

---

# TitriSoft

SOFTWARE

Version 3.5.4/3.5.4 P

---

**SI Analytics**

a **xylem** brand

## INHALTSVERZEICHNIS

1	Systemvoraussetzungen.....	5
1.1	Hardwarevoraussetzungen.....	5
1.2	Kompatibilität.....	5
2	Setup und Installation.....	5
2.1	Setup und Installation.....	5
2.2	Der erste Start.....	6
3	Einstellungscenter.....	7
3.1	Management - Einstellungen.....	7
3.2	Application.....	7
3.2.1	Datenbank auswählen.....	9
3.3	Konfiguration.....	9
3.3.1	Konfiguration.....	9
3.3.2	Geräte.....	10
3.3.3	Elektroden.....	12
3.3.4	Reagenzien.....	13
3.3.5	Ergebnisse.....	13
3.3.6	Globale Variablen.....	14
3.3.7	Probentext.....	14
3.3.8	Probendaten.....	15
3.4	Profile.....	16
3.4.1	Benutzerprofil erstellen.....	16
3.4.2	Löschen eines Benutzerprofils.....	17
3.5	Benutzer.....	18
3.5.1	Funktionsübersicht.....	18
3.5.2	Voreingestellte Benutzer.....	18
3.5.3	Neuen Benutzer erstellen.....	18
3.5.4	Benutzer bearbeiten (Status Änderung).....	21
3.6	Logging.....	21
3.7	Audit Trail.....	21
3.8	Logout.....	22
4	Titrationcenter.....	23
4.1	Arbeitslistencenter.....	23
4.1.1	Funktionsübersicht.....	23
4.1.2	Im- und Exportieren von Arbeitslisten.....	24
4.1.3	Arbeitslistenspalten organisieren.....	24
4.1.4	Arbeitslisteneinstellungen.....	25
4.1.4.1	Durchführung und Dokumentation einer pH – Kalibrierung.....	26
4.1.4.2	Verwendung eines Probenwechslers.....	28

4.2	Methodencenter.....	29
4.2.1	Funktionsübersicht .....	30
4.2.2	Hinzufügen einer neuen Methode.....	30
4.2.3	Titrationenbausteine .....	31
4.2.3.1	Titrationsschleifen.....	32
4.2.3.1.1	Endpunktstirationen.....	32
4.2.3.1.2	Lineare Titration .....	34
4.2.3.1.3	Dynamische Titration.....	36
4.2.3.1.4	pH-Stat Titration .....	38
4.2.3.1.5	Photometrische Titrationen.....	40
4.2.3.2	Berechnungen.....	40
4.2.3.2.1	Ergebnistyp .....	41
4.2.3.2.2	Der Formeleditor .....	44
4.2.3.3	Messbaustein .....	46
4.2.3.4	Dosierbaustein .....	47
4.2.3.5	Wartezeit, Rührgeschwindigkeit und Kurve zurücksetzen.....	47
4.2.3.6	IO-Box und Pumpenansteuerung .....	47
4.2.3.7	Direktkommando .....	48
4.2.3.8	ISE .....	48
4.2.3.8.1	ISE – Kalibration.....	49
4.2.3.8.2	ISE-Messung.....	50
4.2.3.8.3	ISE-Addition .....	51
4.2.3.9	Coulometrische Karl Fischer Titrationen .....	52
4.2.3.9.1	Parametereinstellungen des TitroLine 7500 KF Trace.....	52
4.2.3.9.2	Parametereinstellungen des Ofens TO 7280.....	54
4.2.3.9.3	Parametereinstellungen des Ofens mit Wechsler TW7650.....	55
4.2.3.10	Temperaturrampe.....	56
4.2.4	Logische Abfragen.....	56
4.2.5	Meldungen.....	57
4.3	Kurve und Schnellzugriff Probenwechsler.....	58
4.3.1	TW 7200.....	58
4.3.2	TW 7450.....	59
4.3.3	TO 7280 .....	59
4.3.4	TW 7650.....	59
4.3.5	Rührerbefehle.....	60
4.4	Beispielablauf einer Methode.....	60
4.4.1	Messung.....	60
4.4.2	Berechnung des Start pH-Wertes .....	61
4.4.3	Verdünnung der Probe .....	61

4.4.4	Zurücksetzen der Kurve.....	61
4.4.5	Dynamische Titration.....	62
4.4.6	Berechnung des Äquivalenzpunktes.....	62
4.4.7	Berechnung des Ergebnisses .....	63
5	Datenbankcenter .....	64
5.1	Selektionsbereich .....	64
5.2	Probenansicht.....	65
5.2.1	Funktionsübersicht .....	65
5.2.2	Ansichtsübersicht .....	66
5.2.2.1	Titrationsskurve und Titrationssdaten.....	66
5.3	Tabellenansicht .....	67
5.3.1	Funktionsübersicht .....	68
6	Pharma-Version.....	68
6.1	Audit Trail .....	68
6.2	Prüfen und Freigeben von Methoden und Testergebnissen.....	69

## Copyright

© 2024, Xylem Analytics Germany GmbH  
Nachdruck - auch auszugsweise - nur mit schriftlicher Genehmigung.  
Deutschland, Printed in Germany.

## Hinweis

Die in dieser Anleitung gezeigten Screenshots dienen der allgemeinen Verdeutlichung. Diese können auf älteren TitriSoft-Versionen beruhen, sofern sich keine Änderungen zu der neuen Version ergeben haben.

## 1 Systemvoraussetzungen

### 1.1 Hardwarevoraussetzungen

Prozessor	Min. Dual core, 2 MHz oder vergleichbare Prozessoren
Arbeitsspeicher	Min. 4 GB
Speicherplatz	Min 20 GB
Betriebssystem	Windows 7 oder höher
Sonstiges	Microsoft .NET Framework 4.7 oder höher
Schnittstelle	1 x RS 232 oder 1 x USB

### 1.2 Kompatibilität

TitriSoft – Datenbanken ab Version 3.3.0 können unter Titrisoft 3.4.0/3.5X weiter genutzt werden.

**Achtung:** Beim ersten Öffnen einer Titrisoft 3.3.x - Datenbank muss mindestens ein Benutzerprofil erstellt, den Nutzern zugewiesen und anschließend Titrisoft neu gestartet werden. Wurde eine Datenbank einmal mit Titrisoft 3.4/3.5X geöffnet, so ist diese nicht mehr unter Titrisoft 3.3.x verwendbar. Datenbanken von älteren Versionen als TitriSoft 3.3.0 sind nicht kompatibel.

## 2 Setup und Installation

### 2.1 Setup und Installation

Titrisoft wird auf einem USB-Stick geliefert, welcher alle notwendigen Dateien und Treiber enthält.

Zum Installieren wird die Datei **Titrisoft\_3.5\_Setup** auf dem USB-Stick ausgeführt und die abgefragten Einstellungen vorgenommen. Voreingestellt für die Installation von Titrisoft ist der Dateipfad **C:\Xylem Analytics**.

In diesem Ordner sind nach der Installation unter anderem 2 Datenbanken vorhanden: eine leere Datenbank **Titrisoft35.mdb** und eine Datenbank mit Beispiel-Methoden, **Titrisoft35\_examples.mdb**. Die Pharmaversion der TitriSoft wird zusätzlich mit einer **Titrisoft35\_P.mdb** bzw. **Titrisoft35\_P\_examples.mdb** ausgeliefert.

Die Datenbank kann nach der Installation auch an einem anderen Speicherort (z.B. einem Netzwerklaufwerk) abgelegt werden. Hier müssen volle Lese- und Schreibrechte vorhanden sein.

## 2.2 Der erste Start

TitriSoft wird durch Ausführen der **TitriSoft.exe** gestartet. Diese befindet sich im Installationsordner oder wird über die Verknüpfung auf dem Desktop ausgeführt.



Es öffnet sich ein Anmeldefenster. Beim ersten Start von TitriSoft ist noch keine Datenbank ausgewählt. Durch Anklicken von  öffnet sich ein Explorer-Fenster, über das eine Datenbank ausgewählt werden kann.

Die Auswahl der Datenbank steht an dieser Stelle nur beim ersten Start zur Verfügung. Danach kann die Datenbank über die Systemeinstellungen in TitriSoft ausgewählt werden.

In den mitgelieferten Datenbanken sind 3 Benutzer voreingestellt.

Benutzername	Passwort	Level
ad	ad	Administrator
ad1	ad1	Administrator
op	op	Level 1

