlich.

In der Standardsoftware können Sie den Status von Daten, z. B. auf **Geprüft**, setzen. Sie können Daten jedoch nicht mit einer elektronischen Signatur versehen. Das Tab **Signaturen** bleibt ohne Einträge. An den Status der Daten sind keine Einschränkungen gekoppelt. So bleiben auch gesperrte Daten weiterhin nutzbar.



Panel Kalibriereigenschaften

Im Panel **Kalibriereigenschaften** sehen Sie die Ergebnisse der Kalibrierung ein.

Bereich	Beschreibung
Ansatzwasser-Blindwert	Ansatzwasserblindwert Bei Bedarf Ansatzwasserblindwert bearbeiten und mit Button <b>Speichern</b> speichern
Ergebnistabelle	Anzeige für Messkanäle, Kalibrierpunkte und einzelne Wiederholmessungen: <ul style="list-style-type: none"> <li>Sollkonzentration</li> <li>Mittelwert der Flächenintegrale (Angabe von Brutto-Integralen und Netto-Integralen, bereinigt um den Ansatzwasserblindwert)</li> </ul>

Bereich	Beschreibung
	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Mittlere Konzentration</li> <li>■ Prozentuale Abweichung der berechneten Konzentration von der Sollkonzentration</li> <li>■ Ansatzwasserblindwert</li> <li>■ Probenvolumen</li> </ul> <p>Die Anzeige für Messkanäle, Kalibrierpunkte und Wiederholmessungen mit <math>\checkmark</math> / <math>\wedge</math> aus- und einklappen</p> <p>Messdaten durch Aktivieren bzw. Deaktivieren der Checkboxes auswählen oder abwählen</p>
Kalibrierdiagramm	<p>Regressionsgraph mit x-Achse: Gehalt in (Abs. Masse [<math>\mu\text{g}</math>]) y-Achse: Flächenintegral in (FE)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Wenn Sie Messungen in Ergebnistabelle aktivieren oder deaktivieren, passt die Software die graphische Darstellung an.</li> <li>■ Zum Zoomen: Mauszeiger in Diagramm platzieren und gewünschten Ausschnitt von links nach rechts aufziehen.</li> <li>■ Zum Herauszoomen: Vergrößerten Ausschnitt von rechts nach links aufziehen.</li> </ul>
Bereich <b>Auswahl des Schnittpunkts</b>	Für jeden Messkanal (TC, TN, etc.) über Checkboxes Trennpunkte aktivieren und damit mehrere Kalibrierbereiche festlegen
<b>Bereiche</b> mit Radio Buttons <ul style="list-style-type: none"> <li>■ <b>Standard: linear</b></li> <li>■ <b>Standard: quadratisch</b></li> </ul>	<p>Für alle Kalibrierbereiche die Berechnung der Regressionsgleichung auf Grundlage einer linearen bzw. quadratischen Regression festlegen</p> <p>Die Software zeigt für den gewählten Regressionstyp die Kalibrierkoeffizienten an.</p>
Tabelle mit Verfahrenskenndaten	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Regressionstyp Bei Bedarf Regressionstyp für jeden Kalibrierbereich einzeln wählen</li> <li>■ Kalibrierkoeffizienten <math>k_0</math>, <math>k_1</math>, <math>k_2</math> (<math>k_2</math> nur bei quadratischer Regression)</li> <li>■ Untere und obere Grenze des Kalibrierbereichs</li> <li>■ Tagesfaktor</li> <li>■ Bestimmtheitsmaß <math>R^2</math></li> <li>■ Nachweis- und Bestimmungsgrenze (nur für lineare Regression)</li> </ul> <p>Die Software berechnet die Verfahrenskenndaten auf Grundlage von DIN 32645 (Kalibrierfunktion) mit Signifikanzniveau <math>P = 95\%</math>.</p> <p>Die Software ermittelt die Bestimmungsgrenze für eine relative Ergebnisunsicherheit von <math>33,3\%</math> (mit Faktor <math>k = 3</math>).</p>


#### Sehen Sie dazu auch

-  Elektronische Signaturen [[▶ 138](#)]
-  In Gruppen ordnen [[▶ 32](#)]

## 8.2 Kalibrierung einsehen

Im Fenster **Kalibrierungen** können Sie Kalibrierungen mit Kalibrierdiagramm, Verfahrenskenndaten und den Ergebnissen für einzelne Messkanäle, Kalibrierpunkte und Wiederholmessungen einsehen.

- ▶ Mit Menübefehl **Kalibrierungen | Kalibrierungen** Fenster **Kalibrierungen** öffnen.

- ▶ Kalibrierung in Tabelle **Kalibrierübersicht** auswählen. Davor Kalibrierübersicht mit Klick auf Icon  (oberhalb der Tabelle) aktualisieren.
- ▶ Kalibrierdaten in Detailansicht **Kalibriereigenschaften** auf Tab **Kalibriereigenschaften** einsehen:
  - Editierbarer Ansatzwasserblindwert
  - Ausklappbare Ergebnisanzeige für verschiedene Messkanäle, Kalibrierpunkte und Wiederholmessungen
  - Kalibrierdiagramm
  - Aktivierbare Trennpunkte für mehrere Kalibrierbereiche
  - Verfahrenskennndaten: wählbarer Regressionstyp, Kalibrierkoeffizienten, untere und obere Grenze des Kalibrierbereiches, editierbarer Tagesfaktor, Bestimmtheitsmaß und Nachweisgrenze sowie Bestimmungsgrenze
- ▶ Im Panel **Methode** Methodeneinstellungen einsehen.
- ▶ Unter **Kommentar** optional Kommentar eingeben.
- ▶ Nach Änderungen Kalibrierung mit Klick auf Button  speichern.



## 8.3 Kalibrierung bearbeiten

Benutzer mit entsprechenden Rechten können im Fenster **Kalibrierungen** Kalibrierungen bearbeiten:

- Sie können Kalibrierpunkte und Wiederholmessungen in der Ergebnistabelle über die Checkboxes aktivieren und deaktivieren.
- Sie können zwischen linearer und quadratischer Regression wählen.
- Sie können Trennpunkte für mehrere Kalibrierbereiche festlegen.
- Sie können Ansatzwasserblindwert und Tagesfaktor einsehen und bearbeiten.

Sie können mehrere Kalibrierbereiche für unterschiedliche Konzentrationsbereiche festlegen. Zwei aufeinanderfolgende Kalibrierbereiche müssen einen gemeinsamen Trennpunkt haben.


Nach jeder Änderung berechnet die Software Kalibrierkoeffizienten, Verfahrenskennndaten und Regressionsgraph neu.

- ▶ Mit Menübefehl **Kalibrierungen | Kalibrierungen** Fenster **Kalibrierungen** öffnen.
- ▶ Kalibrierung in Tabelle **Kalibrierübersicht** auswählen. Davor Kalibrierübersicht mit Klick auf Icon  (oberhalb der Tabelle) aktualisieren.
- ▶ Kalibrierdaten in Detailansicht **Kalibriereigenschaften** auf Tab **Kalibriereigenschaften** einsehen.
- ▶ Bei Bedarf die folgenden Änderungen durchführen:
  - Ansatzwasserblindwert prüfen. Neuen Ansatzwasserblindwert im Feld **Ansatzwasser-Blindwert** eintragen. Wert mit **Speichern** übernehmen.
  - In Ergebnistabelle Ergebnisanzeige für Messkanäle, Kalibrierpunkte und Wiederholmessungen nacheinander mit  aufklappen. Bei Bedarf einzelne Kalibrierpunkte oder Wiederholmessungen über Checkboxes deaktivieren.
  - Im Bereich **Auswahl des Schnittpunkts** Trennpunkte für mehrere Kalibrierbereiche festlegen.
- ▶ Bei **Bereiche** Regressionstyp (linear oder quadratisch) für alle Kalibrierbereiche wählen.


- Optional für jeden Kalibrierbereich Regressionstyp einzeln in der Tabelle mit Verfahrenskenndaten festlegen.
- In der Tabelle mit Verfahrenskenndaten Tagesfaktor einsehen und editieren.
- ▶ Änderungen mit Klick auf Button  speichern.

## 8.4 Kalibrierreport drucken und speichern

### Kalibrierreport drucken

- ▶ Mit Menübefehl **Kalibrierungen | Kalibrierungen** Fenster **Kalibrierungen** öffnen.
- ▶ Kalibrierung in Tabelle **Kalibrierübersicht** auswählen. Davor Kalibrierübersicht mit Klick auf Icon  (oberhalb der Tabelle) aktualisieren.
- ▶ Mit Klick auf **Report** Druckvorschau öffnen.
- ▶ Für eine bessere Übersicht mit Klick auf Button **Navigator** den Navigationsbereich mit einer Seitenübersicht links neben dem Report einblenden. Ansicht mit Klick auf **Vergrößern** und **Verkleinern** vergrößern bzw. verkleinern.
- ▶ Firmenlogo in Report ergänzen. Nach Klick auf Button **Laden** im Bereich **Report-Logo** Logo in Windows-Dateiverwaltung auswählen und mit **Öffnen** in Report laden.
- ▶ Nach Klick auf **Drucker-Optionen** Drucker einrichten.
- ▶ Nach Klick auf **Seite einrichten** Seiteneinstellungen wie Seitengröße oder Seitenausrichtung festlegen. Voreinstellung: A4, Hochformat. Layout auf aktuelle Seite oder alle Report-Seiten anwenden.
- ▶ Druck mit Klick auf **Drucken** starten.
  - ✓ Sie haben einen Kalibrierreport gedruckt.

### Kalibrierreport speichern

- ▶ Mit Menübefehl **Kalibrierungen | Kalibrierungen** Fenster **Kalibrierungen** öffnen.
- ▶ Kalibrierung in Tabelle **Kalibrierübersicht** auswählen. Davor Kalibrierübersicht mit Klick auf Icon  (oberhalb der Tabelle) aktualisieren.
- ▶ Mit Klick auf **Report** Druckvorschau öffnen.
- ▶ Nach Klick auf **Speichern** Dateiname, Speicherverzeichnis und Dateityp im Fenster **Speichern unter** festlegen.
- ▶ Report mit Klick auf Button **Speichern** speichern.

Sie können Reporte in folgenden Dateiformaten speichern: PDF (voreingestellt), RTF, HTML, TXT, FP3.

Wenn Sie eine Kalibrierung bearbeiten, werden die Änderungen erst nach dem Speichern in den Report übernommen.

## 9 Menü Ergebnisse

Die Software speichert Messergebnisse in Ergebnistabellen. Dabei können Ergebnistabellen Ergebnisse verschiedener Messungen enthalten: Proben, Kalibrierstandards, Systemeignungstests (SST), QC Standards und Blindwerte. Im Menü **Ergebnisse** verwalten Sie die Ergebnistabellen und die darin gespeicherten Messergebnisse.

Im Menü Ergebnisse

- Mit Menübefehl **Ergebnisse** öffnen Sie Fenster **Ergebnisse**. Hier verwalten Sie Ergebnistabellen und laden ausgewählte Ergebnistabellen, um Messergebnisse einzusehen und zu bearbeiten.
- Mit Menübefehl **SSTs** öffnen Sie Fenster **SSTs** mit den Ergebnissen von Systemeignungstests (SST). SSTs sind nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul möglich.

Sehen Sie dazu auch

📄 Systemeignungstest (SST) [▶ 140]

### 9.1 Fenster Ergebnisse

Sie öffnen Fenster **Ergebnisse** mit Menübefehl **Ergebnisse | Ergebnisse**.

Im Fenster Ergebnisse

Im Fenster **Ergebnisse** verwalten Sie Ergebnistabellen.

- Mit Doppelklick oder Klick auf Button **Laden** öffnen Sie eine ausgewählte Ergebnistabelle, um Messergebnisse im Fenster **Ergebnistabelle** einzusehen und zu bearbeiten.
- Mit Klick auf Button **Hinzufügen** legen Sie eine neue Ergebnistabelle für zukünftige Messungen an.
- Mit Klick auf **löschen** löschen Sie eine Ergebnistabelle mit allen darin gespeicherten Messergebnissen.
- Das optionale FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul verhindert das Löschen von Daten.
- Sie ordnen Ergebnistabellen nach Klick auf **Gruppe zuweisen** im Fenster **Gruppe auswählen** in Gruppen.

Layout des Fensters

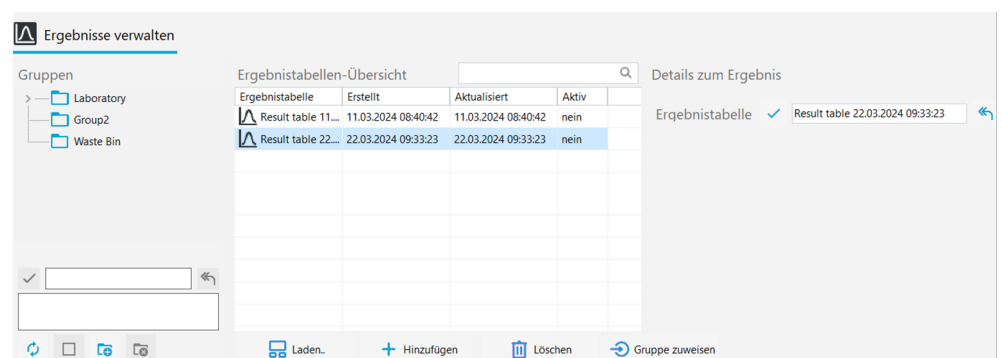


Abb. 30 Fenster Ergebnisse

Bereich	Beschreibung
Gruppen (links)	Gruppenverwaltung
Ergebnistabellen-Übersicht (Mitte)	Tabellarische Übersicht der Ergebnistabellen mit: <ul style="list-style-type: none"> <li>Name der Ergebnistabelle</li> <li>Datum von Erstellung und letzter Änderung</li> <li>Status der Ergebnistabelle (<b>ja: ja / nein</b>)</li> </ul>
Details zum Ergebnis (rechts)	Ausgewählte Ergebnistabelle mit Namen

Sehen Sie dazu auch

In Gruppen ordnen [▶ 32]

## 9.2 Fenster Ergebnistabelle

Im Fenster **Ergebnistabelle** können Sie die in einer Ergebnistabelle gespeicherten Messergebnisse einsehen. Benutzer mit entsprechendem Recht können Ergebnisse manuell editieren.

Sie öffnen Fenster **Ergebnistabelle** durch Laden einer ausgewählten Ergebnistabelle mit Klick auf Button **Laden** im Fenster **Ergebnisse**. Alternativ können Sie das Fenster durch Doppelklick auf die gewünschte Ergebnistabelle öffnen.

Layout des Fensters

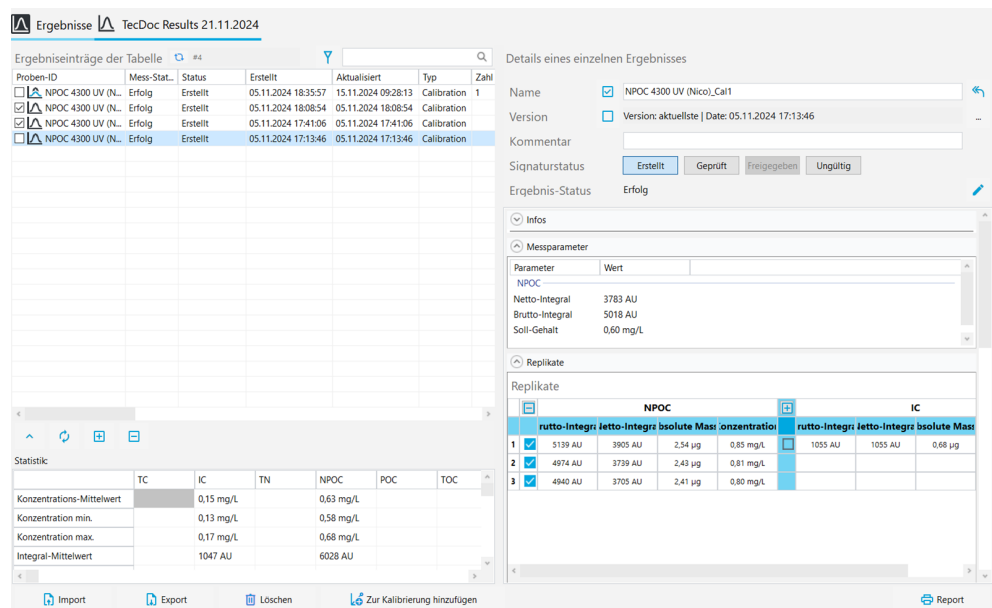




Abb. 31 Fenster Ergebnistabelle

Element	Beschreibung
Tabelle <b>Ergebniseinträge der Tabelle</b> (links)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Ergebnisse für jeden Messschritt in tabellarischer Übersicht einsehen</li> <li>Bei Bedarf Tabelle über Befehl <b>Anzeigespalten verwalten</b> im Kontextmenü anpassen</li> </ul>
Übersicht <b>Details eines einzelnen Ergebnisses</b> mit ausklappbaren Panels (rechts)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Details für einzelne Messergebnisse einsehen und nach Klick auf Icon  bearbeiten</li> <li>Ergebnisse nach Prüfung durch Klick auf einen der Buttons im Bereich <b>Signaturstatus</b> freigeben</li> </ul>

Element	Beschreibung
Icon- und Button-Leiste (unten)	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Mit Icons <math>\vee</math> / <math>\wedge</math> Bereich <b>Statistik</b>: ein- und ausklappen</li> <li>■ Mit Icon  alle Ergebnisse in Tabelle <b>Ergebniseinträge der Tabelle</b> auswählen</li> <li>■ Mit Icon  alle Ergebnisse in Tabelle abwählen</li> <li>■ Mit <b>Import</b> Ergebnisse im XML-Format importieren</li> <li>■ Mit <b>Export</b> Ergebnisse im XML-Format exportieren, voreingestellter Export-Ordner: <i>C:/ProgramData/Analytik-Jena/multiWinPro/export/results</i></li> <li>■ Mit <b>Zur Kalibrierung hinzufügen</b> Kalibrierpunkte einer Kalibrierung hinzufügen</li> <li>■ Mit <b>Gehe zu SST</b> Messergebnisse eines Systemeignungstests in Tabelle auswählen (nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul)</li> <li>■ Mit <b>Alle markierten Ergebnisse signieren</b> mehrere Ergebnisse gleichzeitig signieren</li> <li>■ Mit <b>Report</b> Druckvorschau öffnen, Report drucken oder speichern</li> </ul> <p>Vor Weiterverarbeitung Ergebnisse durch Aktivieren der Checkboxes auswählen</p>
Ausklappbarer Bereich <b>Statistik</b> : (unten)	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Bereich <b>Statistik</b>: mit Icons <math>\vee</math> / <math>\wedge</math> aus- oder einklappen</li> <li>■ Mittleres Integral und mittlere Konzentration für ausgewählte Messungen ermitteln und anzeigen. Die ausgewählten Messungen werden dabei von der Software als Wiederholmessungen erfasst.</li> <li>■ Messergebnisse durch Aktivieren der Checkboxes in Tabelle <b>Ergebniseinträge der Tabelle</b> auswählen</li> </ul>

### 9.2.1 Tabelle Ergebniseinträge der Tabelle

Die Tabelle **Ergebniseinträge der Tabelle** ist Teil des Fensters **Ergebnistabelle**. Die tabellarische Übersicht zeigt alle Messergebnisse, die in einer Ergebnistabelle gespeichert sind.