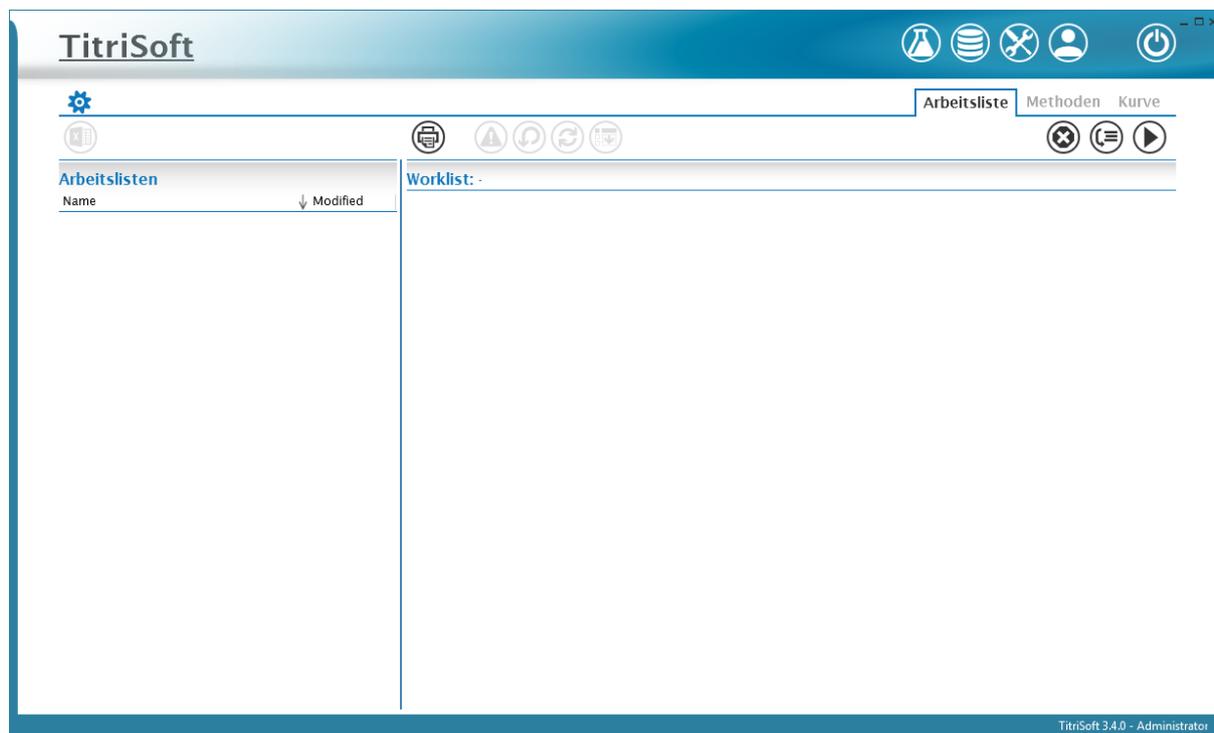
Der erste Login erfolgt mit einem der voreingestellten Benutzer **ad** oder **ad1** mit Administratorrechten mit Passwort **ad** bzw. **ad1**.

## 3 Einstellungszentrum

### 3.1 Management - Einstellungen

Im Einstellungszentrum werden alle Systemeinstellungen für TitrSoft vorgenommen. Bei der Installation von TitrSoft wird diese mit den Geräten verbunden, neue Benutzer können angelegt oder die Datenbank gewechselt werden.

Das Einstellungszentrum erreicht man über den  Button.



### 3.2 Application

Im Menü **Application** finden sich Informationen zur Programmversion, zur Datenbank sowie statistische Daten.

Name	Value
<b>Programm</b>	
Version	3.5.3.0
<b>Statistik</b>	
Konfigurationen	1
Methoden	0
Arbeitslisten	0
Proben	
<b>Datenbank Optionen</b>	
Speicherort der TitrSoft-Datenbank	
Backup-Pfad	
Backup-Intervall (Tagen)	7
Anzahl gespeicherter Backups	20
Letztes Backup	11.08.2023 11:53
<b>Sicherheit</b>	
Active directory domain	
Änderungsintervall (Monaten)	600
Minimale Länge	0
Numerisches Zeichen erforderlich	<input type="checkbox"/>
Sonderzeichen erforderlich	<input type="checkbox"/>
Erlaubte Anzahl gleicher Passwörter	0
Anzahl Passwortversuche	3
<b>Auto Logoff</b>	
Auto Logoff	<input checked="" type="checkbox"/>
Auto logoff interval (min)	5
<b>Pharma Einstellungen</b>	
Sammelfreigaben sperren	<input type="checkbox"/>
<b>Konfigurationen</b>	
Config 1	Idle

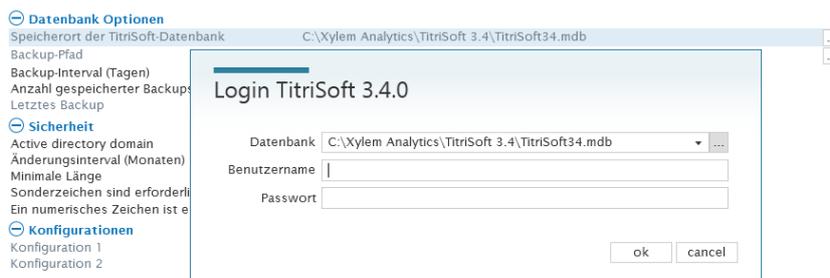
Version	Anzeige der installierten TitriSoft-Version.
Statistik	Statistische Daten über die Anzahl verwendeter Konfigurationen, Methoden, Arbeitslisten und gespeicherter Proben.
Speicherort der TitriSoft-Datenbank	Auswahl einer neuen Datenbank. Siehe auch Kapitel <b>3.2.1 Datenbank auswählen</b> .
Backup - Pfad	Speicherort der Backup-Dateien.
Backup - Interval (Tagen)	Definiert die Häufigkeit, mit der ein Backup durchgeführt werden soll.
Anzahl gespeicherter Backups	Legt die Anzahl an zurückliegend gespeicherten Backup – Dateien fest. Dateien hierüber hinaus werden automatisch gelöscht.
Letztes Backup	Zeigt an, wann das letzte Backup durchgeführt wurde.
Active directory domain	In Vorbereitung.
Änderungsinterval (Monaten)	Legt den Zeitrahmen fest, nachdem ein Anwender ein neues Passwort vergeben muss. Das neue Passwort darf nicht identisch mit den zwei letzten Passwörtern sein.
Minimale Länge	Legt die minimale Länge eines Passworts fest.
Sonderzeichen sind erforderlich	Legt fest, ob für das Passwort Sonderzeichen erforderlich sind.
Ein Numerisches Zeichen ist erforderlich	Legt fest, ob für das Passwort numerische Zeichen erforderlich sind.
Erlaubte Anzahl gleicher Passwörter	Legt fest, nach welcher Anzahl an unterschiedlichen Passwörtern wieder ein identisches Passwort vergeben werden kann
Anzahl Passwortversuche	Legt fest, nach wieviel Fehlversuchen ein Benutzer Account gesperrt wird
Auto logoff	Wenn aktiviert, sperrt sich TitriSoft nach einer definierten Zeit automatisch. Aktive Arbeiten laufen im Hintergrund weiter
Auto logoff interval (min)	Legt das Intervall fest, nachdem sich TitriSoft bei Inaktivität automatisch sperrt
Sammelfreigaben sperren	Sperrt die Möglichkeit, Sammelfreigaben von mehreren Proben in einem Freigabeschritt durchzuführen (nur Pharmaversion)

### 3.2.1 Datenbank auswählen

Unter **Speicherort der TitriSoft-Datenbank** wird der Speicherort der TitriSoft-Datenbank angezeigt.

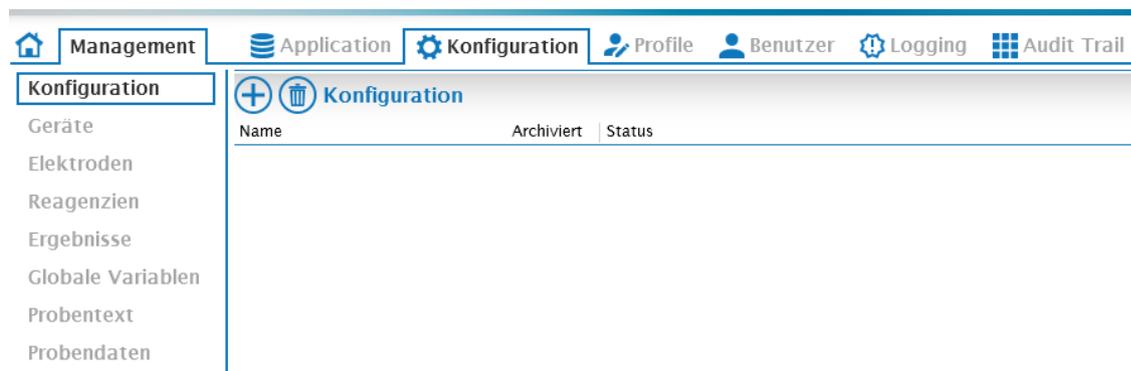


Über  kann eine Datenbank gewechselt werden. Zunächst öffnet sich das Anmeldefenster. Hier können über ein Dropdown-Menü  die zuletzt verwendeten Datenbanken ausgewählt werden. Über  öffnet sich ein Explorer - Fenster, über das eine neue Datenbank ausgewählt werden kann.



## 3.3 Konfiguration

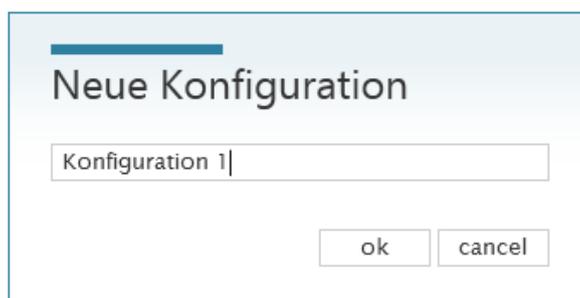
Unter **Konfiguration** werden Konfigurationen, Schnittstellen, Geräte, Elektroden, Reagenzien sowie verschiedene Variablen verwaltet.



### 3.3.1 Konfiguration

Eine Konfiguration ist eine virtuelle Zusammenstellung von Geräten. Innerhalb einer Konfiguration kann nur eine Arbeitsliste zur selben Zeit aktiv sein (siehe auch **4. Titrationscenter**). Sollen parallele Analysen durchgeführt werden, muss je eine Konfiguration pro gleichzeitig durchzuführender Analyse erstellt werden.

Mit  wird eine neue Konfiguration erstellt, die Bezeichnung kann frei gewählt werden.



Name	Archiviert	Status
Konfiguration 1	<input type="checkbox"/>	Idle
Konfiguration 2	<input checked="" type="checkbox"/>	Idle

Diese Konfiguration steht automatisch im Titrationscenter zur Verfügung.

Eine Konfiguration kann durch Aktivieren des entsprechenden Kontrollkästchens archiviert werden (im Beispiel Konfiguration 2). Diese Konfiguration ist dann im Titrationscenter nicht mehr sichtbar. Eine archivierte Konfiguration kann jederzeit über die Checkbox wieder aktiviert werden.

**Achtung: Das Löschen einer Konfiguration löscht alle Daten, die mit dieser Konfiguration erstellt worden sind!**

### 3.3.2 Geräte

Unter **Geräte** werden RS-Schnittstellen konfiguriert und Geräte gescannt.

Name	Value

Durch Anklicken von  werden alle verfügbaren Schnittstellen ermittelt.

Serielle Schnittstellen ermitteln

1 Serielle Schnittstelle(n) wurde(n) gefunden

ok

Dabei bezeichnet **RS1** eine interne Schnittstelle. In der rechten Spalte werden die Eigenschaften dieser Schnittstelle angezeigt und eingestellt.

Name	Value
Programm	21
COM-Port	1
Connection	Daisychain 4800 N 8 One

**COM-Port** entspricht der Computer-Adresse des entsprechenden COM-Ports, an dem die Titrationsgeräte angeschlossen sind.

**ID** ist die interne RS-Adresse der Schnittstelle (hier 1).

**Connection** legt die Parameter der Schnittstelle fest. **4800 N 8 one** ist voreingestellt und passend für alle aktuellen Titrationsgeräte von Xylem Analytics. Dabei entsprechen diese den folgenden Parametern.

Baudrate	4800
Parität	No
Datenbits	8
Stoppbits	1

**Achtung:** Für den Probenwechsler TW 7450 wird unter **Connection** die Option **Single device: TW7450** ausgewählt, da es sich hier nicht um ein Daisy Chain fähiges Gerät handelt.



Bei dem folgenden Scan wird nur die Verfügbarkeit der Schnittstelle überprüft, eine Verfügbarkeit des eigentlichen Gerätes erfolgt nicht.

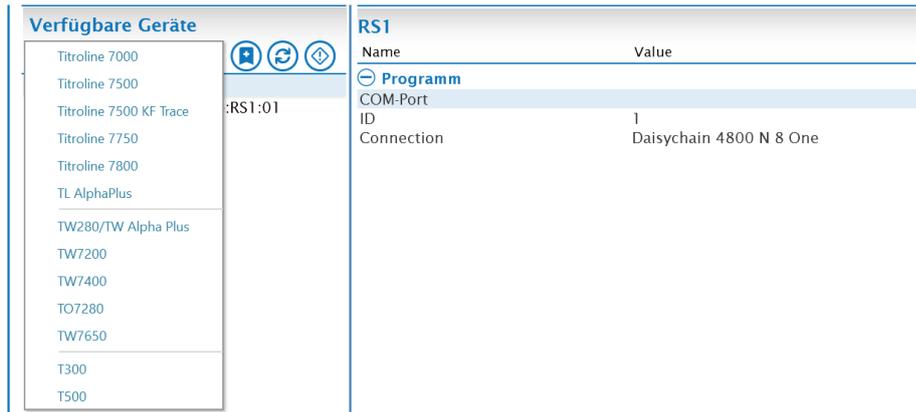
Mit  wird nach Geräten gesucht, die an dieser Schnittstelle angeschlossen sind.



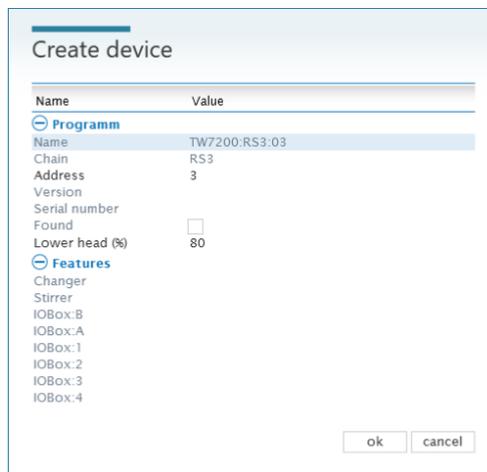
Das Popup-Fenster **Scan Hardware** zeigt alle gefundenen Geräte an. Diese Geräte werden automatisch unter **RS1** aufgeführt.

**Achtung:** Unter **RS1** werden auch **Geräte angezeigt, die bei einem früheren Scan gefunden oder manuell hinzugefügt wurden. Geräte mit gleicher Adresse werden ersetzt.**

Mit  können Geräte manuell hinzugefügt werden, die nicht angeschlossen sind jedoch verwendet sollen. Dies dient z.B. zur Vorbereitung von Methoden und Arbeitslisten.



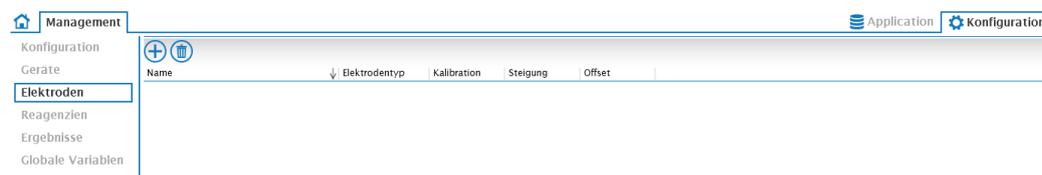
Nach Auswahl des gewünschten Gerätes wird diese unter dem RS Port aufgeführt. Die Geräteadresse 0 ist voreingestellt und muss angepasst werden. In dem folgenden Beispiel wurde ein Probenwechsler TW7200 mit der Adresse 3 hinzugefügt.



Geräte können mittels  wieder entfernt werden.

### 3.3.3 Elektroden

Unter **Elektroden** werden zur ISE – Messungen genutzte Elektroden angelegt. Aufgenommene Kalibrierdaten können hier eingesehen werden.



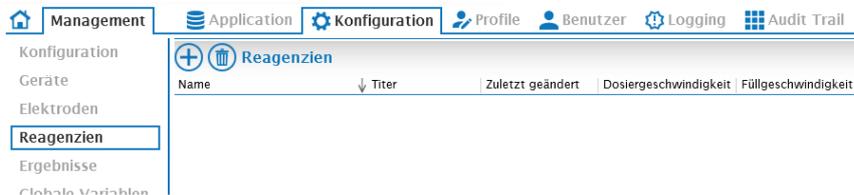
Mit  wird eine neue Elektrode hinzugefügt. Die Bezeichnung ist frei wählbar (Hier **Na 61**).



Eine angelegte Elektrode steht im Methodencenter für ISE – Messungen zur Verfügung. Kalibrationsdaten werden automatisch gespeichert.

### 3.3.4 Reagenzien

Angelegte Reagenzien werden hier verwaltet.



Über  kann ein neues Reagenz hinzugefügt werden.

+  Reagenzien				
Name	Titer	Zuletzt geändert	Dosiergeschwindigkeit	Füllgeschwindigkeit
NaOH	0,1	25.03.2020 11:53	0	0

Die Bezeichnung ist frei wählbar, die Konzentration (Titer) ist editierbar.

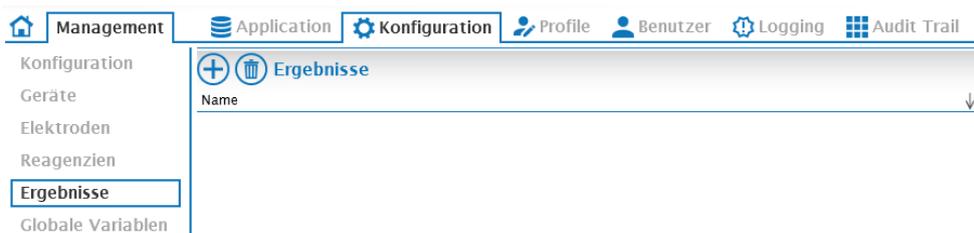
Ist die Bezeichnung des Reagenz identisch mit der Bezeichnung im Wechselaufsatz des Titrators oder der Bürette, so liest TitriSoft die Konzentration aus dem Wechselaufsatz aus und speichert diese in der Datenbank. Die bei einer Titerbestimmung bestimmte Konzentration wird bei identischer Bezeichnung auf den Wechselaufsatz übertragen und gespeichert.

Ein neues Reagenz wird in der Regel im Methodencenter erstellt. Diese sind ebenfalls in diesem Abschnitt zu finden.

Ein Reagenz, welches bereits in einer Methode verwendet wurde, kann nicht mehr gelöscht werden.

### 3.3.5 Ergebnisse

Unter **Ergebnisse** werden alle verfügbaren Ergebnisvariablen angezeigt.



Über  wird ein neues Ergebnis hinzugefügt. Die Bezeichnung ist frei wählbar. Es ist sinnvoll, die Bezeichnung des Ergebnisses und dessen Einheit zu verwenden.

+  Ergebnisse	
Name	Gehalt %

Die erstellten Ergebnisvariablen stehen im Titrationscenter zur Verfügung.

Eine neue Ergebnisvariable wird in der Regel im Methodencenter erstellt. Diese sind ebenfalls in diesem Abschnitt zu finden.

Eine Ergebnisvariable, die bereits in einer Methode verwendet wurde, kann nicht mehr gelöscht werden.

### 3.3.6 Globale Variablen

In dieser Rubrik werden alle verfügbaren globalen Variablen angezeigt.

Globale Variable sind Variablen, die Methodenübergreifend für Berechnungen zur Verfügung stehen. Globale Variablen werden z.B. für Blindwerte verwendet.

Name	Wert	zuletzt geändert

Mit wird eine neue globale Variable hinzugefügt. Die Bezeichnung ist frei wählbar. Der Wert der globalen Variablen ist editierbar, wird aber in der Regel automatisch über eine Berechnung in einer Methode aktualisiert (z.B. bei der Titration eines Blindwertes).