Sie können das Layout der Tabelle über den Befehl **Anzeigespalten verwalten** (im Kontextmenü) anpassen.








Spalte	Beschreibung
<b>Proben-ID</b> mit Checkbox	Proben ID mit Checkbox <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Checkbox aktivieren, um Ergebnisse für Mittelwertberechnung, Import/Export oder Report auszuwählen</li> </ul>
<b>Mess-Status</b>	Messerfolg
<b>Status</b>	Signierstatus
<b>Erstellt</b>	Messzeitpunkt
<b>Aktualisiert</b>	Zeitpunkt der letzten Aktualisierung
<b>Typ</b>	Probentyp (Probe, Kalibrierstandard, Blindwert, Tagesfaktor, QC Standard, SST-Probe)
<b>Version</b>	Anzahl der Ergebnisversionen Immer wenn Sie Ergebnisse bearbeiten, legt die Software eine neue Version der Ergebnisse an.
<b>Konzentration</b>	Mittlere Konzentration Die Software ermittelt die mittlere Konzentration aus den Ergebnissen der Wiederholmessungen und bereinigt sie um die Blindwerte.
<b>SD</b>	Standardabweichung des Messergebnisses

Spalte	Beschreibung
RSD	Relative Standardabweichung des Messergebnisses in (%)
Methode	Messmethode
Verfahren	Methodentyp (TC, NPOC, etc.)
Replikate	Anzahl an Wiederholmessungen <ul style="list-style-type: none"> <li>Angabe: Anzahl durchgeführter Messungen, in Klammern minimale und maximale Anzahl an Wiederholmessungen (min-max)</li> </ul>
Volumen	Probenvolumen
Verdünnung	Verdünnungsverhältnis für manuell oder automatisch verdünnte Proben
Messparameter	Messkanäle
Soll-Konzentration	In der Sequenztabelle festgelegte Zielkonzentration
Kommentar	Individuelle Information als Kommentar
Dichte	Dichte flüssiger Proben
Position	Position auf Probenblett
CSB	Für TOC- und NPOC-Methoden ermittelter CSB (COD, Chemical Oxygen Demand)
BSB <sub>5</sub>	Für TOC- und NPOC-Methoden ermittelter BSB <sub>5</sub> (BOD <sub>5</sub> , Biochemical Oxygen Demand)
Ges. Protein	Für TN-Methoden ermittelter TP-Gehalt (Total Protein)
CO <sub>2</sub>	Für TIC-Methoden ermittelte Kohlenstoffdioxidkonzentration
Anwender	Während der Messung angemeldeter Benutzer

## 9.2.2 Tabelle Ergebniseinträge der Tabelle anpassen

Die Tabelle **Ergebniseinträge der Tabelle** ist Teil des Fensters **Ergebnistabelle**. Die tabellarische Übersicht zeigt alle Messergebnisse, die in einer Ergebnistabelle gespeichert sind.

Sie können das Layout der Tabelle über den Befehl **Anzeigespalten verwalten** (im Kontextmenü) anpassen.

- ▶ Mit Menübefehl **Ergebnisse | Ergebnisse** Fenster **Ergebnisse** öffnen.
- ▶ Ergebnistabelle in Tabelle **Ergebnistabellen-Übersicht** auswählen. Ausgewählte Ergebnistabelle mit Doppelklick oder Klick auf Button **Laden** öffnen.
- ▶ Mit Rechtsklick in Tabelle **Ergebniseinträge der Tabelle** Kontextmenü öffnen. Befehl **Anzeigespalten verwalten** wählen.
- ▶ Im Fenster **Anzeigespalten verwalten** Tabellenspalten anpassen:
  - Mit Icon  Spalte aus Vorschlägen (links) in Tabelle (rechts) übernehmen.
  - Mit Icon  Spalte aus Tabelle (rechts) entfernen.
  - Mit Icon  alle Spalten aus Vorschlägen (links) in Tabelle (rechts) übernehmen.
  - Mit Icon  alle Spalten aus Tabelle (rechts) entfernen.
  - Mit Icon  Spalte nach unten bzw. in Tabelle **Ergebniseinträge der Tabelle** nach rechts verschieben.
  - Mit Icon  Spalte nach oben bzw. in Tabelle **Ergebniseinträge der Tabelle** nach links verschieben.
  - Mit Icon  zu in Software voreingestellter Spaltenauswahl zurückkehren.




- ▶ Eingaben mit **Ok** bestätigen.
    - ✓ Sie haben die Tabellenspalten angepasst.
- Sie können im Fenster **Ergebnistabelle**, die Einheiten und Nachkommastellen für die angezeigten Ergebnisse anpassen.
- ▶ Im Kontextmenü Befehl **Ausgabeeinheiten auswählen** bzw. **Einheiten für Tabelle setzen** wählen.
  - ▶ Einheiten und Nachkommastellen im Bereich **Einheit/Nachkommastellen** ändern.
  - ▶ Für die Ergebnisausgabe im Fenster **Ergebnistabelle**: Auf Tab **Ergebnisse** Einheiten und Nachkommastellen für die Ergebnistabelle festlegen. Auf Tab **Ergebnisübersicht** Einstellungen für die Detailansicht vornehmen.
  - ▶ Eingabe mit **Ok** bestätigen.
  - ▶ Mit Klick auf Button **Auf globale Einstellungen zurücksetzen** zu den Einstellungen zurückkehren, die Sie im Fenster **Software-Einstellungen** auf Tab **Einheiten** voreingestellt haben.

### 9.2.3 Details eines einzelnen Ergebnisses

Die Detailansicht **Details eines einzelnen Ergebnisses** ist Teil des Fensters **Ergebnistabelle**. Die Übersicht zeigt Details einzelner Messergebnisse.

Wenn Sie über das Recht zum manuellen Editieren von Ergebnissen verfügen, können Sie nach Klick auf Icon  Messergebnisse bearbeiten.

Allgemeine Angaben

Angezeigter Parameter	Beschreibung
<b>Name</b>	Editierbare Proben ID
<b>Version</b>	Version des Ergebnisses Wenn Sie Ergebnisse bearbeiten, legt die Software eine neue Version der Ergebnisse an. <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Nach Klick auf Icon  in den Ergebnisversionen navigieren</li> <li>▪ Mit Klick auf Icon <input type="checkbox"/> zur letzten Version zurückkehren</li> </ul>
<b>Kommentar</b>	Individuelle Informationen eingeben
<b>Signaturstatus</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Signierstatus der Ergebnisse einsehen</li> <li>▪ Ergebnisse nach Prüfung freigeben oder sperren</li> </ul>
<b>Ergebnis-Status</b>	Anzeige des Messerfolges

Detaillierte Informationen zu den Messergebnissen können Sie in vier ausklappbaren Panels einsehen.

Panel Infos

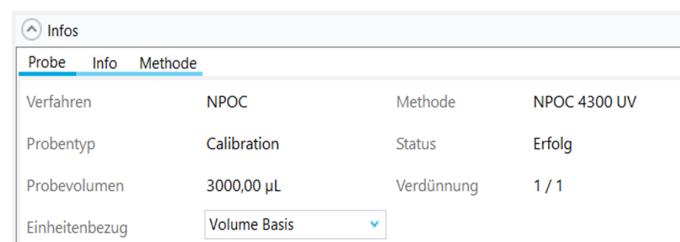


Abb. 32 Panel Infos

Bereich	Beschreibung
Tab <b>Probe</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Methodentyp und Methode</li> <li>■ Probentyp</li> <li>■ Messerfolg</li> <li>■ Probenvolumen in (µl)</li> <li>■ Verdünnungsverhältnis von manuell oder automatisch verdünnten Proben</li> <li>■ Dropdown-Menü bei <b>Einheitenbezug</b> zur Auswahl des Einheitenbezugs für die Ergebnisse in Panel <b>Messparameter</b> und <b>Replikate</b> (volumenbezogen, massebezogen oder flächenbezogen)</li> </ul>
Tab <b>Info</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Gerätetyp und Seriennummer</li> <li>■ Software- und Firmware-Version</li> <li>■ Zum Zeitpunkt der Messung angemeldeter Benutzer</li> </ul>
Tab <b>Methode</b>	Methodenparameter mit Einstellungen
Tab <b>Signaturen</b>	Detailinformationen zum Signierstatus (nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul)

Elektronische Signaturen sind ein wichtiger Bestandteil des optionalen FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmoduls. Mithilfe von Signaturen und entsprechender Rechtevergabe schränken Sie die Nutzung nicht-freigegebener Daten ein. Beim Signieren ist die Eingabe von Benutzername und Passwort zwingend erforderlich.

In der Standardsoftware können Sie den Status von Daten, z. B. auf **Geprüft**, setzen. Sie können Daten jedoch nicht mit einer elektronischen Signatur versehen. Das Tab **Signaturen** bleibt ohne Einträge. An den Status der Daten sind keine Einschränkungen gekoppelt. So bleiben auch gesperrte Daten weiterhin nutzbar.

#### Panel Messparameter

Parameter	Wert
NPOC	
Netto-Integral	3783 AU
Brutto-Integral	5018 AU
Soll-Gehalt	0,60 mg/L

Abb. 33 Panel Messparameter

Bereich	Beschreibung
Messkanäle mit Ergebnissen	<p>Anzeige der ermittelten Ergebnisse und Verfahrenskennndaten für jeden Messkanal:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Mittleres Rohintegral in (FE) und Netto-Integral, bereinigt um Blindwerte</li> <li>■ Mittlere Masse in (µg) und mittlere Konzentration in (mg/l), bereinigt um Blindwerte</li> <li>■ Standardabweichung in (mg/l)</li> <li>■ Relative Standardabweichung in (%)</li> </ul>

Panel Replikate

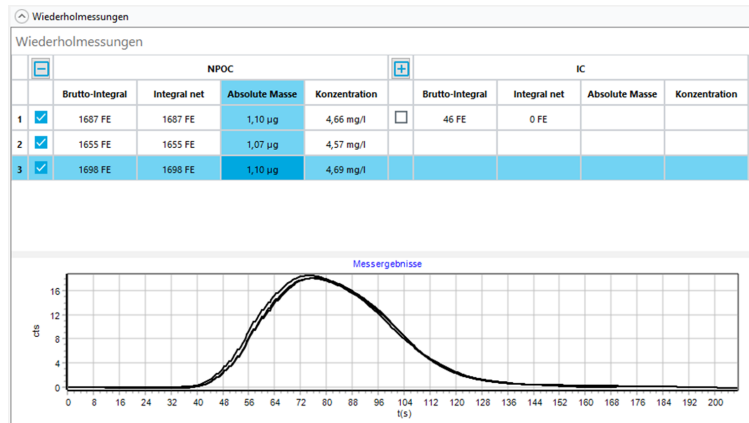


Abb. 34 Panel Replikate

Bereich	Beschreibung
Tabelle mit Ergebnissen der Wiederholmessungen	<p>Ergebnisanzeige für jeden Messkanal und jede Wiederholungsmessung:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Gemessenes Rohintegral in (FE) und Netto-Integral, bereinigt um Blindwerte</li> <li>Berechnete absolute Masse</li> <li>Berechnete Konzentration</li> </ul> <p>Die Software bereinigt absolute Masse und Konzentration um die vorhandenen Blindwerte.</p> <p>Die Software erkennt Ausreißer und hinterlegt die entsprechenden Tabellenzeilen grau.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Sie können Wiederholungsmessungen über die Checkboxes aktivieren oder deaktivieren. Die Software berücksichtigt deaktivierte Messungen nicht für die Ergebnisberechnung.</li> </ul>
Graphische Darstellung der Messkurven	<p>Graphische Darstellung der Messkurve für jeden Messkanal und jede Wiederholungsmessung (x-Achse: Zeit in (s), y-Achse: Messsignal in (cts))</p> <p>Bei Messung mehrerer Messkanäle stellt die Software die Messkurven in unterschiedlichen Farben dar.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Wenn Sie Messkanäle oder Wiederholungsmessungen in der Tabelle aktivieren oder deaktivieren, passt die Software die graphische Darstellung an.</li> <li>Zum Zoomen: Mauszeiger in Messkurve platzieren und gewünschten Ausschnitt von links nach rechts aufziehen.</li> <li>Zum Herauszoomen: Vergrößerten Ausschnitt von rechts nach links aufziehen.</li> <li>Mit gedrückter rechter Maustaste Ausschnitt verschieben.</li> </ul>

Panel Berechnungsparameter

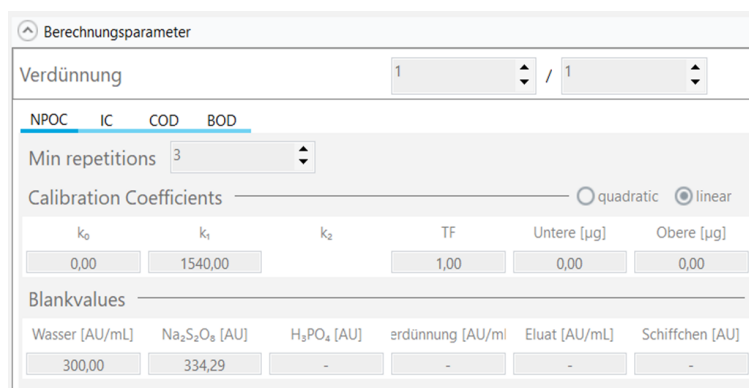


Abb. 35 Panel Berechnungsparameter

Im Panel **Berechnungsparameter** wechseln Sie über die Tabs zwischen den Ergebnissen für die verschiedenen Messparameter.

Bereich	Beschreibung
Feld <b>Verdünnung</b>	Für die Berechnung berücksichtigtes Verdünnungsverhältnis, editierbar
Feld <b>Min. Replikate</b>	Editierbare Anzahl der für die Ergebnisberechnung verwendeten Wiederholmessungen
Bereich <b>Kalibrierkoeffizienten</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Radio Buttons zur Auswahl des Regressionstyps (<b>quadratisch</b> oder <b>linear</b>)</li> <li>▪ Editierbare Kalibrierkoeffizienten <math>k_0</math>, <math>k_1</math>, <math>k_2</math> (<math>k_2</math> nur bei quadratischer Regression)</li> <li>▪ Editierbarer Tagesfaktor</li> <li>▪ Untere und obere Grenze des Kalibrierbereichs</li> </ul>
Bereich <b>Blindwerte</b>	Editierbare Blindwerte
Bereich <b>CSB/BSB<sub>5</sub>/Gesamtprotein</b>	Editierbarer Anstieg und Achsenabschnitt für die Berechnung von CSB, BSB <sub>5</sub> und Gesamtproteingehalt, einsehbar auf den Tabs <b>CSB</b> , <b>BSB<sub>5</sub></b> und <b>Gesamtprotein</b>

Sehen Sie dazu auch

 Elektronische Signaturen [▶ 138]

## 9.3 Neue Ergebnistabelle anlegen

Die Software speichert Messergebnisse in Ergebnistabellen.


- ▶ Mit Menübefehl **Ergebnisse | Ergebnisse** Fenster **Ergebnisse** öffnen.
- ▶ Mit Klick auf **Hinzufügen** neue Ergebnistabelle anlegen. Die voreingestellte Bezeichnung lautet: Result table + Zeitstempel.
- ▶ Bei Bedarf die Bezeichnung in Detailansicht **Details zum Ergebnis** im Feld **Ergebnistabelle** ändern. Änderung mit Klick auf Button  speichern.