Name	Wert	zuletzt geändert
Blindwert	0,735	25.03.2020 12:15

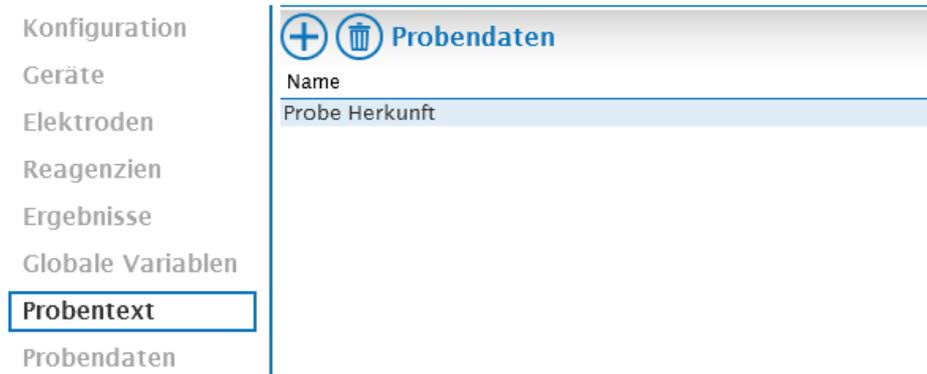
### 3.3.7 Probentext

Hier werden alle verfügbaren Probentext - Variablen angezeigt.

Probentext - Variable werden verwendet, um einer Probe zusätzliche Informationen hinzuzufügen, wie z.B. ihre Herkunft. Bei Verwendung einer Probentext - Variable wird der Arbeitsliste ein weiteres editierbares Textfeld, ähnlich dem Kommentar, hinzugefügt.

Name

Mit wird eine neue Probentext - Variable hinzugefügt. Die Bezeichnung ist frei wählbar. Der vergebene Name erscheint als Bezeichnung für das Eingabefeld in der Arbeitsliste.

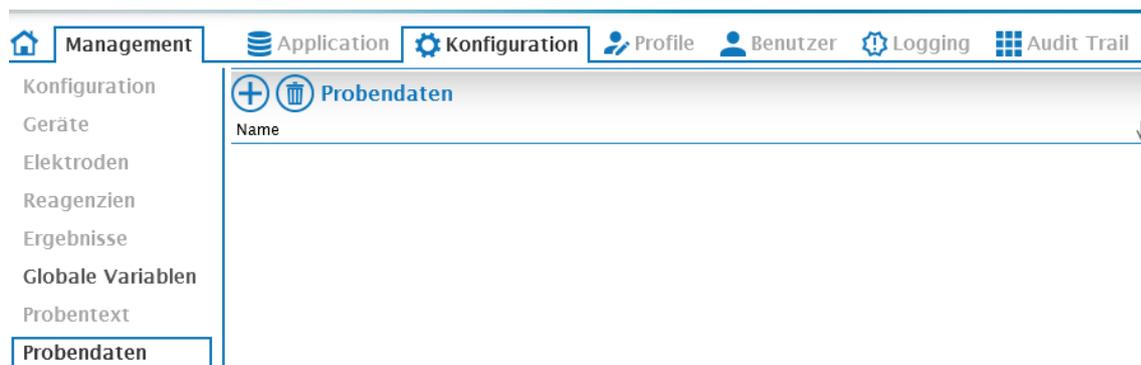


Die so erstellten Probentext – Variablen stehen im Titrationscenter zur Verfügung.

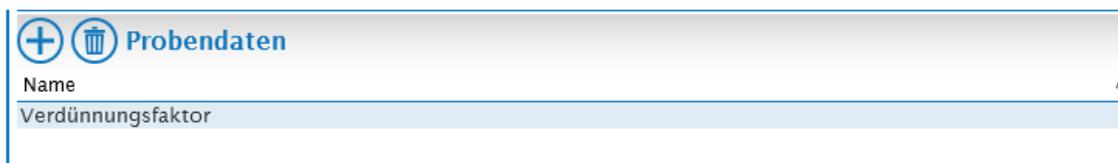
### 3.3.8 Probendaten

Hier werden alle verfügbaren Probendaten - Variablen angezeigt.

Probendaten – Variablen werden verwendet, um einer Probe zusätzliche numerische Informationen hinzuzufügen. Bei Verwendung einer Probendaten – Variable wird der Arbeitsliste ein weiteres editierbares numerisches Feld, ähnlich der Einwaage, hinzugefügt.



Über  wird eine neue Probendaten - Variable hinzugefügt. Die Bezeichnung ist frei wählbar. Der vergebene Name erscheint als Bezeichnung für das Eingabefeld in der Arbeitsliste.



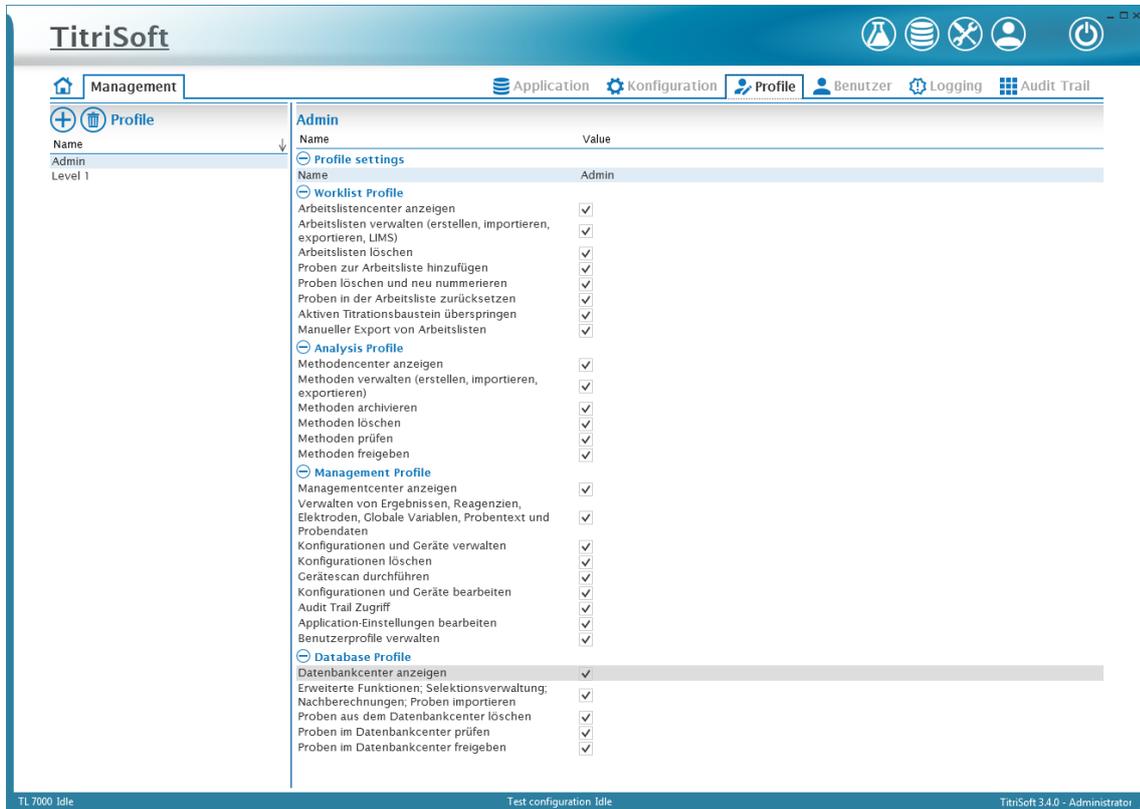
Die so erstellten Probendaten - Variablen stehen im Titrations- und Methodencenter zur Verfügung.

### 3.4 Profile

Unter der Rubrik **Profile** werden Benutzerprofile eingerichtet und verwaltet.

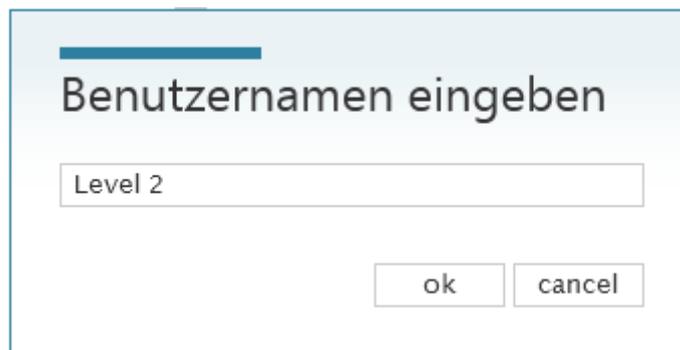
**Achtung: Es muss immer mindestens ein Benutzerprofil mit vollen Administratorrechten vorhanden und einem Benutzer zugewiesen sein!**

Voreingestellt sind die Profile Admin (mit allen Rechten) und Level 1 (eingeschränkte Rechte).



#### 3.4.1 Benutzerprofil erstellen

Über  wird ein neues Profil erstellt, die Bezeichnung kann frei gewählt werden.



In den **Profile Settings** können die gewünschten Rechte zugewiesen werden.

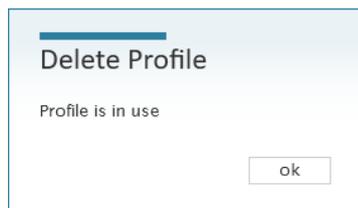
Kritische Bereiche im **Managementcenter** (alles außer **Management Center anzeigen** und **Gerätescan durchführen**) und **Datenbankcenter** (**Proben aus dem Datenbankcenter löschen**) sollten dem Administrator vorbehalten sein.

Name	Value
<b>Profile settings</b>	
Name	Admin
<b>Worklist Profile</b>	
Arbeitslistencenter anzeigen	<input checked="" type="checkbox"/>
Arbeitslisten verwalten (erstellen, importieren, exportieren, LIMS)	<input checked="" type="checkbox"/>
Arbeitslisten löschen	<input checked="" type="checkbox"/>
Proben zur Arbeitsliste hinzufügen	<input checked="" type="checkbox"/>
Proben löschen und neu nummerieren	<input checked="" type="checkbox"/>
Proben in der Arbeitsliste zurücksetzen	<input checked="" type="checkbox"/>
Aktiven Titrationsbaustein überspringen	<input checked="" type="checkbox"/>
Manueller Export von Arbeitslisten	<input checked="" type="checkbox"/>
<b>Analysis Profile</b>	
Methodencenter anzeigen	<input checked="" type="checkbox"/>
Methoden verwalten (erstellen, importieren, exportieren)	<input checked="" type="checkbox"/>
Methoden archivieren	<input checked="" type="checkbox"/>
Methoden löschen	<input checked="" type="checkbox"/>
Methoden prüfen	<input checked="" type="checkbox"/>
Methoden freigeben	<input checked="" type="checkbox"/>
<b>Management Profile</b>	
Managementcenter anzeigen	<input checked="" type="checkbox"/>
Verwalten von Ergebnissen, Reagenzien, Elektroden, Globale Variablen, Proben text und Proben daten	<input checked="" type="checkbox"/>
Konfigurationen und Geräte verwalten	<input checked="" type="checkbox"/>
Konfigurationen löschen	<input checked="" type="checkbox"/>
Gerätescan durchführen	<input checked="" type="checkbox"/>
Konfigurationen und Geräte bearbeiten	<input checked="" type="checkbox"/>
Audit Trail Zugriff	<input checked="" type="checkbox"/>
Application-Einstellungen bearbeiten	<input checked="" type="checkbox"/>
Benutzerprofile verwalten	<input checked="" type="checkbox"/>
<b>Database Profile</b>	
Datenbankcenter anzeigen	<input checked="" type="checkbox"/>
Erweiterte Funktionen; Selektionsverwaltung; Nachberechnungen; Proben importieren	<input checked="" type="checkbox"/>
Proben aus dem Datenbankcenter löschen	<input checked="" type="checkbox"/>
Proben im Datenbankcenter prüfen	<input checked="" type="checkbox"/>
Proben im Datenbankcenter freigeben	<input checked="" type="checkbox"/>

Alle Benutzerprofile stehen im Menü **Benutzer** zur Verfügung und können dort den einzelnen Benutzern zugewiesen werden.

### 3.4.2 Löschen eines Benutzerprofils

Über den  kann ein Profil gelöscht werden. Das Löschen ist jedoch nur möglich, wenn das ausgewählte Profil keinem Benutzer mehr zugeordnet ist. Eine entsprechende Meldung wird angezeigt, sollte das Profil noch zugeordnet sein.



### 3.5 Benutzer

Unter **Benutzer** werden alle angelegten Benutzer verwaltet.

Management          Application          Konfiguration          Profile <b>Benutzer</b> Logging				
Benutzer				
Name	↓ Vollständiger Name	Profil	Letzte Anmeldung	Status
ad	Administrator	Admin	15.08.2023 11:28	Active
ad1	Administrator 1	Admin		Active
op	Operator	Level 1		Active

#### 3.5.1 Funktionsübersicht

	Hinzufügen
	Benutzer hinzufügen

#### 3.5.2 Voreingestellte Benutzer

In den mitgelieferten Datenbanken sind drei Benutzer voreingestellt. Zwei Benutzer besitzen volle Administratorrechte und ein Benutzer eingeschränkte Rechte.

Benutzername	Passwort	Vollständiger Name	Level
ad	ad	Administrator	Admin
ad1	ad1	Administrator 1	Admin
op	op	Operator	Level 1

Es muss immer mindestens ein Benutzerprofil mit vollen Administratorrechten vorhanden sein.

#### 3.5.3 Neuen Benutzer erstellen

Benutzer				
Name	↓ Vollständiger Name	Profil	Letzte Anmeldung	Status
ad	Administrator	Admin	08.08.2023 11:21	Active
ad1	Administrator 1	Admin		Active
op	Operator	Level 1		Active

Mit wird ein neuer Benutzer erstellt. Es öffnet sich eine Eingabemaske zur Erstellung eines neuen Benutzers

Name	Value
Allgemein	
Name	
Vollständiger Name	
Status	Active
Profil	
Passwort	

Hier wird der Name (User ID) und vollständige Name des neuen Benutzers eingegeben.

**Achtung:** Werden diese Daten über **ok** bestätigt, ist eine nachträgliche Änderung nicht länger möglich!

Im Anschluss wird ein Profil zugeordnet und ein Status gewählt. Die folgenden Status können eingestellt werden.

Status	Bemerkung
Active	Der Status eines Aktiven Benutzers
Locked	Der Status eines Benutzers, nachdem sein Passwort die Anzahl erlaubter Fehlversuche bei der Eingabe überschritten hat.
Not active	Der Status eines Benutzers, der nicht länger aktiv ist (z.B. wegen Ausscheidens aus der Firma)
Reset	Wird ein Benutzer neu angelegt oder hat sich ausgesperrt (Status <b>Locked</b> ), setzt eine Admin den Status auf <b>Reset</b> . Nur in diesem Status kann ein Admin ein Passwort vergeben. Dieses muss beim ersten Einloggen neu vergeben werden. Wurde kein Passwort definiert, kann der Benutzer sich erstmalig ohne Passworteingabe einloggen, muss dann aber auch ein eigenes Passwort vergeben.

Die Auswahl des Benutzerprofils erfolgt über ein Dropdown – Menü, in dem die konfigurierten Profile zur Auswahl stehen.

Profil	Level 1
Passwort	Admin
	Level 1

Benutzernamen eingeben

Name	Value
Allgemein	
Name	Lab 1
Vollständiger Name	Labor 1
Status	Reset
Profil	Level 1
Passwort	••••

ok cancel

Der neue Benutzer muss beim ersten Anmeldevorgang sein Passwort neu vergeben. Bei der ersten Anmeldung wird der Benutzername (User ID) und das vom Admin vergebene Passwort eingegeben.

Login TitriSoft 3.5.3

Datenbank C:\Daten\Titrisoft\Softwareversionen\TitriSoft 3.5.3\2023-01-01

Benutzername Lab 1

Passwort ••••

ok

Es öffnet sich ein weiteres Fenster, in dem das neue Passwort vergeben wird. Das vom Admin vergebene Passwort muss erneut unter **Altes Passwort** eingegeben werden.

Login TitriSoft 3.5.3

Altes Passwort ••••

Neues Passwort ••••

Passwort bestätigen ••••

ok

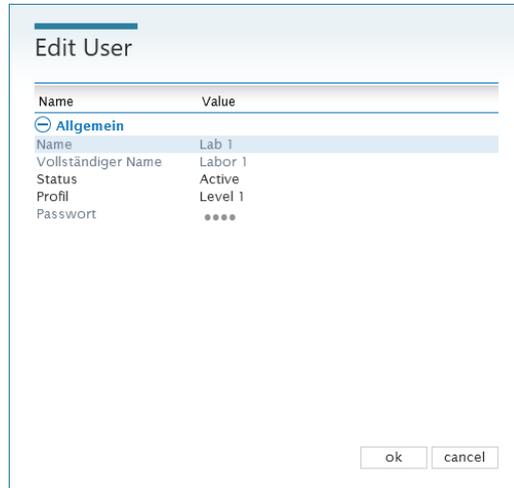
Das neue Passwort ist aktiv, bis es abgelaufen ist oder der Account zurückgesetzt wurde.

Ein User kann jederzeit selbstständig sein eigenes Passwort ändern. Hierzu wird der  Button im unteren rechten Bereich der Statuszeile verwendet.

**Achtung:** Das neue Passwort muss mit den unter **Application – Sicherheit** definierten Richtlinien übereinstimmen. Bei Nichtübereinstimmung wird eine Meldung mit den erforderlichen Anforderungen angezeigt.

### 3.5.4 Benutzer bearbeiten (Status Änderung)

Über  kann ein Benutzer bearbeitet werden.

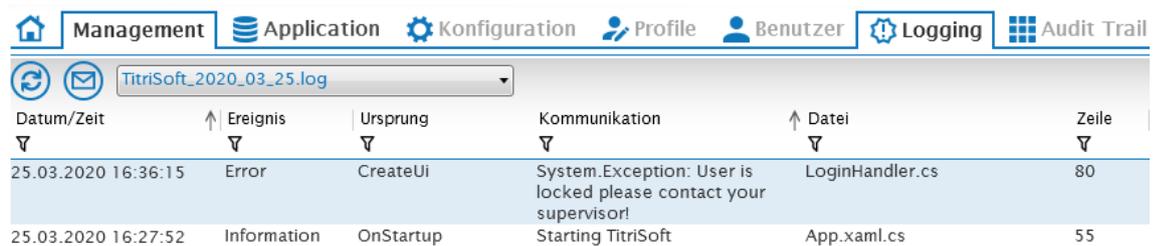


Name	Value
Allgemein	
Name	Lab 1
Vollständiger Name	Labor 1
Status	Active
Profil	Level 1
Passwort	****

Der Status des Benutzers kann geändert werden (z.B. von **Locked** auf **Reset**) und dem Benutzer kann ein neues Profil zugewiesen werden. Eine nachträgliche Änderung des Namens oder der User ID ist nicht möglich. Ein neues Passwort kann nur bei Auswahl des Status **Reset** vergeben werden. Zum Ablauf der Passwortvergabe und verfügbaren Status siehe Kapitel **3.5.3 Neuen Benutzer erstellen**.

## 3.6 Logging

Unter **Logging** wird die Kommunikation von TitriSoft mit den Geräten dokumentiert.



Datum/Zeit	Ereignis	Ursprung	Kommunikation	Datei	Zeile
25.03.2020 16:36:15	Error	CreateUi	System.Exception: User is locked please contact your supervisor!	LoginHandler.cs	80
25.03.2020 16:27:52	Information	OnStartup	Starting TitriSoft	App.xaml.cs	55

Die Log-Dateien werden im Unterordner **Logging** gespeichert. Dieser befindet sich in demselben Unterordner, in dem die **TitriSoft.exe** installiert wurde. Die Tracer-Dateien werden für 6 Monate gespeichert.