Alternativ: Neue Ergebnistabelle im Fenster **Neue Sequenz** anlegen.

- ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
- ▶ Dropdown-Menü am Button **Ergebnistabelle** öffnen.
- ▶ Mit Befehl **Neue Ergebnistabelle erstellen** neue Ergebnistabelle anlegen.
  - ✓ Die Software legt eine neue Ergebnistabelle mit der Bezeichnung Result table + Zeitstempel im Fenster **Ergebnisse** an.

## 9.4 Ergebnisse einsehen

Im Fenster **Ergebnistabelle** können Sie die in einer Ergebnistabelle gespeicherten Messergebnisse einsehen. Benutzer mit entsprechendem Recht können Ergebnisse manuell editieren.

- ▶ Mit Menübefehl **Ergebnisse | Ergebnisse** Fenster **Ergebnisse** öffnen.
- ▶ Ergebnistabelle in Tabelle **Ergebnistabellen-Übersicht** auswählen. Ausgewählte Ergebnistabelle mit Doppelklick oder Klick auf Button **Laden** öffnen.
- ▶ Messergebnisse in der Tabelle **Ergebniseinträge der Tabelle** einsehen. Bei Bedarf Ergebnisse durchsuchen oder nach Klick auf  filtern.


- ▶ Messung in Tabelle **Ergebniseinträge der Tabelle** auswählen und Ergebnisse in Detailansicht **Details eines einzelnen Ergebnisses** einsehen:
- ▶ Panel **Infos**
  - Tab **Probe**: Methodentyp und Methode, Probentyp und Probenvolumen, etc.
  - Tab **Info**: Hintergrundinformationen wie Gerätetyp oder Softwareversion
  - Tab **Methode**: Methodenparameter
  - Tab **Signaturen**: Detailinformationen zum Signaturstatus, nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul verfügbar
- ▶ Panel **Messparameter**: Ergebnisse der einzelnen Messkanäle mit mittleren Rohintegralen und Netto-Integralen, mittleren absoluten Massen, mittleren Konzentrationen und statistische Daten
- ▶ Panel **Replikate**: Ergebnisse der einzelnen Wiederholmessungen mit Messkurven und Möglichkeit, Ausreißer zu selektieren
- ▶ Panel **Berechnungsparameter**: Verdünnungsverhältnis, für die Berechnung verwendete Anzahl an Wiederholmessungen, Kalibrierparameter, Tagesfaktoren und Blindwerte, mit Möglichkeit zur manuellen Nachbearbeitung
- ▶ Optional unter **Kommentar** einen Kommentar eingeben.
- ▶ Nach Änderung Ergebnis mit Klick auf Button  speichern.

Berechnung und Anzeige von Ergebnissen

- Die Software ermittelt für jede Messkurve das Rohintegral (Brutto-Integral) in (FE).
- Die Software erkennt Ausreißer und kennzeichnet sie in den Ergebnissen. Die Software schließt Ausreißer aus der Berechnung der mittleren Integrale aus.
- Die Software berechnet auf Basis der mittleren Integrale die mittleren Konzentrationen.
- Die Software bereinigt die mittleren Integrale und mittleren Konzentrationen um die vorhandenen Blindwerte.
- Die Software berücksichtigt in der Kalibrierung hinterlegte Tagesfaktoren.
- Die Software kennzeichnet Ergebnisse, die außerhalb des kalibrierten Bereiches liegen.
- Bei entsprechender Einstellung in den Sequenzparametern verdünnt das Analysensystem hochkonzentrierte Proben automatisch oder intelligent. Für die Ergebnisse berechnet die Software die Konzentration der unverdünnten Primärprobe. Bei den angezeigten Integralen handelt es sich jedoch um die Integrale, die für die verdünnte Probe gemessen wurden.
- Bei entsprechender Einstellung in den Sequenzparametern reduziert das Analysensystem das Probenvolumen hochkonzentrierter Proben automatisch. Die Software gibt die Ergebnisse für die Messung mit Original-Probenvolumen und verringertem Volumen untereinander in der Tabelle **Ergebniseinträge der Tabelle** an.
- Die Software kennzeichnet Ergebnisse, die Sie manuell nachbearbeitet haben.

## 9.5 Ergebnisse bearbeiten

Wenn Sie über die entsprechenden Rechte verfügen, können Sie Ergebnisse im Fenster **Ergebnistabelle** nachbearbeiten.

- ▶ Mit Menübefehl **Ergebnisse | Ergebnisse** Fenster **Ergebnisse** öffnen.
- ▶ Ergebnistabelle in Tabelle **Ergebnistabellen-Übersicht** auswählen. Ausgewählte Ergebnistabelle mit Doppelklick oder Klick auf Button **Laden** öffnen.
- ▶ Ergebnisse in der Detailansicht **Details eines einzelnen Ergebnisses** bearbeiten. Dafür auf Icon  klicken.

- ▶ Bei Bedarf im Panel **Replikate** in der tabellarischen Übersicht Wiederholungsmessungen über die Checkbox aktivieren bzw. deaktivieren, um nachträglich Ausreißer zu selektieren.
- ▶ Im Panel **Berechnungsparameter** folgende Parameter prüfen und bei Bedarf ändern:
  - Verdünnungsverhältnis
  - Anzahl der minimalen Bestimmungen, die für die Berechnung der Mittelwerte herangezogen wird
  - Regressionstyp und Kalibrierkoeffizienten
  - Tagesfaktor
  - Blindwerte
  - Anstieg und Achsenabschnitt für die Berechnung von CSB, BSB<sub>5</sub> und Gesamtproteingehalt
- ▶ Nach Änderung Ergebnis mit Klick auf Button  speichern.
  - ✓ Sie haben ein Ergebnis manuell bearbeitet. Die Software kennzeichnet bearbeitete Ergebnisse.

Bei jeder Bearbeitung legt die Software eine neue Version der Ergebnisse an. Die Originaldaten bleiben erhalten. Navigieren Sie nach Klick auf Icon ... im Fenster **Ergebnisversion auswählen** in den Ergebnisversionen.

## 9.6 In Versionen bearbeiteter Ergebnisse navigieren


Wenn Sie Ergebnisse im Fenster **Ergebnistabelle** bearbeiten, legt die Software eine neue Version der Ergebnisse an. Die Originaldaten bleiben erhalten. Als Voreinstellung zeigt die Software die letzte Version der Ergebnisse.

- ▶ Mit Menübefehl **Ergebnisse | Ergebnisse** Fenster **Ergebnisse** öffnen.
- ▶ Ergebnistabelle in Tabelle **Ergebnistabellen-Übersicht** auswählen. Ausgewählte Ergebnistabelle mit Doppelklick oder Klick auf Button **Laden** öffnen.
- ▶ Ergebnis in Tabelle **Ergebniseinträge der Tabelle** auswählen.
- ▶ In Detailansicht **Details eines einzelnen Ergebnisses** mit Klick auf Icon ... Fenster **Ergebnisversion auswählen** öffnen.
- ▶ Version in Tabelle **Versionen:** auswählen.
- ▶ Version mit **Ok** öffnen.
  - ✓ Die Software zeigt eine ältere Version der bearbeiteten Ergebnisse. Version siehe Feld: **Version**.
- ▶ Aktuelle Version der Ergebnisse mit Klick auf Icon  wieder laden.

## 9.7 Mittelwert für ausgewählte Ergebnisse berechnen

Im Fenster **Ergebnistabelle** können Sie Mittelwert und Standardabweichung für ausgewählte Ergebnisse berechnen. Sie können diese Möglichkeit nutzen, um bei Feststoffmessungen Einzelbestimmungen zu einem Ergebnis zusammenzufassen.

- ▶ Mit Menübefehl **Ergebnisse | Ergebnisse** Fenster **Ergebnisse** öffnen.

- ▶ Ergebnistabelle in Tabelle **Ergebnistabellen-Übersicht** auswählen. Ausgewählte Ergebnistabelle mit Doppelklick oder Klick auf Button **Laden** öffnen.
- ▶ In tabellarischer Übersicht **Ergebniseinträge der Tabelle** gewünschte Messungen über Checkboxes aktivieren.
- ▶ Mit Klick auf  Bereich **Statistik**: ausklappen.
  - ✓ Die Software berechnet für die ausgewählten Messungen mittleres Integral und mittlere, minimale und maximale Konzentration. Die Software zeigt die Ergebnisse im Bereich **Statistik**: an.

## 9.8 Ergebnisse importieren und exportieren



### Ergebnisse importieren

Importieren Sie Ergebnisse im XML-Format wie folgt:

- ▶ Mit Menübefehl **Ergebnisse | Ergebnisse** Fenster **Ergebnisse** öffnen.
- ▶ Ergebnistabelle in Tabelle **Ergebnistabellen-Übersicht** auswählen. Ausgewählte Ergebnistabelle mit Doppelklick oder Klick auf Button **Laden** öffnen.
- ▶ Auf **Import** klicken.
- ▶ Im Fenster **Öffnen** in der Windows-Dateiverwaltung Ergebnis-Dateien im XML-Format auswählen.
- ▶ Auf **Öffnen** klicken.
  - ✓ Die Software importiert die Ergebnisse in die geöffnete Ergebnistabelle.

### Ergebnisse exportieren

Exportieren Sie Ergebnisse im XML- oder CSV-Format wie folgt:

- ▶ Für CSV-Export: Exportumfang im Fenster **Software-Einstellungen**, Tab **Speicherung, Export und Report** prüfen und bei Bedarf anpassen.
  - Fenster **Software-Einstellungen**, Tab **Speicherung, Export und Report** mit Menübefehl **Programm | Einstellungen** öffnen.
  - Exportumfang bei Bedarf einschränken. Dafür Einträge aus Listbox **Verwendet**: mit Klick auf Icon  entfernen.
  - Exportumfang erweitern. Dafür Einträge aus Listbox **Vorschläge**: in Listbox **Verwendet**: mit Klick auf Icon  übernehmen.
- ▶ Mit Menübefehl **Ergebnisse | Ergebnisse** Fenster **Ergebnisse** öffnen.
- ▶ Ergebnistabelle in Tabelle **Ergebnistabellen-Übersicht** auswählen. Ausgewählte Ergebnistabelle mit Doppelklick oder Klick auf Button **Laden** öffnen.
- ▶ In tabellarischer Übersicht **Ergebniseinträge der Tabelle** gewünschte Messungen über Checkboxes aktivieren.
- ▶ Auf **Export** klicken.
- ▶ Speicherort im Fenster **Speichern unter** auswählen. Voreingestellter Exportordner: *C:/ProgramData/Analytik-Jena/multiWinPro/export/results*.
- ▶ Dateiname bei Bedarf anpassen.
- ▶ Exportformat unter **Dateityp** wählen: XML oder CSV.
- ▶ Auf **Speichern** klicken.
  - ✓ Die Software exportiert die ausgewählten Ergebnisse und fasst sie in einer XML- bzw. CSV-Datei zusammen.

**Sehen Sie dazu auch**

 Export- und Reporteinstellungen festlegen [▶ 39]

## 9.9 Ergebnisreport drucken und speichern

### Report drucken

- ▶ Mit Menübefehl **Ergebnisse | Ergebnisse** Fenster **Ergebnisse** öffnen.
- ▶ Ergebnistabelle in Tabelle **Ergebnistabellen-Übersicht** auswählen. Ausgewählte Ergebnistabelle mit Doppelklick oder Klick auf Button **Laden** öffnen.
- ▶ In tabellarischer Übersicht **Ergebniseinträge der Tabelle** gewünschte Messungen über Checkboxes aktivieren.
- ▶ Mit Klick auf **Report** Druckvorschau öffnen.
- ▶ Für eine bessere Übersicht mit Klick auf Button **Navigator** den Navigationsbereich mit einer Seitenübersicht links neben dem Report einblenden. Ansicht mit Klick auf **Vergrößern** und **Verkleinern** vergrößern bzw. verkleinern.
- ▶ Druckumfang über Checkboxes im Fenster **Report** festlegen:
  - **Zusammenfassung** (Kurzform)  
Übersichtstabelle aller Messungen und Messergebnisse am Beginn des Reports drucken
  - **Messergebnisse**  
Übersichtstabelle mit Proben-ID, Messverfahren und Probenvolumen anzeigen  
Bei Aktivierung der Checkbox schaltet die Software die folgenden drei Checkboxes frei.
  - **Metadaten**  
Metadaten der einzelnen Messungen anzeigen
  - **Parameterdaten**  
Ergebnisse (Mittelwerte) der einzelnen Messparameter anzeigen
  - **Replikate**  
Messergebnisse der einzelnen Wiederholmessungen anzeigen
  - **Diagramme**  
Graphische Darstellung der Messkurven für alle Messungen, Messkanäle und Wiederholmessungen ergänzen  
Die Software schaltet die Checkbox nur frei, wenn die Checkbox **Parameterdaten** aktiviert ist.
- ▶ Firmenlogo in Report ergänzen. Nach Klick auf Button **Laden** im Bereich **Report-Logo** Logo in Windows-Dateiverwaltung auswählen und mit **Öffnen** in Report laden.
- ▶ Nach Klick auf **Drucker-Optionen** Drucker einrichten.
- ▶ Nach Klick auf **Seite einrichten** Seiteneinstellungen wie Seitengröße oder Seitenausrichtung festlegen. Voreinstellung: A4, Hochformat. Layout auf aktuelle Seite oder alle Report-Seiten anwenden.
- ▶ Druck mit Klick auf **Drucken** starten.

### Report speichern

- ▶ Ergebnistabelle öffnen.
- ▶ In tabellarischer Übersicht **Ergebniseinträge der Tabelle** gewünschte Messungen über Checkboxes aktivieren.
- ▶ Mit Klick auf **Report** Druckvorschau öffnen.
- ▶ Druckumfang und Logo festlegen.



- ▶ Nach Klick auf **Speichern** Dateiname, Speicherverzeichnis und Dateityp im Fenster **Speichern unter** festlegen.
- ▶ Report mit Klick auf Button **Speichern** speichern.

Sie können Reporte in folgenden Dateiformaten speichern: PDF (voreingestellt), RTF, HTML, TXT, FP3.

Wenn Sie Ergebnisse bearbeiten, werden die Änderungen erst nach dem Speichern in den Report übernommen.

## 10 Menü Gerät

Über das Menü **Gerät** können Sie das Analysensystem außerhalb des Messablaufs steuern und die Gerätekonfiguration verwalten.

Im Menü Gerät

- Mit **Initialisieren** können Sie das Analysensystem initialisieren. Über die Menübefehle **Standby** und **Ausschalten** können Sie das Analysensystem in Standby schalten oder herunterfahren.
- Sie können den Gasfluss in Messpausen über die Menübefehle **Gasfluss ausschalten** und **Gasfluss anschalten** aus- und wieder anschalten.
- Nach Klick auf **Justierung Autosampller** können Sie den Probengeber im Fenster **Justierung Autosampller** justieren.
- Nach Klick auf **Geräte verwalten** können Sie im Fenster **Geräte verwalten** Gerätekonfigurationen neu anlegen, ändern und verwalten. Außerdem haben Sie über das Kontextmenü Zugriff auf die in der Software für die Gerätekonfiguration gespeicherten Blindwerte.
- Nach Klick auf **Manuelle Einzelansteuerung** können Sie das Analysensystem im Fenster **Manuelle Einzelansteuerung** auf die Wartung vorbereiten oder spülen.
- Nach Klick auf **Gerätekomponententest** können Sie im Fenster **Gerätekomponententest** nach Rücksprache mit dem Kundendienst Ventile und Baugruppen einzeln ansteuern und sensorspezifische Daten für die Detektoren abrufen.

### 10.1 Fenster Justierung Autosampller

Sie öffnen das Fenster über den Menübefehl **Gerät | Justierung Autosampller**.

Im Fenster **Justierung Autosampller** justieren Sie den Probengeber, damit er die verschiedenen Positionen auf dem Probengeber bzw. das Probenaufgabesystem des Analysators richtig anfahren kann.



---

#### HINWEIS

##### Gefahr von Geräteschäden

Wenn der Probengeber nicht oder falsch justiert ist, kann das Probenaufgabewerkzeug im Betrieb auf einer harten Oberfläche aufstoßen. Dabei kann das Probenaufgabewerkzeug und der Antrieb zerstört werden.