**Achtung: Log-Dateien dienen zur Fehleranalyse bei Problemen mit der RS-Kommunikation!**

## 3.7 Audit Trail

Der Audit Trail ist nur in der Pharma – Version von Titrisoft verfügbar. Siehe auch Kapitel **6. Pharma – Version**.

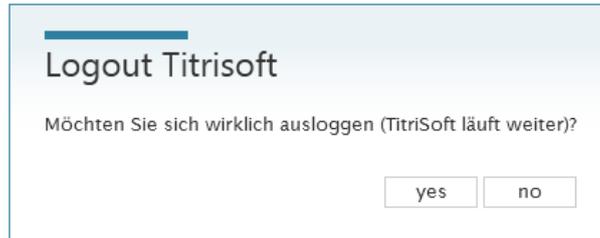
### 3.8 Logout

TitriSoft bietet die Möglichkeit, einen Benutzer abzumelden bzw. zu wechseln.

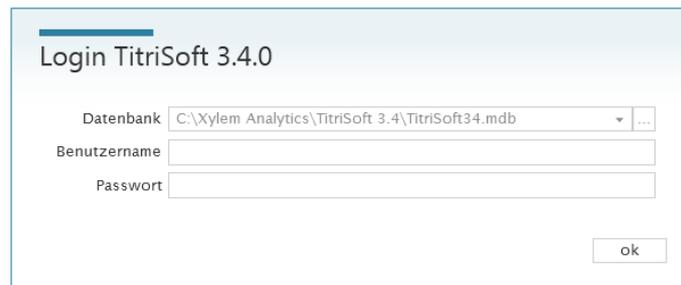
Das Abmelden erfolgt über den Logout – Button .



Nach Bestätigung des Logouts ist der aktuelle User abgemeldet.



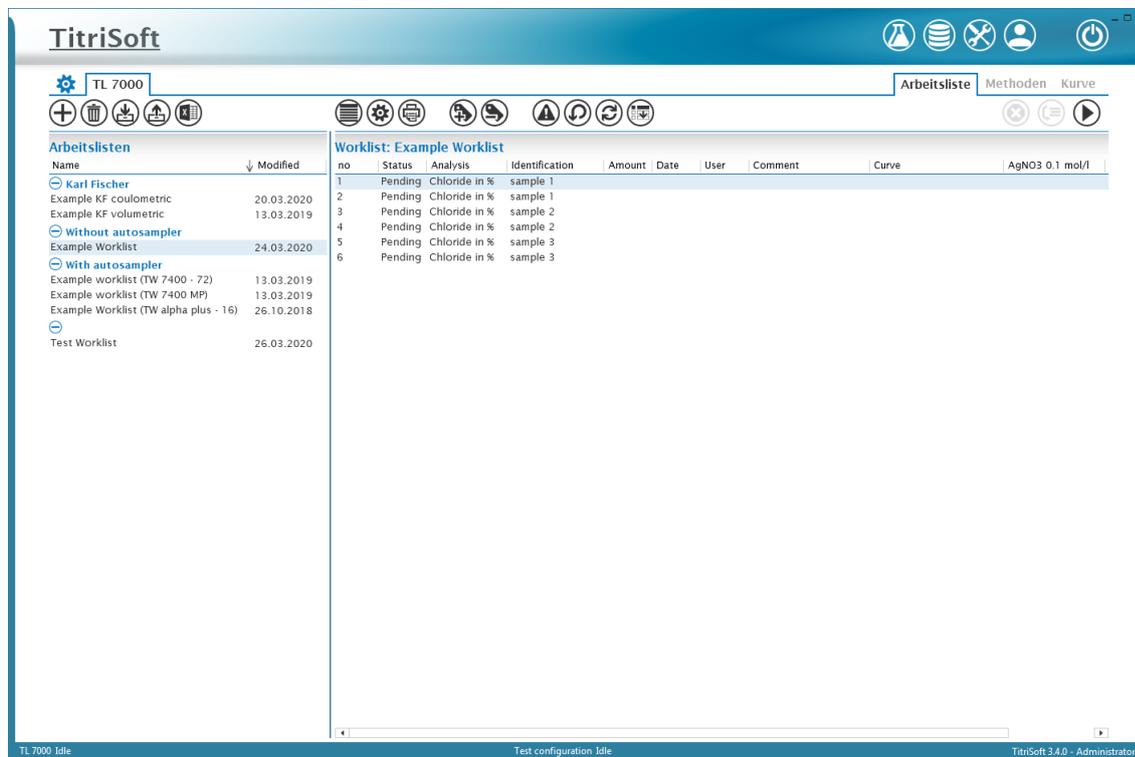
Nach dem Abmelden wird das Anmeldefenster angezeigt. TitriSoft arbeitet im Hintergrund weiter.



Es wird jeweils der Nutzer dokumentiert, bei dem die Probe gestartet wurde. Bei Neuansmeldung wird der neu angemeldete User dokumentiert. Nach einem Schichtwechsel ist somit nachvollziehbar, wer in TitriSoft angemeldet war.

## 4 Titrationscenter

Nach Start von TitrSoft und Anmeldung mit Benutzernamen und Passwort öffnet sich automatisch das **Titrationcenter**. Dieses kann jederzeit auch über den  Button erreicht werden.



In dem Titrationscenter wird die tägliche Routinearbeit organisiert und durchgeführt. Die einzelnen Funktionen des Titrationscenter sind in den folgenden Kapiteln erläutert.

### 4.1 Arbeitslistencenter

#### 4.1.1 Funktionsübersicht

	Hinzufügen und Löschen von Arbeitslisten.
	Im- und Exportieren von Arbeitslisten. Siehe auch Kapitel <b>4.1.2 Im- und Exportieren von Arbeitslisten</b> .
	Erstellen eines LIMS Excel-Templates.
	Organisation der Arbeitslistenspalten. Siehe auch Kapitel <b>4.1.3 Arbeitslistenspalten organisieren</b> .
	Aufruf der Arbeitslisteneinstellungen. Siehe auch Kapitel <b>4.1.4 Arbeitslisteneinstellungen</b> .
	Drucken der Arbeitsliste.

	Hinzufügen und Entfernen von Proben zu der Arbeitsliste. Nachdem eine Probe hinzugefügt wurde, kann in der Spalte Methode über  eine Methode ausgewählt werden. Werden anschließend weitere Proben hinzugefügt, ist die zuvor gewählte Methode automatisch ausgewählt.
	Setzen einer Priorität. Diese Probe wird bevorzugt behandelt und als nächste Probe gemessen. Im Anschluss wird die Arbeitsliste normal abgearbeitet.
	Zurücksetzen einer einzelnen Probe oder aller Proben in den Status Pending.
	Neunummerierung der Proben in der Arbeitsliste, z.B. nach Entfernen einer Probe.
	Abbrechen der aktiven Arbeitsliste. Die gesamte Arbeitsliste wird sofort gestoppt. Die Daten der laufenden Analyse werden nicht gespeichert.
	Überspringen des gerade aktiven Titrationsbausteines einer laufenden Methode. Dies wird hauptsächlich angewendet, um Titrationen, deren Endkriterium nicht gegriffen hat, zu beenden. Alle nachfolgenden Bausteine wie Berechnungen werden durchgeführt. Der manuelle Eingriff wird im Status der Probe dokumentiert.
	Starten einer Arbeitsliste.

#### 4.1.2 Im- und Exportieren von Arbeitslisten

Arbeitslisten können in einem TitrSoft internen .tw Dateiformat ex- und importiert werden. Die Arbeitslistenformate und -einstellungen werden hierbei hinterlegt, wodurch Vorlagen erstellt werden können.

#### 4.1.3 Arbeitslistenspalten organisieren

Title	In sample List	In Report	In Export
no	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Status	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Methode	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Bezeichnung	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Probenmenge	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Datum	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Anwender	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Kommentar	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Position	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Kurve	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

Die Spalten der Arbeitslisten können über die Pfeiltasten in ihrer Reihenfolge angepasst werden. Über die Checkboxes wird definiert, welche Informationen **in der Probenliste**, **im Report** (.pdf) und **im Export** (.xlsx oder .csv) angezeigt werden sollen.

#### 4.1.4 Arbeitslisteneinstellungen

Name	Value
<b>⊖ Allgemein</b>	
Name	Test Worklist
Kategorie	
Arbeitslistentyp	Normal
Erstellt von	Administrator
Erstellt am	22.04.2024 13:23
Zuletzt geändert am	06.05.2024 10:19
<b>⊖ Report-Eigenschaften</b>	
Reporttyp	Sample list
Reporttitel	
Querformat	<input type="checkbox"/>
Report bei Fertigstellung	<input type="checkbox"/>
<b>⊖ LIMS-Import Eigenschaften</b>	
Automatischer Import-Typ	<input type="checkbox"/>
<b>⊖ Export Eigenschaften</b>	
Exportieren bei Fertigstellung	None
Export nach jeder Probe	<input type="checkbox"/>
Datum in Export-Dateinamen einfügen	<input type="checkbox"/>
<b>⊖ pH-Kalibration</b>	
Kalibrationspuffer	None
<b>⊖ Changer Properties</b>	
Wechsler	

Name	Name der Arbeitsliste.
Kategorie	Weist der Arbeitsliste eine Kategorie zu. Einzelne Arbeitslisten können zur Strukturierung zu frei definierbaren Kategorien zusammengefasst werden.
Arbeitslistentyp	Normal oder Datencollector. Der Datencollector kann verwendet werden, wenn Titrationsdaten nur vom Titrator übernommen werden sollen. Die Steuerung erfolgt über den Titrator. Nur für volumetrische oder coulometrische KF-Titrationen verwendbar.
Reporttyp	Curve List, Sample List oder Single Curve. Entsprechen unterschiedlichen Ausdruckformaten.
Reporttitel	Titel, der als Kopfzeile auf dem Report gedruckt wird.
Querformat	Bei Aktivierung Anordnung des Reports in Querformat.
Report bei Fertigstellung	Bei Aktivierung wird am Ende einer Arbeitsliste automatisch ein Report erzeugt. Nach Aktivierung kann ein Speicherpfad ausgewählt werden.
Automatischer Import	Automatischer Import einer LIMS-Datei zur Übernahme von Probeninformationen in die Arbeitsliste.
Exportieren bei Fertigstellung	Bei Aktivierung wird automatisch eine .csv, .xlsx oder .xlsm Datei bei <b>Fertigstellung einer Arbeitsliste</b> erstellt. Nach Aktivierung kann ein Speicherpfad ausgewählt werden.
Export nach jeder Probe	Bei Aktivierung wird automatisch eine .csv, .xlsx oder .xlsm Datei nach <b>Messung einer Probe</b> erstellt. Nach Aktivierung kann ein Speicherpfad ausgewählt werden.
Datum im Export-	Bei Aktivierung wird dem Dateinamen automatisch ein Datum und eine Uhrzeit angefügt. Andernfalls wird eine

Dateinamen einfügen	bereits vorhandene Datei überschrieben.
pH calibration	Einstellung einer pH – Kalibration. Siehe Kapitel <b>4.1.4.1 Durchführung und Dokumentation einer pH Kalibrierung</b>
Wechsler	Bei Verwendung eines Probenwechslers wird dieser hier ausgewählt. Zu den Einstellungen siehe Kapitel <b>4.1.4.2. Verwendung eines Probenwechslers.</b>

#### 4.1.4.1 Durchführung und Dokumentation einer pH – Kalibrierung

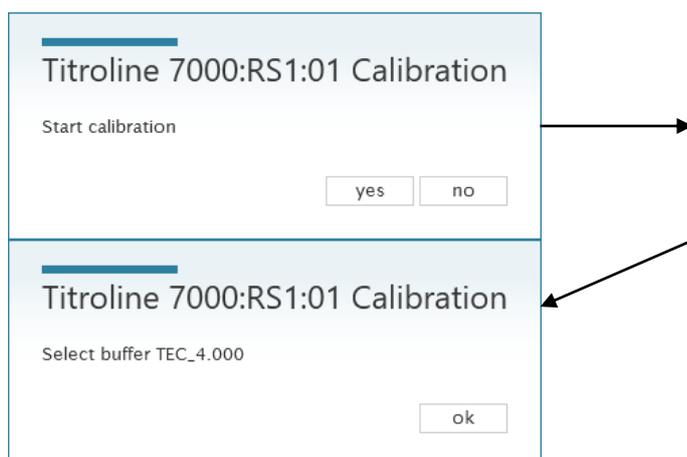
##### pH calibration

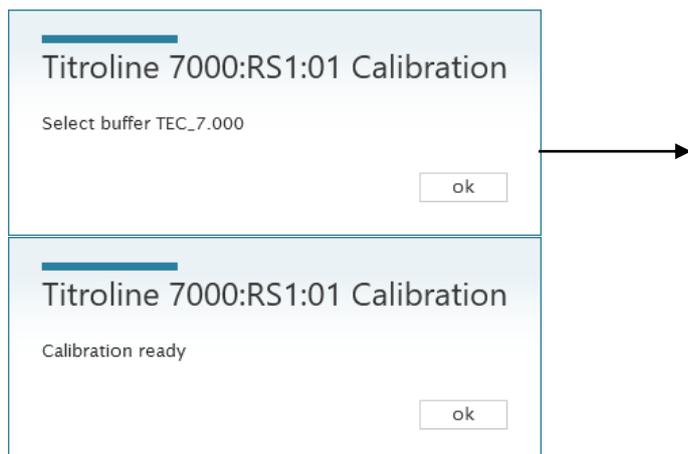
Kalibrationspuffer	2
Kalibrationsgerät	Titroline 7800:RS1:01
Kalibrationskanal	A

Kalibrationspuffer	Legt die Anzahl der verwendeten Puffer fest (2,3,5 oder 7).
Kalibrationsgerät	Legt fest, an welchem Titrator der zu kalibrierende pH Sensor angeschlossen ist.
Kalibrationskanal	Legt fest, an welchem Anschluss des Titrators der pH Sensor angeschlossen ist. A = Analog (DIN – Anschluss), B = Digitaler Anschluss (IDS, nur TL 7800)

Die Einstellung, welche Puffer für die Kalibrierung verwendet werden, erfolgt in den Kalibrationseinstellungen des Titrators. Die Anzahl der zu verwendenden Kalibrationspunkte muss in TitriSoft und dem Titrator übereinstimmen.

Die pH - Kalibrierung kann mit und ohne Probenwechsler durchgeführt werden. Wird kein Probenwechsler verwendet, wird der Ablauf der Kalibrierung über Meldungen am Bildschirm gesteuert, hier am Beispiel einer 2-Punkt-Kalibrierungen mit Technischen Puffern 4 und 7 dargestellt.





Ist in der Arbeitsliste ein Probenwechsler konfiguriert, erfolgt die Kalibrierung des pH-Sensor automatisch auf dem Probenwechsler. In diesem Fall muss ausgewählt werden, ob die für die Kalibrierung benötigten Positionen in den ersten oder letzten Positionen des Tellers blockiert werden. Die Durchführung der Kalibrierung wird nun komplett von TitrSoft übernommen.



Das Ergebnis der Kalibrierung wird im Datenbankcenter dokumentiert. TitrSoft erstellt automatisch eine Methode „Calibration“, die als TL Method im Analysencenter erscheint.

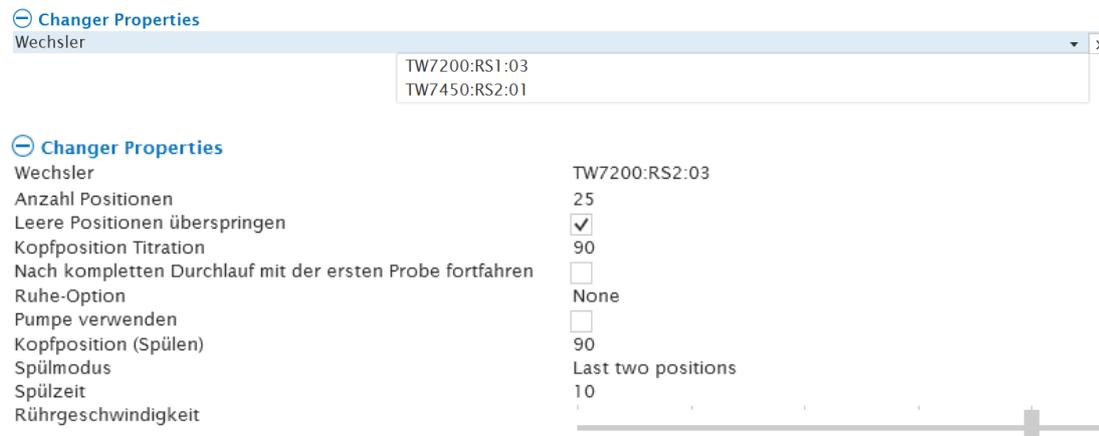
**Achtung: TL methods können nicht in einer Arbeitsliste verwendet werden!**

### Information

Name	Value
<b>⊖ Allgemein</b>	
Methode	Calibration
Version	1
Datum	23.04.2024 16:13
Benutzer	Jens Hillerich
Bezeichnung	
Status	Ready
Revision	None
Amount	
Series	
Kommentar	
<b>⊖ Elektroden Daten</b>	
pH Offset	6,90
pH Slope	99,5
pH Calibration	04/23/24 15:54:32
	El:
	ID:
<b>⊖ Ergebnisse</b>	
TEC_4.000 (mV)	169,8
TEC_4.000 (°C)	24,3
TEC_7.000 (mV)	-6,5
TEC_7.000 (°C)	24,3

#### 4.1.4.2 Verwendung eines Probenwechslers

Über ein Drop/Down-Menu können angeschlossene Probenwechsler ausgewählt werden.



Anzahl Positionen	Entspricht der Anzahl der Position des Tellers bzw. Racks des Probenwechslers.
Leere Positionen überspringen	Nur für TW 7200 (Probenwechsler mit Bechersensor). Bei Aktivierung werden Positionen ohne Becherglas übersprungen.
Kopfposition Titration	Definiert die Prozentzahl, um die der Kopf bei einer Titration gesenkt wird.
Nach komplettem Durchlauf mit der ersten Position fortfahren	Bei Aktivierung wird mit der ersten Position fortgefahren, nachdem ein kompletter Durchlauf des Racks erfolgte. Andernfalls wird die Arbeitsliste nach einem Durchlauf beendet.
Ruhe-Option	In diese Position fährt der Probenwechsler am Ende einer Arbeitsliste.
Pumpe verwenden	Bei Aktivierung wird die Pumpe zum Spülen verwendet. Die Kopfposition während des Spülens kann definiert werden. Die Positionen, in denen die Pumpe spült, erfolgt unter dem Punkt Spülmodus. Ist hier <b>None</b> ausgewählt, reinigt die Pumpe in der Probenposition. <b>Achtung:</b> Wird der TW 7200 verwendet, muss die Spülpumpe am Anschluss <b>Pump 2</b> angeschlossen werden!
Kopfposition (Spülen)	Definiert die Prozentzahl, um die der Kopf in der gewählten Spülposition gesenkt wird.
Spülmodus	Legt die Positionen fest, in denen gespült wird. Ist keine Pumpe aktiv, erfolgt die Reinigung in den Bechergläsern der definierten Positionen.
Spülzeit	Legt den Zeitraum fest für den gespült werden soll.
Rührgeschwindigkeit	Legt die Rührgeschwindigkeit während des Spülprozesses fest.