- Justieren Sie den Probengeber vor der ersten Bedienung und nach jedem Umbau sowie nach Transport und Lagerung.
-

Layout des Fensters

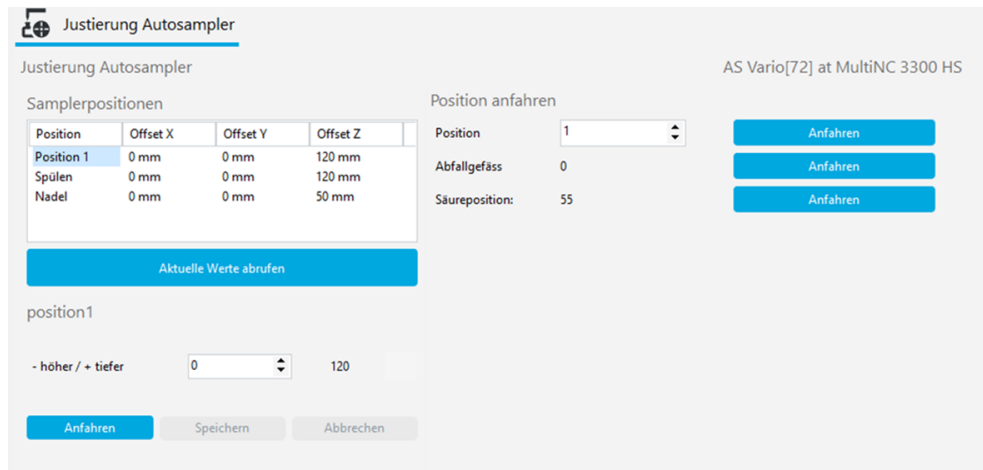


Abb. 36 Fenster Justierung Autosampler

Bereich	Beschreibung
Justierung Auto-sampler (oben links)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Listbox mit Justierpositionen und Offset-Werten in X, Y, Z Richtung.</li> <li>Justierposition aus Listbox auswählen</li> <li>Mit Button <b>Aktuelle Werte abrufen</b> aktuelle Offset-Werte abfragen</li> </ul>
Bereich zur schrittweisen Justierung (unten links)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Mit - <b>nach hinten</b> / + <b>nach vorn</b> Probengeberarm vor oder zurück bewegen (nicht bei allen Probengebern)</li> <li>Mit - <b>links</b> / + <b>rechts</b> Probengeberarm nach links oder rechts bewegen (nicht bei allen Probengebern)</li> <li>Mit - <b>höher</b> / + <b>tiefer</b> Probengeberarm bzw. Kolben nach oben oder unten bewegen</li> <li>Mit Button <b>Anfahren</b> Position nach Änderungen anfahren</li> <li>Mit Button <b>Speichern</b> justierte Position speichern</li> <li>Mit Button <b>Abgebrochen</b> Justierung abbrechen und zu den Ausgangswerten zurückkehren</li> </ul> <p>Sie justieren die Position, auf die der Probengeberarm bewegt wird. Beim Kolben justieren Sie die Strecke, die der Kolben bewegt wird. Die Kolbenjustierung kann mit <b>Abgebrochen</b> nicht abgebrochen werden.</p>
Bereich <b>Position anfahren</b> (rechts)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Auswahl von Positionen zum Prüfen der Justierung durch Anfahren</li> <li>Mit Button <b>Anfahren</b> Position zur Prüfung anfahren</li> </ul>

Sehen Sie dazu auch

📖 Probengeber justieren [▶ 123]

## 10.2 Fenster Geräte verwalten

Sie öffnen das Fenster **Geräte verwalten** über Menübefehl **Gerät | Geräte verwalten**.

Im Fenster **Geräte verwalten** verwalten Sie Gerätekonfigurationen.

Im Fenster Geräte verwalten

- Nach Klick auf **Hinzufügen** können Sie eine neue Gerätekonfiguration anlegen, beispielsweise für Flüssig- bzw. Feststoffmessungen.
- Mit Klick auf **Default setzen** aktivieren Sie eine Gerätekonfiguration als Standardkonfiguration. Die Software passt die Auswahlmöglichkeiten bei Methoden und Sequenzen an die aktive Konfiguration an.
- Mit **löschen** löschen Sie eine ausgewählte Gerätekonfiguration.
- Das optionale FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul verhindert das Löschen von Daten.

- Mit **Gruppe zuweisen** ordnen Sie Gerätekonfigurationen im Fenster **Gruppe auswählen** in Gruppen.
- Mit Menübefehl **Blindwerte** (im Kontextmenü) öffnen Sie das Fenster **Blindwerte**. Hier können Sie für die Gerätekonfiguration gespeicherte Blindwerte einsehen und global ändern.

Layout des Fensters

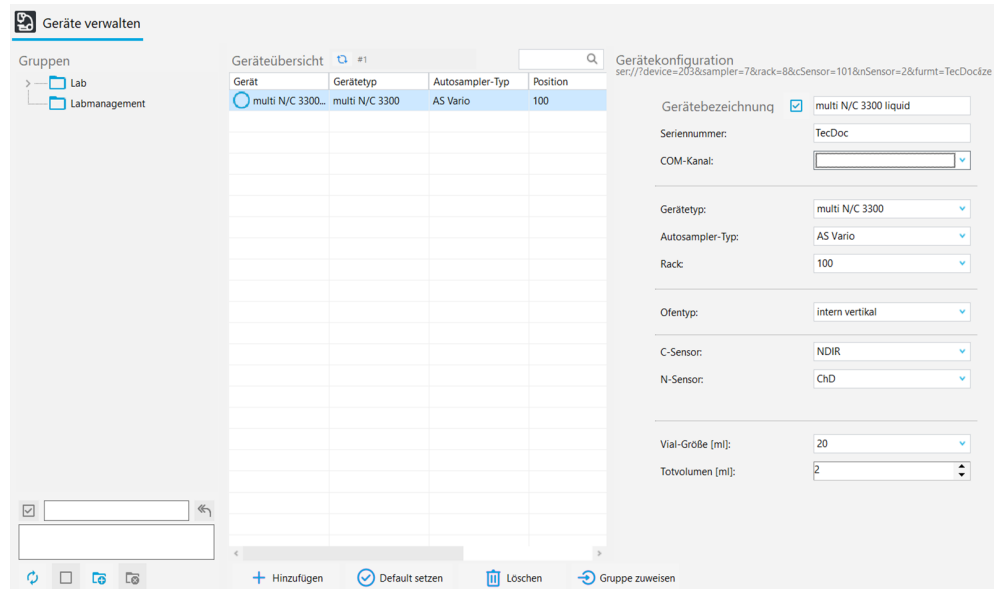


Abb. 37 Fenster Geräte verwalten

Bereich	Beschreibung
Gruppen (links)	Gruppenverwaltung
Geräteübersicht (Mitte)	Tabellarische Übersicht mit Angaben: <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Gerätebezeichnung</li> <li>■ Gerätetyp</li> <li>■ Probengeber</li> <li>■ Probenblett</li> <li>■ Detektoren</li> </ul> Die aktive Gerätekonfiguration ist gekennzeichnet.
Gerätekonfiguration (Rechts)	Detailansicht für ausgewählte Gerätekonfiguration mit editierbaren Einstellungen

Detailansicht Gerätekonfiguration

In der Detailansicht können Sie Gerätekonfigurationen einsehen und bearbeiten.

Option	Beschreibung
Gerätebezeichnung	Bezeichnung für Gerätekonfiguration festlegen Die voreingestellte Bezeichnung lautet: NewDevice_Zeitstempel.
Seriennummer:	Seriennummer des Analysators Die Software übernimmt die Seriennummer bei der Lizenzierung automatisch in das Feld. Die Seriennummer ist nicht änderbar.
COM-Kanal:	Schnittstelle des PCs zum Analysator aus Dropdown-Menü auswählen Bei Bedarf COM-Port im Windows-Gerätanager einsehen
Gerätetyp	Gerätmodell aus Dropdown-Menü auswählen
Autosampler-Typ:	Probengeber aus Dropdown-Menü auswählen

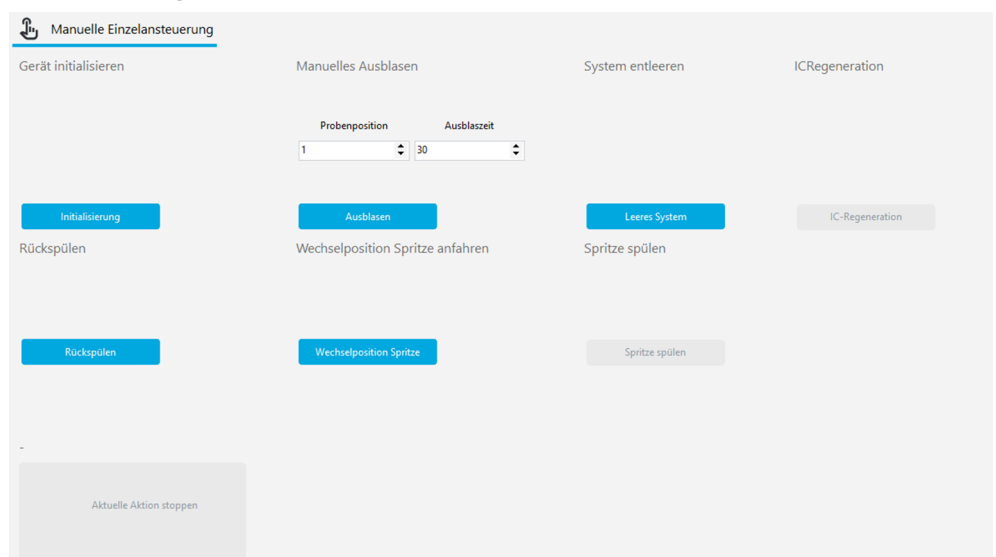
Option	Beschreibung
<b>Rack:</b>	Probentablett aus Dropdown-Menü auswählen
<b>Ofentyp:</b>	Option <b>intern vertikal</b> Für Flüssigmessungen mit Hochtemperaturoxidation wählen Option <b>UV-Reaktor</b> Für Flüssigmessungen mit UV-Oxidation wählen Option <b>intern horizontal</b> Für Feststoffmessungen mit internem Feststoffmodul wählen Option <b>extern</b> Für manuelle oder automatisierte Feststoffmessungen mit externem Feststoffmodul wählen
<b>C-Sensor:</b>	Kohlenstoffdetektor aus Dropdown-Menü auswählen
<b>N-Sensor:</b>	Stickstoffdetektor aus Dropdown-Menü auswählen: <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <b>ChD</b> für elektrochemische Detektion mit internem ChD</li> <li>▪ <b>CLD</b> für Chemolumineszenzdetektion mit externem CLD</li> </ul>
<b>Vial-Größe [ml]:</b>	Volumen der Probengefäße aus Dropdown-Menü auswählen
<b>Totvolumen [ml]:</b>	Voreingestelltes Totvolumen der Probengefäße einsehen und bei Bedarf anpassen
Checkbox <b>Automatische Verdünnung</b>	Automatische Verdünnungsoption aktivieren (wird nur bei Auswahl ausgewählter Probengeber mit Verdünnungstablett angezeigt)

Sehen Sie dazu auch

 Neue Gerätekonfiguration anlegen [\[▶ 123\]](#)

## 10.3 Fenster Manuelle Einzelansteuerung

Sie öffnen Fenster **Manuelle Einzelansteuerung** mit Menübefehl **Gerät | Manuelle Einzelansteuerung**.



**Abb. 38** Fenster Manuelle Einzelansteuerung

Im Fenster **Manuelle Einzelansteuerung** können Sie das Analysensystem außerhalb des Messablaufs steuern und auf die Wartung vorbereiten.

Bereich	Beschreibung
<b>Gerät initialisieren</b>	Das Gerät mit Klick auf <b>Initialisieren</b> initialisieren Das TIC-Kondensatgefäß wird dabei abgepumpt und neu befüllt.
<b>Manuelles Ausblasen</b>	NPOC-Ausblasen aktivieren, um z. B. NPOC-Ausblasfluss einzustellen <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Im Probengeberbetrieb Probenposition bei <b>Probenposition</b> wählen</li> <li>▪ Ausblaszeit bei <b>Ausblaszeit</b> festlegen</li> <li>▪ Ausblasen mit Klick auf <b>Ausblasen</b> starten</li> </ul>
<b>System entleeren</b>	Mit Klick auf <b>System entleeren</b> TIC-Kondensatgefäß abpumpen und Spritzenpumpe in Ausgangszustand bringen
<b>Reaktor-Regeneration</b>	Mit Klick auf <b>Reaktor-Regeneration</b> TIC-Kondensatgefäß mit Phosphorsäure spülen und mit Trägergas ausblasen (bei Analysatoren mit Direktinjektion)
<b>Rückspülen</b>	Mit Klick auf <b>Rückspülen</b> Schläuche des Probenaufgabesystems mit Reinstwasser rückspülen, Spülflüssigkeit in Spülgefäß des Probengebers bzw. in Abfallgefäß zurückspülen (bei Analysatoren mit Fließinjektion)
<b>Wechselposition Spritze anfahren</b>	Mit Klick auf <b>Wechselposition anfahren</b> Spritzenpumpe des Analysators vollständig entleeren und Kolben in Wechselposition fahren (bei Analysatoren mit Fließinjektion)
<b>Spritze spülen</b>	Mit Klick auf <b>Spritze spülen</b> Dosierspritze des Probengebers spülen und in Abfallposition entleeren (bei Analysatoren mit Direktinjektion)
<b>Aktuelle Aktion stoppen</b>	Mit Klick auf <b>Aktuelle Aktion stoppen</b> laufende Aktion abbrechen

## 10.4 Fenster Gerätekomponententest

Sie öffnen das Fenster **Gerätekomponententest** über den Menübefehl **Gerät | Gerätekomponententest**.

Im Fenster **Gerätekomponententest** können Sie Ventile und Baugruppen einzeln ansteuern und sensorspezifische Daten für die Detektoren abrufen.

- Nutzen Sie die Funktionen nur nach Rücksprache mit dem Kundendienst.
- Stellen Sie die abgerufenen Daten und Testergebnisse dem Kundendienst zur Beurteilung bereit.

Layout des Fensters

Bereich	Beschreibung
<b>Ventile (links)</b>	Einzelansteuerung von Ventilen und Baugruppen <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Mit Klick auf Button <b>Start</b> Bereich aktivieren. Mit Klick auf <b>Stop</b> Bereich wieder deaktivieren.</li> <li>▪ Nach Rücksprache mit Kundendienst Ventil oder Baugruppe auswählen und mit Toggle Switch <b>An/Aus</b> aktivieren bzw. deaktivieren.</li> </ul>
<b>Optische Bank (Mitte)</b>	Zur Überprüfung des Zustands des Kohlenstoffdetektors Analogwerte abrufen und sensorspezifische Daten berechnen <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Mit Klick auf Button <b>Start</b> Datenabruf im Bereich <b>Analog</b> starten. Datenberechnung im Bereich <b>Berechnet</b> starten.</li> <li>▪ Mit Klick auf <b>Stop</b> Datenabruf bzw. Datenberechnung beenden.</li> <li>▪ Mit Klick auf Button <b>Nullpunktabgleich</b> Basislinie neu ermitteln.</li> </ul>
<b>CLD (rechts)</b>	Zur Überprüfung des Zustands des Stickstoffdetektors sensorspezifische Daten abrufen <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Mit Klick auf Button <b>Start</b> Datenabruf starten.</li> <li>▪ Mit Klick auf <b>Stop</b> Datenabruf beenden.</li> </ul>

Wenn Sie das Fenster **Gerätekomponententest** schließen, stoppt die Software automatisch alle laufenden Komponententests.

Während eines laufenden Komponententests aktualisiert die Software die Anzeigen im Panel **Gerätstatus** nicht.

## 10.5 Probengeber justieren



### HINWEIS

#### Gefahr von Geräteschäden

Wenn der Probengeber nicht oder falsch justiert ist, kann das Probenaufgabewerkzeug im Betrieb auf einer harten Oberfläche aufstoßen. Dabei kann das Probenaufgabewerkzeug und der Antrieb zerstört werden.

- Justieren Sie den Probengeber vor der ersten Bedienung und nach jedem Umbau sowie nach Transport und Lagerung.
- 
- ▶ Mit Menübefehl **Gerät | Justierung Autosampl**er Fenster **Justierung Autosampl**er aufrufen.
  - ▶ Justierposition aus Listbox im Bereich **Samplerpositionen** auswählen.
  - ▶ Detaillierte Information zu Justierung und Justierpositionen in Bedienungsanleitung des Analysators einsehen.
  - ▶ Mit Klick auf Button **Aktuelle Werte abrufen** aktuelle Offset-Werte abfragen.
  - ▶ Offset-Werte für **- nach hinten / + nach vorn**, **- links / + rechts** und **- höher / + tiefer** schrittweise anpassen.
  - ▶ Nach jeder Änderung mit Klick auf Button **Anfahren** Position anfahren und prüfen.
  - ▶ Justierte Position mit **Speichern** speichern.
  - ▶ Abschließend Justierung des Probengebers prüfen:
    - Position im Bereich **Position anfahren** auswählen.
  - ▶ Dabei justierte Positionen und weitere Positionen wie Säureposition prüfen.
    - Positionen mit Klick auf **Anfahren** anfahren.
  - ▶ Justierung bei Bedarf noch einmal anpassen und speichern.
    - ✓ Sie haben den Probengeber justiert und können erste Messungen starten.

## 10.6 Neue Gerätekonfiguration anlegen

Im Fenster **Geräte verwalten** können Sie Gerätekonfigurationen anlegen, z. B. für Flüssig- bzw. Feststoffmessungen.

Sie können eine Gerätekonfiguration als Standardkonfiguration aktivieren. Die Software passt die Auswahlmöglichkeiten bei Methoden und Sequenzen an die aktive Gerätekonfiguration an.

- ▶ Mit Menübefehl **Gerät | Geräte verwalten** Fenster **Geräte verwalten** aufrufen.
- ▶ Mit Klick auf **Hinzufügen** neue Gerätekonfiguration anlegen.
- ▶ Unter **Gerätebezeichnung** Gerätekonfiguration benennen. Die voreingestellte Bezeichnung lautet: `NewDevice_Zeitstempel`

- ▶ Unter **Seriennummer**: trägt die Software bei der Lizenzierung automatisch die Seriennummer ein. Seriennummer prüfen.
- ▶ Im Dropdown-Menü bei **COM-Kanal**: die Schnittstelle zum Analysator auswählen. Bei Bedarf COM-Port im Windows-Gerätemanager einsehen.
- ▶ Im Dropdown-Menü bei **Gerätetyp** Gerätemodell auswählen.
- ▶ Bei **Autosampler-Typ**: und **Rack**: Probengeber und Probentablett auswählen.
- ▶ UV-Reaktor, internen Ofen oder externen Ofen aus Dropdown-Menü bei **Ofentyp**: wählen.

Dropdown-Menü	Optionen
<b>Ofentyp:</b>	Option <b>intern vertikal</b> Für Flüssigmessungen mit Hochtemperaturoxidation wählen  Option <b>UV-Reaktor</b> Für Flüssigmessungen mit UV-Oxidation wählen  Option <b>intern horizontal</b> Für Feststoffmessungen mit internem Feststoffmodul wählen  Option <b>extern</b> Für manuelle oder automatisierte Feststoffmessungen mit externem Feststoffmodul wählen

- ▶ Detektoren in den Dropdown-Menüs **C-Sensor**: und **N-Sensor**: auswählen.
- ▶ Volumen der Probengefäße aus Dropdown-Menü **Vial-Größe [ml]**: auswählen. Die Software passt das Totvolumen entsprechend an. Optional Totvolumen bei **Totvolumen [ml]**: anpassen.
- ▶ Gerätekonfiguration mit Klick auf Button  speichern.
- ▶ Gerätekonfiguration aus Tabelle **Geräteübersicht** auswählen und mit Klick auf **Default setzen** als Standardkonfiguration aktivieren. Alternativ Gerätekonfiguration durch Doppelklick aktivieren.
- ▶ Nach jeder Änderung an Gerätekonfigurationen Software neu starten.
  - ✓ Sie haben eine neue Gerätekonfiguration angelegt und aktiviert.

## 10.7 Blindwerte in der Gerätekonfiguration ändern

Die Software speichert Blindwerte unabhängig von der Methode. Sie können die in der Software gespeicherten Blindwerte im Fenster **Geräte verwalten** einsehen. Wenn Sie über das entsprechende Recht verfügen, können Sie die Blindwerte in der Gerätekonfiguration editieren. Die Änderungen gelten softwareübergreifend.

- ▶ Mit Menübefehl **Gerät | Geräte verwalten** Fenster **Geräte verwalten** aufrufen.
- ▶ Gerätekonfiguration in der Tabelle **Geräteübersicht** auswählen.
- ▶ Kontextmenü mit Rechtsklick öffnen und Befehl **Blindwerte** wählen.
- ▶ Blindwerte im Fenster **Blindwerte** auf den unterschiedlichen Tabs einsehen.
- ▶ Bei Bedarf Blindwerte nach Klick auf Icon  editieren.
- ▶ Änderungen mit Klick auf Button **Ok** bestätigen.
  - ✓ Die geänderten Blindwerte gelten softwareübergreifend.



# 11 Menü Ansicht

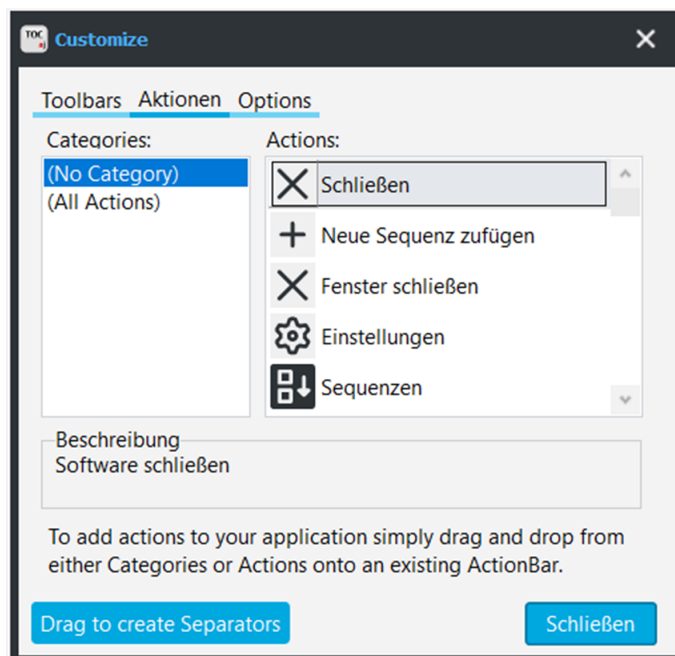
Über das Menü **Ansicht** können Sie die Ansicht der Programmoberfläche anpassen. Der Kundendienst kann hier auf den Passwort gesicherten Servicemodus zugreifen.

Im Menü Ansicht

- Über den Menübefehl **Fenster** können Sie ausgedockte Dialogfenster im Vordergrund anordnen.
- Nach Klick auf **Aktionen anpassen** können Sie im Fenster **Aktionen anpassen** Menüleiste und Werkzeugleiste anpassen.
- Mit Klick auf **Service-Desktop** kann der Kundendienst den passwortgeschützten Servicemodus mit Diagnose- und Wartungsfunktionen öffnen.

## 11.1 Werkzeugleiste anpassen

Im Fenster **Aktionen anpassen** können Sie die Ansicht der Werkzeugleiste anpassen.



**Abb. 39** Fenster Customize

- ▶ Mit dem Menübefehl **Ansicht | Aktionen anpassen** Fenster **Aktionen anpassen** öffnen.
- ▶ Auf Tab **Toolbars** Werkzeugleiste über Checkbox ein- oder ausblenden.
- ▶ Über Dropdown-Menü im Bereich **Toolbar Options** neben jedem Icon Menübefehl ein- oder ausblenden.
- ▶ Auf Tab **Aktionen** Icons auswählen, die in Werkzeugleiste angezeigt werden sollen. Icon aus Listbox **Aktionen** auswählen und mit gedrückter Maustaste in Werkzeugleiste ziehen.
- ▶ Bei Bedarf auf **Drag to create Separators** klicken und Trennstriche mit gedrückter Maustaste an gewünschte Stelle in Werkzeugleiste ziehen.
- ▶ Auf Tab **Options** Checkbox bei **Menu shows recently used items first** aktivieren, um die zuletzt genutzten Menüs zuerst in Menüleiste anzuordnen.
- ▶ Im Bereich **Other** Icons bei Bedarf vergrößern. Tooltips und Shortcut Keys ein- oder ausblenden. Die Menü-Animation personalisieren.

- ▶ Zum Entfernen von Einträgen aus Werkzeugleiste:  
Bei geöffnetem Fenster **Aktionen anpassen** Icon bzw. Menübefehl mit gedrückter Maustaste aus Werkzeugleiste ziehen.
- ▶ Zum Entfernen von Trennstrichen:
  - Trennstrich anklicken. Der Trennstrich ist ausgewählt, wenn er durch ein Rechteck hervorgehoben wird.
  - Trennstrich mit gedrückter Maustaste aus Werkzeugleiste ziehen.
- ▶ Fenster **Aktionen anpassen** mit **Schließen** schließen.
  - ✓ Sie haben Menü- und Werkzeugleiste angepasst.

## 12 Menü Hilfe

Im Menü **Hilfe** finden Sie Hilfe bei Bedienproblemen und Fehlern. Sie können Informationen über die Software abrufen und die Lizenzierung neuer Softwaremodule durchführen.

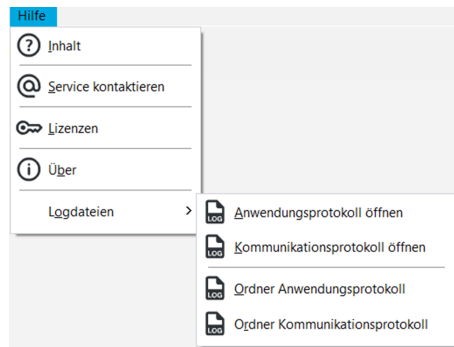


Abb. 40 Menü Hilfe

Im Menü Hilfe

- Sie öffnen mit Menübefehl **Inhalt** die Softwarehilfe.
- Nach Klick auf **Service kontaktieren** erstellt die Software automatisch eine Mailvorlage, mit der Sie den Kundendienst im Fehlerfall kontaktieren können.
- Sehen Sie nach Klick auf **Lizenzen** im Fenster **Lizenz-Management** die Software-Lizenzierung ein. Lizenzieren Sie bei Bedarf weitere Softwaremodule. Beim Erwerb der Module erhalten Sie die benötigten Lizenzcodes.
- Sehen Sie mit Menübefehl **Über multiWin pro** Informationen über die Software wie Softwareversion, Copyrights, Lizenzen oder Kontaktdaten ein.
- Öffnen Sie über die Menübefehle **Hilfe | Logdateien | Ordner Anwendungsprotokoll** und **| Ordner Kommunikationsprotokoll** die Ordner mit den Log-Dateien. Fügen Sie für die Fehleranalyse durch den Kundendienst die aktuellen Log-Dateien als Anhang an Ihre Mail an.

## 13 FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul

Das optionale FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul sorgt für vollständige Datenintegrität und ist konform zu den Pharmarichtlinien 21 CFR Part 11.

Schutz elektronischer Aufzeichnungen	Das optionale Softwaremodul schützt die elektronischen Aufzeichnungen und sichert die Vertraulichkeit der Daten. Dafür nutzt das Softwaremodul einen zentralen CDM-Service mit einem CDM-Server oder einem DBMS (Datenbankmanagementsystem) im lokalen, unternehmensinternen Netzwerk und CDM-Clients auf den Messplatzrechnern. <i>CDM</i> steht für Central Data Management. CDM-Service und Clients kommunizieren verschlüsselt über eine RESTful API Schnittstelle. Bei nur einem Client kann der CDM-Server alternativ auf dem lokalen Rechner installiert werden.
Benutzerverwaltung	Mithilfe der Benutzerverwaltung begrenzt das Softwaremodul den Zugriff auf die Software und ausgewählte Softwarefunktionen auf autorisierte Personen. Die Benutzerverwaltung erfolgt zentral; Änderungen betreffen alle Clients.
Audittrail	Die Software generiert Audittrails, die mit Zeitstempel jeden Zugriff und jede Änderung am System dokumentieren.
Elektronische Signatur	Im Softwaremodul ist eine mehrstufige Prüfung und Freigabe von Daten (Methoden, Kalibrierungen, Ergebnisse) verpflichtend. Mithilfe von elektronischen Signaturen können die Unterzeichner zweifelsfrei identifiziert werden.
Systemeignungstest (SST)	Der Systemeignungstest (SST) ist für die Qualitätssicherung für die TOC bzw. NPOC-Bestimmung im Pharmabereich vorgesehen und ist nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul möglich. Der Test prüft die Geräteeignung für die Messung schwer oxidierbarer organischer Substanzen ( <i>p</i> -Benzochinon) im Vergleich zu Saccharose. Bei der Arbeit gemäß JP 17 2.59 untersuchen Sie die Oxidierbarkeit von Natriumdodecylbenzolsulfonat im Vergleich zu Kaliumhydrogenphthalat.

### Sehen Sie dazu auch

 Audittrail einsehen, drucken oder exportieren [▶ 135]

## 13.1 Benutzerverwaltung im FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul

### 13.1.1 Benutzer und Benutzerrollen

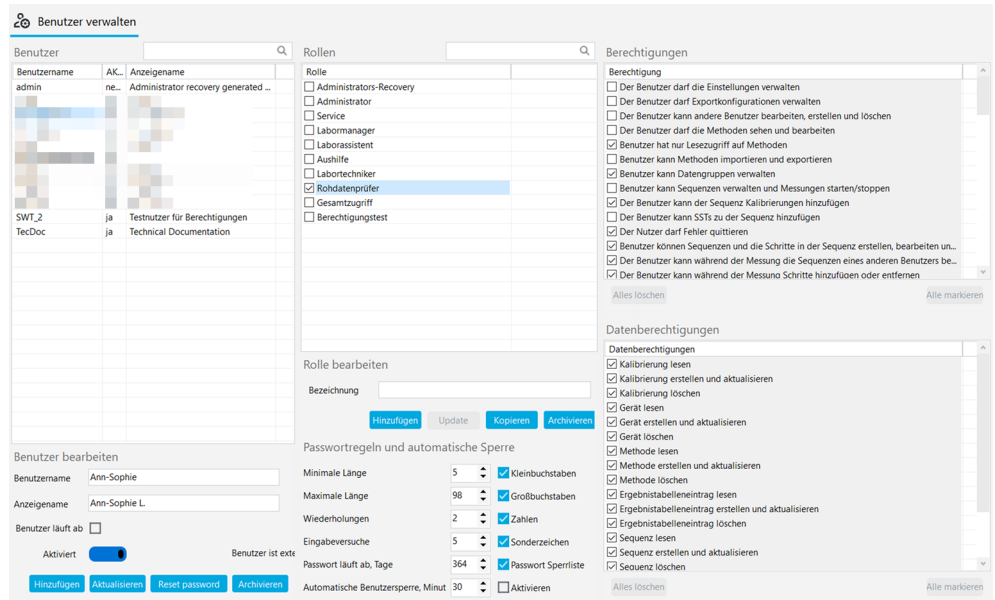
Erste Anmeldung	<p>Bei der ersten Anmeldung nach der Software-Installation richten Sie die Verbindung zum CDM-Server ein. Dabei legen Sie einen Benutzer mit Administratorrechten und Initialpasswort an. Nach der Anmeldung erscheint der Dialog, zum Ändern des Initialpasswortes.</p> <p>Der Administrator kann in der Benutzerverwaltung weitere Benutzer einrichten.</p> <p>Empfehlung: Richten Sie in der Benutzerverwaltung einen Benutzer mit der Rolle <b>Administrators-Recovery</b> ein. Verwenden Sie diesen Benutzer, um das Administratorprofil bei Passwortverlust wiederherzustellen. Profile können durch Analytik Jena nicht wiederhergestellt werden.</p>
-----------------	--

## Benutzerverwaltung

Sie öffnen die Benutzerverwaltung mit Menübefehl **Programm | Benutzer verwalten**.

Das Fenster **Benutzer verwalten** zeigt eine Übersicht aller Benutzer und Benutzerrollen mit ihren Zugriffsrechten.

Als Administrator können Sie neue Benutzer und Benutzerrollen anlegen. Dabei können Sie neuen Benutzerrollen individuelle Zugriffsrechte gewähren.



**Abb. 41 Fenster Benutzer verwalten**

Benutzer

Bei Auswahl eines Benutzers in Tabelle **Benutzer** können Sie die Einstellungen seines Benutzerprofils einsehen und bearbeiten. Nutzen Sie dafür die Eingabefelder, Checkboxes und Buttons im Bereich **Benutzer bearbeiten**.

Checkbox/Feld/ Button	Beschreibung
<b>Benutzername</b>	Name des Benutzers für Anmeldung im System festlegen
<b>Anzeigename</b>	Benutzername für Anzeige in Statuszeile, Signatur und Report festlegen
<b>Benutzer läuft ab</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Checkbox aktivieren, wenn der Benutzer nur begrenzt gültig sein soll</li> <li>Im Kalender bei <b>Datum</b> den letzten Gültigkeitstag auswählen</li> </ul> <p>Nach Ablauf des Benutzers ist keine Anmeldung im System mehr möglich. Ein Administrator kann den Benutzer wieder aktivieren und ein neues Ablaufdaten festlegen.</p>
<b>Aktiviert/Deaktiviert</b>	<p>Wenn aktiviert, kann sich der Benutzer in Software anmelden</p> <p>Wenn deaktiviert, ist das Benutzerprofil für die Verwendung gesperrt</p>
<b>Benutzer ist extern</b>	<p>Wenn aktiviert, kann sich der Benutzer durch ein externes technisches System mittels LDAP anmelden (nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul)</p> <p>LDAP steht für Lightweight Directory Access Protocol. Mithilfe des Protokolls können Organisationen Benutzerdaten speichern und verwalten.</p>
<b>Hinzufügen</b>	<p>Neuen Benutzer nach Eingabe von Benutzernamen, etc. hinzufügen</p> <p>Nach Klick auf <b>Hinzufügen</b> zeigt die Software unterhalb der Tabelle das Initialpasswort für die erste Anmeldung des Benutzers an.</p>
<b>Aktualisieren</b>	Bestehenden Benutzer nach Auswahl in Tabelle <b>Benutzer</b> und Editieren der Felder aktualisieren

Checkbox/Feld/ Button	Beschreibung
Passwort zurückgesetzt	Passwort des Benutzers zurücksetzen Die Software zeigt unterhalb der Tabelle ein neues Initialpasswort an.

Bei Auswahl eines Benutzers in der Tabelle **Benutzer** zeigt die Software in Tabelle **Rollen**, welcher Benutzerrolle der Benutzer zugeordnet ist.

Ein Benutzer kann mehrere Benutzerrollen haben. Der Benutzer verfügt dann über die Zugriffsrechte all dieser Benutzerrollen.

Benutzerrollen

Die Tabelle **Rollen** zeigt eine Übersicht der Benutzerrollen. Nach Auswahl einer Benutzerrolle können Sie die Zugriffsrechte einsehen.

	Beschreibung
Checkbox	Checkbox aktivieren, um dem ausgewählten Benutzer eine Benutzerrolle zuzuordnen

Nutzen Sie für die Bearbeitung der Benutzerrollen das Eingabefeld und die Buttons im Bereich **Rolle bearbeiten**.

Feld/Button	Beschreibung
Hinzufügen	Neue Benutzerrolle nach Eingabe eines Rollennamens hinzufügen
Aktualisieren	Eigene Benutzerrolle nach Änderung der Rollenbezeichnung aktualisieren Änderungen an den Rechteinstellungen müssen nicht gespeichert werden.
Kopie	Benutzerrolle kopieren
Archivieren	Ausgewählte Benutzerrolle nach Sicherheitsabfrage archivieren Archivierte Benutzerrollen können nicht wiederhergestellt werden. Die Archivierung ist nur für Benutzerrollen möglich, denen kein Benutzer zugeordnet ist.


In der Software sind Benutzerrollen mit abgestuften Zugriffsrechten vorangelegt.

- Sie können die Zugriffsrechte von vorangelegten Benutzerrollen nicht ändern.
- Für neue Benutzerrollen können Sie individuelle Zugriffsrechte festlegen.

Benutzer	Zugriffsberechtigungen
Administrator	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Administratoren können Benutzer und Zugriffsrechte verwalten.</li> <li>■ Administratoren können die Softwarelizenz ändern.</li> <li>■ Administratoren können das Audittrail einsehen und exportieren.</li> <li>■ Administratoren können Gruppen anlegen. Sie richten Datenspeicherung und Datenexport ein.</li> <li>■ Administratoren sind für den Messbetrieb nicht autorisiert.</li> </ul>
Service	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Die Servicereole ist Servicetechnikern von Analytik Jena bzw. von Analytik Jena autorisierten Personen vorbehalten.</li> <li>■ Nur der Service hat über Menübefehl <b>Ansicht   Service-Desktop</b> Zugang zu den passwortgeschützten Service-Funktionen.</li> <li>■ Der Service hat weitreichenden Zugriff auf Softwarefunktionen und kann z. B. Messungen starten, Ergebnisse einsehen und bearbeiten.</li> </ul>
Labormanager	Labormanager haben weitreichenden Zugriff auf Softwarefunktionen mit Ausnahme von Benutzerverwaltung und Lizenzmanagement.
Labortechniker	Labortechniker ordnen sich in ihrem Rechteumfang zwischen Labormanager und Laboranten ein.
Laborant	Die Rechte von Laboranten beschränken sich auf den Messbetrieb.
Aushilfe	Aushilfen haben geringere Zugriffsrechte als Laboranten.

Benutzer	Zugriffsberechtigungen
Rohdatenprüfer	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Rohdatenprüfer haben eine wichtige Rolle im optionalen FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul. Sie können Methoden, Sequenzen, Kalibrierungen und Messergebnisse einsehen, signieren und kommentieren.</li> <li>▪ Rohdatenprüfer können Reports erzeugen, Daten exportieren und das Audittrail einsehen.</li> </ul>

### Sehen Sie dazu auch

 Software mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul installieren [▶ 9]

## 13.1.2 Zugriffsrechte

In der Software sind Benutzerrollen mit abgestuften Zugriffsrechten vorangelegt.

- Sie können die Zugriffsrechte von vorangelegten Benutzerrollen nicht ändern.
- Für neue Benutzerrollen können Sie individuelle Zugriffsrechte festlegen.

In den Tabelle **Berechtigungen** und **Datenberechtigungen** im Fenster **Benutzer verwalten** können Sie die Zugriffsrechte einsehen, die einer Benutzerrolle zugeordnet sind.

Die Tabelle **Datenberechtigungen** regelt das grundsätzliche Recht, Daten auf dem zentralen CDM-Service zu lesen, zu erstellen und aktualisieren und zu löschen.

Die Tabelle **Berechtigungen** regelt im Detail den Zugriff auf verschiedene Softwarefunktionen. Sie können beispielsweise Rechte für die Datenfreigabe mithilfe der Signaturen **Geprüft** und **Freigegeben** einzeln vergeben. Darüber hinaus können Sie Benutzerrollen autorisieren, Daten bereits vor der Freigabe zu nutzen.

Über die Tabellen legen Sie die folgenden Zugriffsrechte fest:

- Software-Einstellungen vornehmen
- Gerätekonfiguration bearbeiten und Software-Lizenzierung ändern
- Datenspeicherung, Datenimport und -export einrichten
- Benutzer verwalten
- Gruppen zur Verwaltung von Daten einrichten
- Sequenz- und Ergebnistabelle anpassen
- Methoden anlegen und bearbeiten
- Sequenzen anlegen, bearbeiten und Messungen durchführen
- Kalibrierungen anlegen und bearbeiten
- Ergebnisse einsehen und bearbeiten
- Daten importieren und exportieren
- Daten mithilfe elektronischer Signaturen freigeben (nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul)
- Fehlermeldungen quittieren
- Audittrail einsehen und manuelle Einträge ergänzen

Für eigene Benutzerrollen können Sie durch Anhaken der Checkboxen Zugriffsrechte aktivieren. Es ist kein Speichern nötig. Die Zugriffsrechte gelten für alle Benutzer mit der Benutzerrolle ab der nächsten Anmeldung in der Software.

Leserechte erlauben lediglich einen schreibgeschützten Zugriff auf Daten. Benutzer können Daten einsehen und verwenden, nicht jedoch bearbeiten. Leserechte sind die Vorbedingungen für Editierrechte: Editierrechte müssen gemeinsam mit Leserechte vergeben werden.

Einige Rechte schränken den Zugriff auf bestimmte Elemente ein, beispielsweise **Darf nur Sequenzen für das Standardinstrument erstellen**.

Wenn ein Benutzer in Menüs und Dialogfenstern nicht über Zugriffsrechte verfügt, werden die entsprechenden Bereiche nicht angezeigt oder sind ausgegraut.

Über die Buttons unter der Tabelle können Sie die Rechteauswahl schnell verändern:

Button	Beschreibung
Alles löschen	Rechteauswahl aufheben
Alle markieren	Alle Rechte auswählen

### 13.1.3 Benutzer bearbeiten

#### Neue Benutzerrolle anlegen

- ▶ Sich als Administrator in Software anmelden.
- ▶ Menübefehl **Programm | Benutzer verwalten** wählen.
- ▶ Unter **Rolle bearbeiten** neuen Rollennamen eingeben.
- ▶ Im Bereich **Rollen** auf **Hinzufügen** klicken, um Benutzerrolle zu speichern.
- ▶ Alternativ eine bestehende Benutzerrolle mit Klick auf Button **Kopie** kopieren.
- ▶ In Tabelle **Datenberechtigungen** und **Berechtigungen** Zugriffsrechte für Benutzerrolle auswählen. Dafür Checkboxen aktivieren. Ein Speichern ist nicht notwendig.
  - Tabelle **Datenberechtigungen** regelt das grundsätzliche Recht, Daten auf dem zentralen CDM-Service einzusehen, zu erstellen und aktualisieren und zu archivieren.
  - Tabelle **Berechtigungen** regelt im Detail den Zugriff auf verschiedene Softwarefunktionen.
- ✓ Sie haben eine neue Benutzerrolle mit individuellen Rechteeinstellungen angelegt. Sie können Benutzern die neue Benutzerrolle jetzt zuweisen.

#### Neuen Benutzer anlegen

- ▶ Sich als Administrator in Software anmelden.
- ▶ Menübefehl **Programm | Benutzer verwalten** wählen.
- ▶ Im Bereich **Benutzer bearbeiten** im Eingabefeld **Benutzername** Benutzernamen eintragen.
- ▶ Anzeigenamen eingeben.
- ▶ Option **Benutzer läuft ab** aktivieren, wenn der Benutzer nur zeitlich begrenzt gültig sein soll. Unter **Datum** Datum der letzten möglichen Softwareanmeldung festlegen.
- ▶ Im Bereich **Benutzer bearbeiten** auf **Hinzufügen** klicken, um Benutzer zu speichern.
  - ✓ Die Software zeigt unterhalb der Tabelle **Benutzer** das Initialpasswort für die erste Anmeldung des Benutzers an.
- ▶ Initialpasswort markieren und mit **Strg + C** in die Zwischenablage kopieren und es an den neuen Benutzer weiterleiten.
- ▶ Benutzerrolle für neuen Benutzer in Tabelle **Rollen** auswählen und über Checkbox aktivieren.
  - ✓ Sie haben einen neuen Benutzer angelegt und dem Benutzer eine Benutzerrolle zugewiesen. Der neue Benutzer ist zum Anmelden im System berechtigt.

Ein Benutzer kann mehrere Benutzerrollen haben. Der Benutzer verfügt dann über die Zugriffsrechte all dieser Benutzerrollen.

Die Software öffnet bei der ersten Anmeldung das Fenster **Passwort ändern**, in dem ein neuer Benutzer sein Passwort ändern muss.

#### Benutzereinstellungen ändern

- ▶ Sich als Administrator in Software anmelden.
- ▶ Menübefehl **Programm | Benutzer verwalten** wählen.
- ▶ Benutzer in Tabelle **Benutzer** auswählen.
- ▶ Benutzerdaten unter **Benutzer bearbeiten** anpassen.



- ▶ Änderungen mit Klick auf Button **Aktualisieren** speichern.
- ▶ Bei Bedarf dem Benutzer eine neue Benutzerrolle zuweisen. Dafür Checkbox im Bereich **Rollen** aktivieren.
- ▶ Für eigene Benutzerrollen: Rolle im Bereich **Rollen** auswählen. In Tabelle **Datenberechtigungen** und **Berechtigungen** Zugriffsrechte ändern.  
Die Zugriffsrechte der vordefinierten Benutzerrollen sind nicht editierbar.
  - ✓ Sie haben Benutzereinstellungen angepasst.

Alle Benutzer, die einer Benutzerrolle zugeordnet sind, sind von Änderungen in den Zugriffsrechten betroffen.

#### Benutzerrollen archivieren

Sie können eigene Benutzerrollen, denen kein Benutzer zugeordnet ist, archivieren. Benutzer und Benutzerrollen können nicht gelöscht werden.

- ▶ Sich als Administrator in Software anmelden.
- ▶ Menübefehl **Programm | Benutzer verwalten** wählen.
- ▶ Eigene Benutzerrolle im Bereich **Rollen** auswählen und auf Button **Archivieren** klicken. Sicherheitsabfrage bestätigen.
  - ✓ Sie haben eine Benutzerrolle archiviert. Sie können archivierte Benutzerrollen zu einem späteren Zeitpunkt nicht wiederherstellen.

#### Benutzer deaktivieren

Sie können Benutzer deaktivieren, um ihnen den Zugriff auf die Software zu verwehren. Sie haben die Möglichkeit, die Benutzer später wieder zu entsperren.

- ▶ Sich als Administrator in Software anmelden.
- ▶ Menübefehl **Programm | Benutzer verwalten** wählen.
- ▶ Benutzer in Tabelle **Benutzer** auswählen.
- ▶ Auf Toggle Switch **Aktiviert** klicken.
  - ✓ Der Benutzer wird deaktiviert.
- ▶ Benutzer bei Bedarf mit Klick auf Toggle Switch wieder aktivieren.

#### Passwort zurücksetzen

Sie können das Passwort eines Benutzers zurücksetzen, z. B. wenn ein Benutzer sein Passwort vergessen hat.

- ▶ Sich als Administrator in Software anmelden.
- ▶ Menübefehl **Programm | Benutzer verwalten** wählen.
- ▶ Benutzer in Tabelle **Benutzer** auswählen.
- ▶ Auf Button **Passwort zurückgesetzt** klicken.
  - ✓ Die Software setzt das aktuelle Passwort zurück und erzeugt ein neues Initialpasswort für die erste Anmeldung. Die Software zeigt das Passwort unterhalb der Tabelle **Benutzer** an.

### 13.1.4 Passwortregeln und automatische Benutzerabmeldung einrichten

Im Fenster **Benutzer verwalten** können Sie Kriterien für die Gültigkeit von Passwörtern festlegen und eine automatische Benutzerabmeldung nach Zeiten der Inaktivität einrichten.

- ▶ Sich als Administrator in Software anmelden.
- ▶ Menübefehl **Programm | Benutzer verwalten** wählen.
- ▶ Die Passwortbedingungen im Bereich **Passwortregeln und automatische Sperre** einstellen (siehe Tabelle).

- ▶ Option **Aktivieren** aktivieren, um Benutzer bei Inaktivität automatisch abzumelden. Zeit der Inaktivität in (min) bei **Benutzer ausgeloggt nach [min]** festlegen.
  - ✓ Die neuen Passwortbedingungen sind für alle neuen Passwörter gültig. Passwörter, die vor der Änderung erstellt wurden, sind weiterhin gültig.


Kriterium	Beschreibung
<b>Minimale Länge</b>	Mindestlänge des Passwortes festlegen (min. 4 Zeichen)
<b>Maximale Länge</b>	Maximale Länge des Passwortes festlegen (max. 100 Zeichen)
<b>Wiederholungen</b>	Anzahl der erlaubten Wiederholungen für bereits verwendete Passwörter festlegen (max. 10 Wiederholungen)
<b>Eingabeversuche</b>	Anzahl ungültiger Anmeldeversuche bis zur Sperrung des Benutzerprofils festlegen (max. 10 Versuche)  Ein Administrator kann ein gesperrtes Benutzerprofil unter <b>Benutzer verwalten</b> freischalten.
<b>Passwort läuft ab [Tage]</b>	Anzahl der Tage festlegen, nach denen das Passwort ungültig wird (1 ... 365 Tage)
<b>Benutzer ausgeloggt nach [min]</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Automatisches Ausloggen von inaktiven Benutzern über Checkbox aktivieren</li> <li>■ Dauer der Inaktivität festlegen, Voreinstellung: 30 min (1 ... 2000 min)</li> </ul> <p>Die Software sperrt den Bildschirm und verhindert so einen ungewollten Zugriff auf Daten. Messungen laufen weiter.</p>
<b>Kleinbuchstaben</b>	Zeichen festlegen, die das Passwort enthalten muss: <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Groß- und Kleinbuchstaben</li> <li>■ Ziffern</li> <li>■ Sonderzeichen</li> </ul>
<b>Großbuchstaben</b>	
<b>Zahlen</b>	
<b>Sonderzeichen</b>	
<b>Häufige PW sperren</b>	Software-interne Liste anwenden, um Trivialpasswörter zurückzuweisen

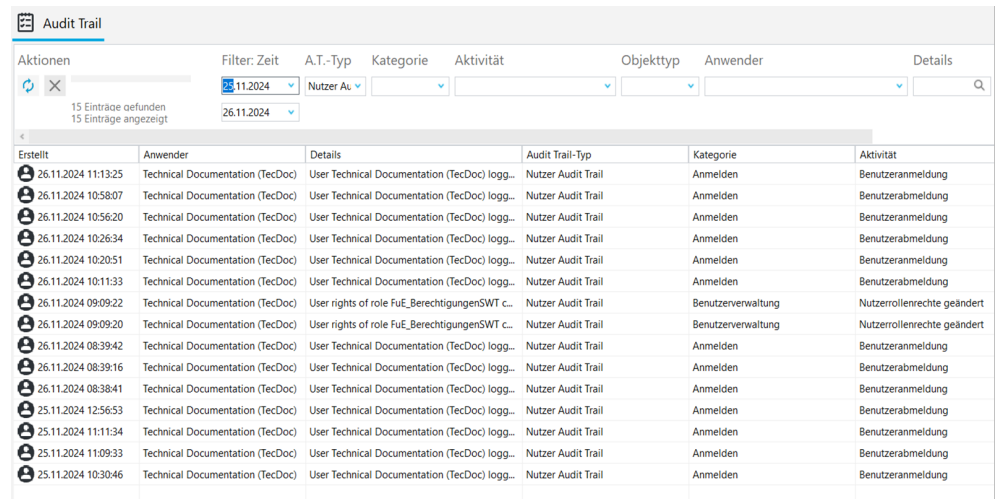
### 13.1.5 Administrator bei Passwortverlust wiederherstellen

Empfehlung: Richten Sie in der Benutzerverwaltung einen Benutzer mit der Rolle **Administrators-Recovery** ein. Verwenden Sie diesen Benutzer, um das Administratorprofil bei Passwortverlust wiederherzustellen. Profile können durch Analytik Jena nicht wiederhergestellt werden.

- ▶ Bei Verlust des Administratorpasswortes: Sich als Benutzer mit der Rolle **Administrators-Recovery** in der Software anmelden.
- ▶ Die Benutzerverwaltung öffnen. Den Administrator in der Tabelle **Benutzer** auswählen.
- ▶ Bei Bedarf den Administrator mit Klick auf Button **Deaktiviert** reaktivieren.
- ▶ Das Administratorpasswort mit Klick auf Button **Passwort zurückgesetzt** zurücksetzen.
- ▶ Das neue Initialpasswort mit **Strg + C** in die Zwischenablage kopieren und dem Administrator für die Anmeldung in der Software bereitstellen.

## 13.2 Audittrail einsehen, drucken oder exportieren

Das Audittrail können Sie unter Menüpunkt **Programm | Audit Trail anzeigen** einsehen. Wählen Sie dafür unter **Filter: Zeit** den gewünschten Zeitraum aus und klicken auf Icon .



**Abb. 42 Fenster Audit Trail**

### Protokollierte Ereignisse

Im Audittrail protokolliert die Software folgende Ereignisse:

- Start und Beenden der Software
- Login und Logout von Benutzern
- Initialisierung, Standby und Ausschalten des Analysensystems
- Erstellung und Bearbeitung einer Methode
- Start, Ende und manueller Abbruch einer Messung
- Durchführung und Bearbeitung einer Kalibrierung
- Messung oder Eingabe von Blindwerten
- Aufzeichnung von Tagesfaktoren
- Durchführung von Systemeignungstests
- Aufgetretene Fehler mit Fehlermeldungen
- Manuelle Bearbeitung von Ergebnissen
- Änderungen in der Benutzerverwaltung wie Anlegen eines neuen Benutzers
- Datenfreigabe und Datenimport
- Software-Updates
- Anlegen oder Ändern einer Gerätekonfiguration
- Ändern softwareübergreifender Einstellungen

### Aufbau des Audittrails

Die Software stellt das Audittrail in tabellarischer Übersicht dar. Dabei ordnet die Software die protokollierten Ereignisse in Kategorien, nach denen Sie das Audittrail filtern können. Zeitpunkt und angemeldeter Benutzer werden bei jedem Ereignis erfasst.


Spalte	Beschreibung
<b>Erstellt</b>	Datum und Uhrzeit des Ereignisses
<b>Anwender</b>	Benutzer, der während des Ereignisses angemeldet war
<b>Details</b>	Protokolliertes Ereignis (Detailbeschreibung)
<b>Audit Trail-Typ</b>	Typ der protokollierten Ereignisse: <b>Nutzer Audit Trail</b> Änderungen in der Benutzerverwaltung <b>Run Audit Trail</b> Dokumentation des Messablaufs <b>Methoden Audit Trail</b> Anlegen oder Ändern von Methoden

Spalte	Beschreibung
	<b>Geräte-Audit-Trail</b> Dokumentation der Gerätesteuerung, inklusive Änderungen an Gerätekonfiguration
	<b>Fehler</b> Fehlermeldung
<b>Kategorie</b>	Kategorie des protokollierten Ereignisses
<b>Aktivität</b>	Protokolliertes Ereignis (Kurzform)
<b>Typ des geänderten Objekts</b>	Typ des betroffenen Softwareelements
<b>Geändertes Objekt</b>	Betroffenes Softwareelement
<b>Gerät</b>	Gerätemodell
<b>Geräteseriennummer</b>	Seriennummer des Gerätes
<b>App. Klasse</b>	Art der Software (TOC)
<b>App. Typ</b>	Name der Software
<b>App. Instanz</b>	Client im Netzwerk

Sie können die protokollierten Ereignisse aufsteigend sortieren. Dafür auf den Kopf der Spalte klicken, nach der Sie sortieren wollen.

Filtern

Sie können das Audittrail nach den Spalten der tabellarischen Übersicht filtern, um die Anzahl der angezeigten Ereignisse zu reduzieren.

- ▶ Zum Setzen von Filtern Einträge aus einem oder mehreren Dropdown-Menüs auswählen.
- ▶ Bei **Filter: Zeit** Start und Ende des Zeitfensters im Kalender auswählen.
- ▶ Unter **Details** Freitext in Suchfeld eingeben, um die Einträge in Spalte **Details** zu filtern.
- ▶ Mit Klick auf Icon  die laufende Aktualisierung unterbrechen.
- ▶ Zum Löschen eines Filters leere Zeile ganz oben im Dropdown-Menü auswählen.

Audittrail anzeigen und drucken

- ▶ Audittrail mit Menübefehl **Programm | Audit Trail anzeigen** und Klick auf Icon  öffnen.
- ▶ Bei Bedarf Filter für bestimmte Ereignisse setzen oder Zeitfenster festlegen:
  - Einträge aus einem oder mehreren Dropdown-Menüs auswählen.
  - Zeitfenster setzen: In angezeigten Kalendern Start- und Enddatum markieren.
- ▶ Die in der Tabelle enthaltenen Ereignisse aufsteigend sortieren. Dafür auf den Kopf der Spalte klicken, nach welcher sortiert werden soll.
- ▶ Mit Klick auf **Report** Druckvorschau öffnen.
- ▶ Für eine bessere Übersicht mit Klick auf Button **Navigator** den Navigationsbereich mit einer Seitenübersicht links neben dem Report einblenden. Ansicht mit Klick auf **Vergrößern** und **Verkleinern** vergrößern bzw. verkleinern.
- ▶ Nach Klick auf **Drucker-Optionen** Drucker einrichten.
- ▶ Nach Klick auf **Seite einrichten** Seiteneinstellungen wie Seitengröße oder Seitenausrichtung festlegen. Voreinstellung: A4, Hochformat. Layout auf aktuelle Seite oder alle Report-Seiten anwenden.
- ▶ Firmenlogo in Report ergänzen. Nach Klick auf Button **Laden** im Bereich **Report-Logo** Logo in Windows-Dateiverwaltung auswählen und mit **Öffnen** in Report laden.








- ▶ Druck mit Klick auf **Drucken** starten.
- ▶ Report mit Klick auf Button **Speichern** speichern.

Das Audittrail umfasst meist sehr viele Einträge. Deshalb empfiehlt es sich, das Audittrail nach relevanten Einträgen zu filtern.

Sie können Reporte in folgenden Dateiformaten speichern: PDF (voreingestellt), RTF, HTML, TXT, FP3.

### 13.2.1 Audittrail anpassen

Sie können das Layout des Audittrails über den Befehl **Anzeigespalten verwalten** (im Kontextmenü) anpassen.

- ▶ Audittrail mit Menübefehl **Programm | Audit Trail anzeigen** öffnen.
- ▶ Rechtsklick in Tabelle ausführen, um Kontextmenü zu öffnen.
- ▶ Befehl **Anzeigespalten verwalten** wählen.
- ▶ Im Fenster **Anzeigespalten verwalten** Anzeige und Reihenfolge der Tabellenspalten anpassen:
  - Mit Icon  Spalte aus Vorschlägen (links) in Tabelle (rechts) übernehmen.
  - Mit Icon  Spalte aus Tabelle (rechts) entfernen.
  - Mit Icon  alle Spalten aus Vorschlägen (links) in Tabelle (rechts) übernehmen.
  - Mit Icon  alle Spalten aus Tabelle (rechts) entfernen.
  - Mit Icon  Spalte nach unten bzw. in Sequenztabelle nach rechts verschieben.
  - Mit Icon  Spalte nach oben bzw. in Sequenztabelle nach links verschieben.
  - Mit Icon  zu voreingestellter Spaltenauswahl zurückkehren.
- ▶ Eingaben mit **Ok** bestätigen.
  - ✓ Sie haben die Tabellenspalten angepasst.

## 13.3 Manuelle Einträge im Audittrail ergänzen

Sie können manuell bestimmte Einträge im Audittrail ergänzen wie ein Firmware Update oder durchgeführte Wartungsmaßnahmen.

- ▶ Mit Menübefehl **Programm | Manueller Audit Trail-Eintrag** Fenster **Manueller Audit Trail Eintrag** öffnen.
- ▶ Im Dropdown-Menü bei **Art des Eintrags**: einen Eintrag auswählen.
  - ✓ Die Software blendet weitere Dropdown-Menüs ein, um das Ereignis einzuordnen.
- ▶ Mithilfe der eingeblendeten Dropdown-Menüs die Gerätekonfiguration und weitere Informationen wie die Art der Wartung im Audittrail hinterlegen.
- ▶ Im Eingabefeld bei **Kommentar** Freitext zum Ereignis ergänzen.
- ▶ Manuellen Eintrag mit Klick auf Button **Hinzufügen** in das Audittrail übernehmen.
  - ✓ Die Software übernimmt den manuellen Eintrag in das Audittrail. Die Software erfasst im Audittrail den Zeitpunkt und Anwender, der das Ereignis protokolliert hat.

Option	Beschreibung
<b>Art des Eintrags:</b>	<p>Option <b>Gerätequalifizierung fehlgeschlagen</b> Die Gerätequalifizierung, z. B. im Rahmen einer IQ/OO, ist gescheitert.</p> <p>Option <b>Gerätequalifizierung erfolgreich</b> Die Gerätequalifizierung verlief erfolgreich.</p> <p>Option <b>Firmware-Update</b> Der Service hat ein Firmware-Update durchgeführt.</p> <p>Option <b>Installationsqualifizierung (IQ) fehlgeschlagen</b> Installationsqualifizierung (IQ) ist gescheitert.</p> <p>Option <b>Installationsqualifizierung (IQ) erfolgreich</b> IQ verlief erfolgreich.</p> <p>Option <b>Wartung</b> Eine Wartungsmaßnahme wurde durchgeführt.</p> <p>Option <b>Betriebsqualifikation nicht bestanden</b> Funktionsqualifizierung (OO) ist gescheitert.</p> <p>Option <b>Betriebsqualifikation erfolgreich</b> OO verlief erfolgreich.</p>
<b>Gerät</b>	Gerätekonfiguration auswählen
<b>Alte Firmware-Version:</b>	Bei Firmware-Update alte Firmwareversion eintragen
<b>Neue Firmware-Version:</b>	Bei Firmware-Update neue Firmwareversion eintragen
<b>Art der Wartung:</b>	<p>Art der Wartung auswählen:</p> <p>Option <b>Wartung</b> Geplante, regelmäßige Wartungsmaßnahme</p> <p>Option <b>Reparatur</b> Wartungsmaßnahme nach Auftreten eines Gerätefehlers oder analytischen Problems</p>
<b>Kommentar</b>	Weitere Informationen als Kommentar ergänzen

## 13.4 Elektronische Signaturen

Signaturen sind neben der Benutzerverwaltung ein wichtiger Baustein, um die Datenvalidität nach 21 CFR Part 11 zu sichern.

Mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul ist das Signieren von Daten zwingend erforderlich. So können Sie nur freigegebene, nicht gesperrte Methoden und Kalibrierungen für die Messung verwenden. Es sein denn, Sie sind explizit über das Benutzermanagement berechtigt, Daten vor der Freigabe zu verwenden.

Das Signieren erfolgt nach dem Vier-Augen-Prinzip:

- Der Benutzer, der die Daten erstellt, signiert automatisch mit **Erstellt**.
- Die Prüfung und Signierung mit **Geprüft** muss durch einen anderen Benutzer erfolgen.
- Die Datenfreigabe mit dem Signierstatus **Freigegeben** kann jeder Benutzer mit dem Recht, Daten als freigegeben zu signieren, erteilen.

Die Software sieht nacheinander folgende Signaturstatus vor: **Erstellt**, **Geprüft** und **Freigegeben**. Veralterte oder ungültige Daten sperren Sie mit Klick auf **Ungültig**.

Signatur	Beschreibung
<b>Erstellt</b>	Die Signatur erfolgt automatisch durch den angemeldeten Benutzer zum Zeitpunkt der Datenerstellung. Berechtigte Benutzer können die Daten weiterbearbeiten. Die Software dokumentiert Änderungen im Audittrail.
<b>Geprüft</b>	Mit Vergabe der Signatur <b>Geprüft</b> beginnt der Freigabeprozess. Ab jetzt können Sie Daten nicht mehr bearbeiten. Der signierende Benutzer prüft die Daten. Gemäß Vier-Augen-Prinzip muss der Prüfer ein anderer als der Ersteller sein.
<b>Freigegeben</b>	Der signierende Benutzer gibt die Daten zur Verwendung frei. Erst jetzt können Sie Methoden und Kalibrierungen für die Messung verwenden. Freigegebene Messergebnisse wie auch SSTs dürfen Sie im Allgemeinen verwenden und an Dritte kommunizieren.
<b>Ungültig</b>	Der signierende Benutzer sperrt die Daten. Sie können die Daten nicht mehr verwenden. Sie können gesperrte Daten nach Änderung des Signaturstatus wieder bearbeiten.

Die Software sieht eine Signierung für folgende Daten vor:

- Methoden
- Kalibrierungen
- Messergebnisse
- Systemeignungstests (SST)

Daten signieren

Sie signieren Daten in den Fenster **Methoden, Kalibrierungen, Ergebnistabelle** und **SSTs**.

- ▶ Fenster öffnen.
- ▶ Methode, Kalibrierung, Messergebnis oder SST-Report aus der Übersichtstabelle auswählen.
- ▶ Daten durch Klick auf die Buttons **Geprüft** und **Freigegeben** signieren.
- ▶ Benutzername und Passwort nach Aufforderung durch die Software eingeben.
- ▶ Kommentar eingeben und mit **Ok** bestätigen.
- ▶ Veraltete oder ungültige Daten mit Klick auf **Ungültig** sperren.
- ▶ Im Fenster **Ergebnistabelle** mehrere Ergebnisse durch Aktivieren der Checkbox auswählen. Mit Klick auf Button **Alle markierten Ergebnisse signieren** mehrere Ergebnisse gleichzeitig signieren.
  - ✓ Die Daten werden signiert. Der hervorgehobene Button zeigt den aktuellen Signaturstatus an.
- ▶ Detaillierte Information zur Signatur wie Datum, Uhrzeit und signierender Benutzer auf Tab **Signaturen** einsehen.

**i** HINWEIS! Wenn Sie in einer Sequenz Tagesfaktoren aufzeichnen, übernimmt die Software den oder die Tagesfaktoren automatisch in die Kalibrierung. Der Signierstatus der Kalibrierung ändert sich dabei auf **Erstellt**. Sie müssen die Kalibrierung erneut freigeben, um weitere Messungen in der Sequenz durchführen zu können.

Die Software protokolliert das Signieren von Daten im Audittrail.

In der Standardsoftware ist das Signieren von Daten optional. Es erfolgen keine Einträge auf Tab **Signaturen**.

## 13.5 Datenverwaltung

Die Software schützt Daten gegen beabsichtigte und unbeabsichtigte Datenmanipulation.

Die Software speichert alle Daten zentral auf dem CDM-Server:

- Benutzerverwaltung
- Audittrail
- Methoden
- Sequenzen
- Kalibrierungen
- Ergebnisse
- Systemeignungstests
- Gerätekonfigurationen

Wenn Benutzer über entsprechende Zugriffsrechte verfügen, können sie Daten in der Software einsehen und auch bearbeiten. Die Software protokolliert alle Änderungen im Audittrail. Kein Benutzer verfügt über das Recht, Daten zu löschen.

## 13.6 Systemeignungstest (SST)

Der Systemeignungstest (SST) ist für die Qualitätssicherung für die TOC bzw. NPOC-Bestimmung im Pharmabereich vorgesehen und ist nur mit FDA 21 CFR Part 11 Konformitätsmodul möglich. Der Test prüft die Geräteeignung für die Messung schwer oxidierbarer organischer Substanzen (*p*-Benzochinon) im Vergleich zu Saccharose. Bei der Arbeit gemäß JP 17 2.59 untersuchen Sie die Oxidierbarkeit von Natriumdodecylbenzolsulfonat im Vergleich zu Kaliumhydrogenphthalat.

- Im Rahmen des SST messen Sie TOC-Wasser, einen Saccharose-Standard und *p*-Benzochinon-Standard mit einer TOC- oder NPOC-Methode.
- Die Software berechnet die TOC-Werte nach:  $TOC_{\text{Netto}} = TOC_{\text{Standard}} - TOC_{\text{Wasser}}$
- Die Software bildet den Quotient  $TOC_{\text{Netto}}(p\text{-Benzochinon}) / TOC_{\text{Netto}}(\text{Saccharose})$ .
- Die Software gibt die Ergebnisse im Fenster **Ergebnisse | SSTs** und im SST-Report aus.

Der SST gilt als bestanden, wenn der SST-Quotient bei 0,85 ... 1,15 liegt.


Im Fall von JP 17 2.59 gilt der SST als bestanden, wenn die gemessene TOC-Konzentration der Natriumdodecylsulfonatlösung bei mindestens 0,450 mg/l liegt.

Die Verwendung von SST-Standards mit verschiedenen Konzentrationen bzw. verschiedenen Substanzen ist gemäß folgender Pharmakopöe möglich:



- USP-SST, Bulk Water (USP 643)
- USP-SST, Sterile Water (USP 643)
- EP-SST (EP 2.2.44)
- JP-SST (JP 17 2.59)

Die Software passt die Substanzen und Zielkonzentrationen entsprechend an.

### 13.6.1 Systemeignungstest (SST) durchführen

- ▶ Mit Menübefehl **Sequenzen | Neue Sequenz zufügen** neue Sequenz anlegen.
- ▶ Mit Klick auf Icon  Wizard **SST erstellen** öffnen.
- ▶ Im Wizard Titel für SST vergeben. Die voreingestellte Bezeichnung lautet: SST + Zeitstempel. Optional Kommentar ergänzen.



- ▶ Auswählen, gemäß welcher Pharmakopöe der SST erfolgen soll:  
**USP-SST, Bulk Water**  
**USP-SST, Sterile Water**  
**EP-SST**  
**JP-SST**
- ▶ Nach Klick auf Button **Methode** im Fenster **Methode auswählen** NPOC- oder TOC-Methode auswählen.
- ▶ Nach Klick auf Button **Kalibrierung** im Fenster **Kalibrierung auswählen** Kalibrierung auswählen.
- ▶ Bei Bedarf die Zielkonzentration unter **Soll-Konzentration** anpassen. Die Zielkonzentrationen sollten nur bei Änderungen in der Pharmakopöe angepasst werden.
- ▶ Mit Klick auf **Ok** die Eingaben im Wizard bestätigen.
  - ✓ Die Software übernimmt die SST-Messungen in die Sequenz.
- ▶ Nach Klick auf **Ergebnistabelle** Ergebnistabelle aus Dropdown-Menü auswählen. Oder: Mit **Neue Ergebnistabelle erstellen** neue Ergebnistabelle anlegen. Wenn Sie keine Ergebnistabelle auswählen, speichert die Software die Ergebnisse in der voreingestellten Ergebnistabelle. Voreinstellung siehe: **Programm | Einstellungen | Standard-Ergebnistabelle**  
**i** HINWEIS! Ohne Ergebnistabelle ist kein Messstart möglich.
- ▶ Fertige Sequenz mit Klick auf Icon  auf Plausibilität prüfen. Die Software prüft, ob die angelegten Messschritte gemessen werden können.
- ▶ SST-Proben (TOC-Wasser, Standards für Saccharose und *p*-Benzochinon) bereitstellen.
- ▶ Messung mit Klick auf Icon  starten.
- ▶ Bei manueller Probenaufgabe Aufforderungen der Software folgen und Proben nacheinander bereitstellen. Messung der Proben quittieren.
  - ✓ Die Software wertet den SST automatisch aus und gibt das Ergebnis im SST-Report aus.

SST-Reports können Sie unter **Ergebnisse | SSTs** einsehen.

### 13.6.2 Wizard SST erstellen

Mit Wizard **SST erstellen** bereiten Sie einen Systemeignungstest (SST) für TOC- und NPOC-Messungen vor.

Sie öffnen den Wizard über Icon  im Fenster **Neue Sequenz**.

Layout

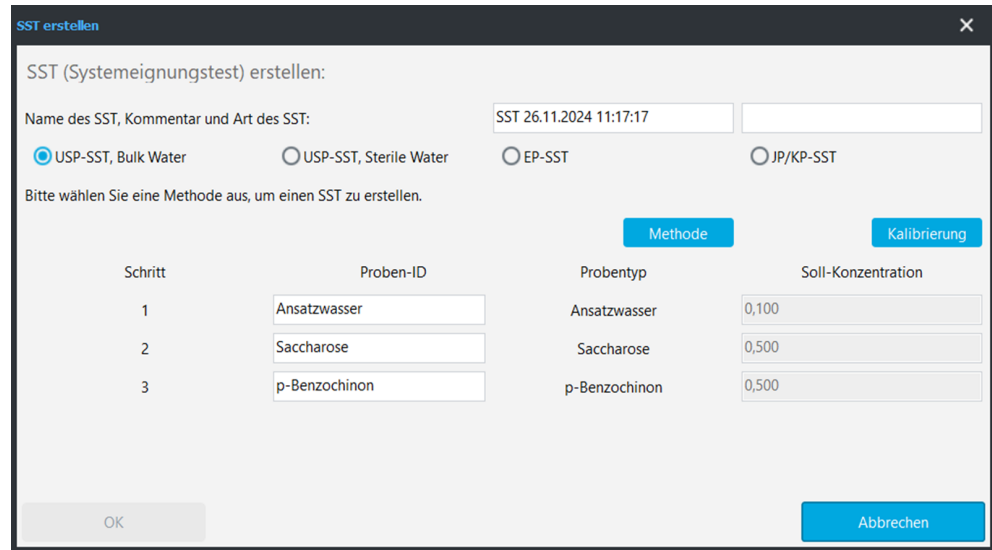


Abb. 43 Wizard SST erstellen

Element	Beschreibung
Eingabefelder <b>Name des SST, Kommentar und Art des SST:</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Name für SST vergeben</li> <li>Die voreingestellte Bezeichnung lautet: SST + Zeitstempel.</li> <li>Optional Kommentar eingeben</li> </ul>
Radio Buttons <ul style="list-style-type: none"> <li>USP-SST, Bulk Water</li> <li>USP-SST, Sterile Water</li> <li>EP-SST</li> <li>JP-SST</li> </ul>	SST gemäß Pharmakopöe auswählen: <ul style="list-style-type: none"> <li>SST-Test für Reinstwasser nach USP 643 "Bulk Water"</li> <li>SST-Test nach USP 643 "Sterile Water"</li> <li>SST-Test nach EP 2.2.44</li> <li>SST-Test nach JP 17 2.59</li> </ul> Die Software passt die Zielkonzentrationen entsprechend an.
Button <b>Methode</b>	Nach Klick auf Button <b>Methode</b> NPOC- oder TOC-Methode im Fenster <b>Methode auswählen</b> wählen
Button <b>Kalibrierung</b>	Nach Klick auf Button <b>Kalibrierung</b> Kalibrierung im Fenster <b>Kalibrierung auswählen</b> wählen
Tabelle mit vorangelegten SST-Proben	<b>Schritt</b> Schrittnummer 1 ... 3  <b>Proben-ID</b> Art der SST-Probe: TOC-Wasser, Saccharose, p-Benzochinon bzw. TOC-Wasser, Kaliumhydrogenphthalat und Natriumdodecylbenzolsulfonat (gemäß JP 17 2.59)  <b>Probentyp</b> Gewählter SST-Typ  <b>Soll-Konzentration</b> Zielkonzentration Die Software gibt die Zielkonzentration gemäß gewählter Pharmakopöe vor. Bei Bedarf Konzentration anpassen.
Button <b>Ok</b>	SST in Sequenz übernehmen
Button <b>Abgebrochen</b>	Vorbereitung des SST abbrechen

### 13.6.3 Ergebnisse von Systemeignungstests im Fenster SSTs einsehen

Die Software wertet Systemeignungstests automatisch aus und zeigt die Ergebnisse im Fenster **SSTs** an. Sie öffnen das Fenster **SSTs** über den Menübefehl **Ergebnisse | SSTs**.

Im Fenster SSTs

- Sie verwalten die Ergebnisse von SSTs in der Tabelle **SST-Übersicht**.

- Sie ordnen SSTs nach Klick auf **Gruppe zuweisen** im Fenster **Gruppe auswählen** in Gruppen.
- Mit Klick auf **Gehe zu Ergebnis** laden Sie die Ergebnistabelle mit den Ergebnissen der SST-Messungen.
- Nach Klick auf **Export** exportieren Sie Ergebnisse ausgewählter SSTs im XML-Format, voreingestellter Export-Ordner: *C:/ProgramData/Analytik-Jena/multiWinPro/export/results.*
- Mit Klick auf **Report** öffnen Sie die Druckvorschau und drucken oder speichern den Report im pdf-Format.

Layout des Fensters

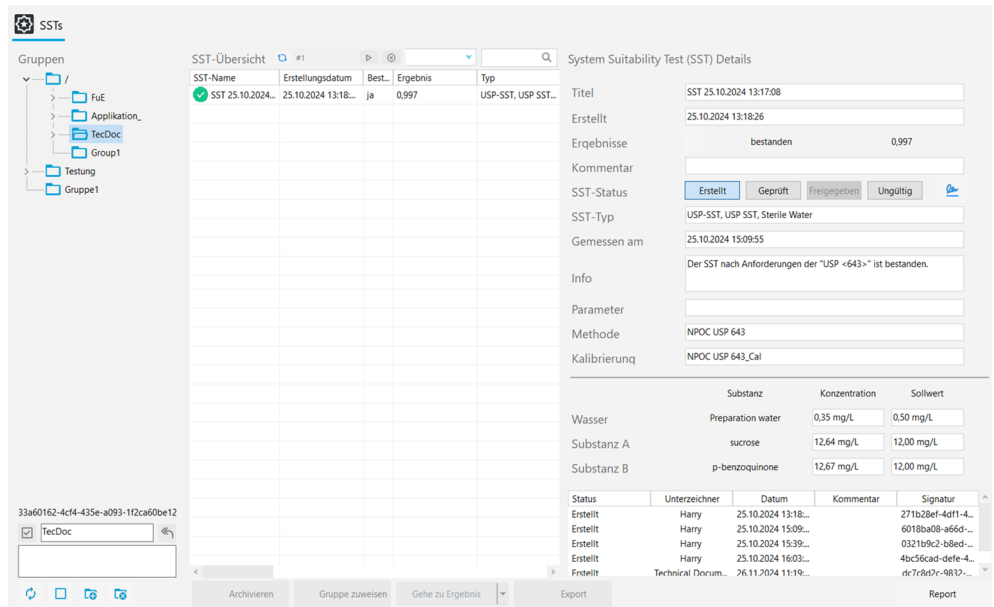


Abb. 44 Fenster SSTs

Bereich	Beschreibung
Gruppen (links)	Gruppenverwaltung
SST-Übersicht (Mitte)	Tabellarische Übersicht der aufgezeichneten SSTs mit Ergebnissen und Hintergrundinformationen wie Messerfolg, Messmethode und Kalibrierung
System Suitability Test (SST) Details (rechts)	Detailansicht mit Ergebnissen eines ausgewählten SSTs mit Option, Test zu signieren und Kommentare zu ergänzen

13.6.4 Tabelle SST-Übersicht

Die Tabelle **SST-Übersicht** ist Teil des Fensters **SSTs**. Die tabellarische Übersicht zeigt die Ergebnisse der aufgezeichneten Systemeignungstests (SST).

Spalte	Beschreibung
SST-Name	Name des SST
Erstellungsdatum	Messzeitpunkt
bestanden	Testerfolg mit Anzeige <b>bestanden - ja/nein</b> Der SST ist bestanden, wenn SST-Quotient bei 0,85 ... 1,15 liegt. Bei JP 17 2.59 muss die gemessene TOC-Konzentration der Natriumdodecylsulfonatlösung bei mehr als 0,450 mg/l liegen.
Ergebnis	Berechneter SST-Quotient gemäß: $TOC_{Netto}(p\text{-Benzochinon}) / TOC_{Netto}(Saccharose)$

Spalte	Beschreibung
Typ	Durchführung des SSTs gemäß folgender Pharmakopöe: <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ SST-Test für Reinstwasser nach USP 643 "Bulk Water"</li> <li>▪ SST-Test nach USP 643 "Sterile Water"</li> <li>▪ SST-Test nach EP 2.2.44</li> <li>▪ SST-Test nach JP 17 2.59</li> </ul>
Start	Messstart
Ende	Messende
Info	Individuelle Information
Wasser Substanz A Substanz B	Art der SST-Probe: TOC-Wasser, Saccharose, <i>p</i> -Benzochinon bzw. TOC-Wasser, Kaliumhydrogenphthalat und Natriumdodecylsulfonat (gemäß JP 17 2.59)
Soll-Gehalt Ansatzwasser Soll-Gehalt A Soll-Gehalt B	Zielkonzentration der SST-Proben (gemäß Pharmakopöe)
Konz. TOC-Wasser Konz. Lösung A Konz. Lösung B	Gemessene Konzentration der SST-Proben
Status	Signatur
Kommentar	Individuelle Information als Kommentar
Methode	Messmethode
Kalibrierung	Kalibrierung
Parameter	Messkanal (NPOC oder TOC)
Gemessen	Messerfolg mit Anzeige Gemessen - ja/nein

### 13.6.5 Detailansicht System Suitability Test (SST) Details

Die Detailansicht **System Suitability Test (SST) Details** ist Teil des Fensters **SSTs**. Sie zeigt detaillierte Informationen zu ausgewählten SSTs.

Angezeigter Parameter	Beschreibung
Titel	Editierbare Bezeichnung des SST
Erstellt	Zeitpunkt von Vorbereitung SST
Ergebnisse	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Anzeige <b>bestanden/NICHT bestanden</b></li> <li>▪ Anzeige des berechneten SST-Quotienten</li> </ul> <p>Die Software bildet den Quotient gemäß:  <math>TOC_{Netto}(p\text{-Benzochinon}) / TOC_{Netto}(\text{Saccharose})</math>.</p> <p>Der SST ist bestanden, wenn der SST-Quotient bei 0,85 ... 1,15 liegt. Bei JP 17 2.59 muss die gemessene TOC-Konzentration der Natriumdodecylsulfonatlösung bei mehr als 0,450 mg/l liegen.</p>
Kommentar	Individuelle Information
SST-Status	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Signaturstatus des SST einsehen</li> <li>▪ SST nach Prüfung freigeben oder sperren</li> </ul>
SST-Typ	Durchführung des SST gemäß folgender Pharmakopöe: <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ SST-Test für Reinstwasser nach USP 643 "Bulk Water"</li> <li>▪ SST-Test nach USP 643 "Sterile Water"</li> <li>▪ SST-Test nach EP 2.2.44</li> <li>▪ SST-Test nach JP 17 2.59</li> </ul>

Angezeigter Parameter	Beschreibung
Gemessen am	Messzeitpunkt
Info	Auswertung des Messerfolges
Parameter	Messkanal (NPOC oder TOC)
Methode	Messmethode
Kalibrierung	Kalibrierung
Ergebnistabelle	<p>Tabellarische Übersicht mit gemessenen Konzentrationen und Zielkonzentrationen für:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ TOC-Wasser</li> <li>▪ Saccharose</li> <li>▪ <i>p</i>-Benzochinon</li> </ul> <p>Gemäß JP 17 2.59:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ TOC-Wasser</li> <li>▪ Kaliumhydrogenphthalat</li> <li>▪ Natriumdodecylsulfonat</li> </ul>
Tabelle zu Signaturen	Detaillierte Information zu Signaturen

### 13.6.6 SST-Report einsehen, drucken und speichern

#### SST-Report einsehen

- ▶ Mit Menübefehl **Ergebnisse | SSTs** Fenster **SSTs** öffnen.
- ▶ SST in Tabelle **SST-Übersicht** auswählen und Ergebnisse in Detailansicht **System Suitability Test (SST) Details** einsehen.
- ▶ Optional unter **Kommentar** Kommentar ergänzen.
- ▶ Ergebnisse nach Prüfung mit Buttons **Gepprüft** und **Freigegeben** freigeben.

#### Report drucken

- ▶ Mit Klick auf **Report** Druckvorschau öffnen.
- ▶ Für eine bessere Übersicht mit Klick auf Button **Navigator** den Navigationsbereich mit einer Seitenübersicht links neben dem Report einblenden. Ansicht mit Klick auf **Vergrößern** und **Verkleinern** vergrößern bzw. verkleinern.
- ▶ Firmenlogo in Report ergänzen. Nach Klick auf Button **Laden** im Bereich **Report-Logo** Logo in Windows-Dateiverwaltung auswählen und mit **Öffnen** in Report laden.
- ▶ Nach Klick auf **Drucker-Optionen** Drucker einrichten.
- ▶ Nach Klick auf **Seite einrichten** Seiteneinstellungen wie Seitengröße oder Seitenausrichtung festlegen. Voreinstellung: A4, Hochformat. Layout auf aktuelle Seite oder alle Report-Seiten anwenden.
- ▶ Druck mit Klick auf **Drucken** starten.

#### Report speichern

- ▶ Report mit Klick auf Button **Speichern** speichern.
- ▶ Nach Klick auf **Speichern** Dateiname, Speicherverzeichnis und Dateityp im Fenster **Speichern unter** festlegen.

Sie können Reporte in folgenden Dateiformaten speichern: PDF (voreingestellt), RTF, HTML, TXT, FP3.

# Abbildungsverzeichnis

Abb. 1	Datenbank mithilfe Wizard installieren.....	11
Abb. 2	Datenbank-Passwort festlegen .....	11
Abb. 3	Netzwerkadresse eingeben .....	11
Abb. 4	Haken bei "StackBuilder" entfernen .....	12
Abb. 5	Software pgAdmin 4 starten .....	12
Abb. 6	Datenbank-Passwort eingeben .....	12
Abb. 7	Datenbank cdmserver erstellen.....	13
Abb. 8	Installation des CDM-Service.....	13
Abb. 9	CDM-Service als Windowsdienst einrichten.....	14
Abb. 10	Eigenschaften des Windows-Dienstes.....	14
Abb. 11	Browser-Anzeige bei Test des CDM-Services als Windows-Dienst.....	15
Abb. 12	Fenster Lizenz-Management .....	17
Abb. 13	Fenster Lizenz-Management .....	20
Abb. 14	Fenster CDM-Verbindung auswählen .....	21
Abb. 15	Panel Gerätesteuerung .....	28
Abb. 16	Panel Gerätestatus.....	29
Abb. 17	Panel Geräteinformationen.....	29
Abb. 18	Dialogfenster Methoden.....	30
Abb. 19	Bereich Gruppen.....	32
Abb. 20	Fenster Software-Einstellungen, Tab Allgemein .....	35
Abb. 21	Fenster Software-Einstellungen, Tab Einheiten .....	38
Abb. 22	Fenster Software-Einstellungen, Tab Speicherung, Export und Report .....	40
Abb. 23	Fenster Benutzer verwalten .....	45
Abb. 24	Fenster Methoden .....	52
Abb. 25	Fenster Neue Sequenz .....	67
Abb. 26	Fenster Sequenzen.....	72
Abb. 27	Wizard Kalibrierungs-Assistent.....	73
Abb. 28	Verdünnungstablett .....	94
Abb. 29	Fenster Kalibrierungen .....	101
Abb. 30	Fenster Ergebnisse.....	105
Abb. 31	Fenster Ergebnistabelle .....	106
Abb. 32	Panel Infos.....	109
Abb. 33	Panel Messparameter.....	110
Abb. 34	Panel Replikate .....	111
Abb. 35	Panel Berechnungsparameter.....	111
Abb. 36	Fenster Justierung Autosampler .....	119
Abb. 37	Fenster Geräte verwalten .....	120
Abb. 38	Fenster Manuelle Einzelansteuerung .....	121
Abb. 39	Fenster Customize.....	125

---

Abb. 40	Menü Hilfe.....	127
Abb. 41	Fenster Benutzer verwalten .....	129
Abb. 42	Fenster Audit Trail .....	135
Abb. 43	Wizard SST erstellen .....	142
Abb. 44	Fenster SSTs .....	143