## 4.2 Methodencenter

**TitriSoft** Arbeitsliste Methoden Kurve

TL 7000

Methode	Alkalinity (p+m)	Version	Alkalinity (p+m)
<b>Methoden</b>	<b>Alkalinity (p+m)</b>	1	<b>Alkalinity (p+m)</b>
Name	Name	Value	Name
Alkalinity (p+m)	Endpunktstirration Titroline 7000:RS1:01:pHA 8.0; Burette: Titroline 7000:RS1:01		Methodenbeschreibung
Bases (non-aqueous)	Formel: XatY(8,2)		Name
Beispiel Sample-Variable	Formel: Result[ml at pH 8.2]*Titer[HCl 0.1 mol/l]*1000/Amount		Archiviert (nicht verfügbar in der Arbeitsliste)
Blank Bromine number	Endpunktstirration Titroline 7000:RS1:01:pHA 4.1; Burette: Titroline 7000:RS1:01		Version
Blank TAN ASTM 664	Formel: XatY(4,3)		Kategorie
Blank TBN ISO 3771	Formel: Result[ml at pH 4.3]*Titer[HCl 0.1 mol/l]*1000/Amount		Erstellt von
Bromine number			Erstellt am
Ca + Mg			Zuletzt geändert am
Chloride in %			
Chloride in mg/l			<b>Analysis Properties</b>
COD Blank			Stirrer
COD Sample			Balance
FOS/TAC			Stirrer
H2O2 (Ce(SO4)2)			Balance
Hydrochlorides			None
Mercaptane			<b>Methodenkommentar</b>
Methode Nachrichten			Kommentar
pH Stat (Enzyme Kinetic)			
pH Stat (Soil Samples)			
pH strong acid			
pH strong bases			
SO2			
Surfactants, anionic			
Surfactants, cationic			
TAN ASTM 664			
TBN ISO 3771			
Total acidity (pH 8.2)			
Total Hardness			
<b>Karl Fischer Titrations</b>			
KF Sample			
KF Titer			
<b>Standardisation</b>			
Titer AgNO3 0.1 mol/l			
Titer COD			
Titer EDTA 0.1 mol/l			
Titer HCl 0.1 mol/l			
Titer HClO4 0.1 mol/l			
Titer KOH			
Titer Na2S2O3 0.1 mol/l			
Titer NaOH 0.1 mol/l			

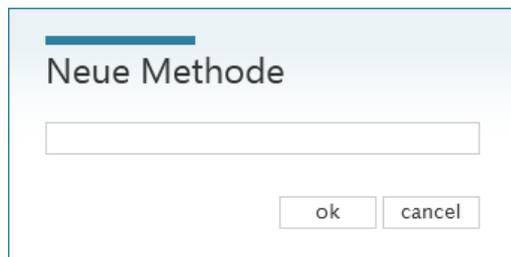
TL 7000 Idle TitriSoft 3.4.0 - Administrator

#### 4.2.1 Funktionsübersicht

	Hinzufügen einer neuen Methode. Siehe auch Kapitel <b>4.2.2 Hinzufügen einer neuen Methode</b> .
	Kopieren einer bereits bestehenden Methode.
	Löschen einer Methode.
	Importieren einer Methode.
	Exportieren einer Methode.
	Archivieren einer Methode. Diese steht nicht mehr in der Arbeitsliste zur Verfügung. Eine Archivierte Methode kann nicht bearbeitet werden.
	Titrationsteile zu der Methode hinzufügen. Siehe auch Kapitel <b>4.2.3 Titrationsbausteine</b> .
	Logische Abfragen zu einer Methode hinzufügen- Siehe auch Kapitel <b>4.2.4 Logische Abfragen</b> .
	Automatische Meldungen einer Methode hinzufügen. Siehe auch Kapitel <b>4.2.5 Meldungen</b> .
	Löscht einen bereits eingefügten Baustein wieder aus einer Methode.
	Druckt die aktuell angezeigte Version einer Methode.
	Wechselt zwischen den Versionen einer Methode. Wurde eine Methode für eine Titration mindestens einmal verwendet und anschließend geändert, wird die Versionsnummer automatisch hochgezählt und diese Version für die nächste Titration verwendet. Alte Versionen können eingesehen und gedruckt, aber nicht mehr verwendet werden.

#### 4.2.2 Hinzufügen einer neuen Methode

Nach Hinzufügen einer neuen Methode wird dieser ein Name zugewiesen.



The image shows a dialog box titled "Neue Methode". It contains a text input field for naming the new method. At the bottom right, there are two buttons labeled "ok" and "cancel".

Im rechten Fenster des Methodencenters werden die allgemeinen Informationen und Einstellungen der Methode angezeigt.

Alkalinity (p+m)	
Name	Value
<b>Methodenbeschreibung</b>	
Name	Alkalinity (p+m)
Archiviert (nicht verfügbar in der Arbeitsliste)	<input type="checkbox"/>
Version	1
Kategorie	Methods <span>...</span>
Erstellt von	Administrator
Erstellt am	23.10.2018
Zuletzt geändert am	26.10.2018
<b>Analysis Properties</b>	
Stirrer	<span>x</span>
Balance	None
<b>Methodenkommentar</b>	
Kommentar	

Name	Name der Methode. Kann jederzeit geändert werden (außer Pharmaversion bei geprüften/freigegeben Methoden).
Kategorie	Weist der Methode eine Kategorie zu. Einzelne Methoden können zur Strukturierung zu frei definierbaren Kategorien zusammengefasst werden.
Stirrer	Definiert das Gerät, welches zur Ansteuerung des Rührers verwendet werden soll. Wird mit einem Probenwechslers gearbeitet, wird dessen Rührer unabhängig von der Einstellung automatisch verwendet.
Balance	Bei Verwendung einer Waage zur Übertragung von Probeneinwaagen kann hier definiert werden, ob die übertragende Einwaage innerhalb definierter Grenzen sein muss (InRange) oder generell erforderlich ist (Required). Werte, die außerhalb der InRange-Grenzen sind, werden rot gekennzeichnet. Bei Required wird die Methode nur ausgeführt, wenn eine Einwaage übertragen oder eingetragen wurde.
Kommentar	Einer Methode kann ein manueller Kommentar hinzugefügt werden.

### 4.2.3 Titrationsbausteine

Für den Ablauf einer Methode können diverse Titrationsbausteine frei hinzugefügt werden.

Titrationsschleife
Berechnung
Messung
Dosieren
Wartezeit
Rührgeschwindigkeit
Kurve zurücksetzen
IO-Box
Direktkommando
ISE
Coulometer
Temperaturrampe

### 4.2.3.1 Titrationsschleifen

**Achtung:** Titrationsschleifen führen nur die eigentliche Titration (Messen und Dosieren) durch. Äquivalenz- oder Endpunkte werden über einen Berechnungsbaustein ermittelt und dokumentiert.

#### 4.2.3.1.1 Endpunktstitrationen

Endpunktstirration Titroline 7800:RS1:01:pHA 8,0; Bürette: Titroline 7800:RS1:01	
Name	Value
<b>Optionen</b>	
Typ	EndPoint
Parameter	Titroline 7800:RS1:01:pHA
Bürette	Titroline 7800:RS1:01
Reagenz	HCl 0.1 mol/l <span style="float:right">...</span>
Reagenz überprüfen	<input checked="" type="checkbox"/>
Füll-Optionen	Never
Rührgeschwindigkeit	
<b>Ende-Bedingungen</b>	
Endwert	8,0 <span style="float:right">...</span>
Endvolumen verwenden	<input checked="" type="checkbox"/>
Endvolumen	20 <span style="float:right">...</span>
Endpunktverzögerung	10
Lineare Schrittweite	0,02
Delta Wert	1,2
<b>Drift-Einstellungen</b>	
Messgeschwindigkeit	Custom
Dämpfung	None
Messzeit (s)	2
Delta mV/Minute	20
Minimale Zeit (s)	2
Maximale Zeit (s)	15
<b>Steigungs-Einstellungen</b>	
Steigungstyp	Custom down
Maximales Dosiervolumen	1
Minimales Dosiervolumen	0,05
Steigung bei max. Dosiervolumen	10
Steigung bei min. Dosiervolumen	120
<b>Anzeige-Einstellungen</b>	
Custom axis	<input type="checkbox"/>

Typ	Legt den Titrationstyp fest, hier Endpoint.
Parameter	Legt das Gerät, mit dem gemessen wird und den zu messenden Parameter fest (z.B. pH-Wert).
Bürette	Legt das Gerät fest, mit dem das Titrationsreagenz dosiert werden soll.
Reagenz	Name des zu dosierenden Reagenzes. Dieser muss mit dem auf dem Wechselaufsatz gespeicherten Reagenznamen übereinstimmen. Nur so wird die gespeicherte Konzentration des Reagenzes automatisch übernommen bzw. im Falle einer Standardisierung/Titerbestimmung auf dem Aufsatz gespeichert.
Reagenz überprüfen	Überprüfung, ob das definierte Reagenz mit dem Reagenz des Aufsatzes übereinstimmt.
Füll-Optionen	Legt den Zeitpunkt des automatischen Füllens fest.
Rührgeschwindigkeit	Legt die Rührgeschwindigkeit während der Titration fest.

Endwert	Messwert, an dem die Titration automatisch stoppt.
Endvolumen verwenden	Endvolumen, an dem die Titration automatisch stoppt, falls aktiviert. Empfohlen als Sicherheitskriterium.
Endpunktverzögerung	Zeitraumen, für den der Endpunkt gehalten werden muss.
Lineare Schrittweite	Schrittweite für den linearen Titrationsteil.
Delta Wert	Delta-Kriterium zum Endwert, ab dem die dynamische in die lineare Titration übergeht.
Messgeschwindigkeit	Legt den Zeitpunkt fest, nach dem ein Messwert aufgenommen und der nächste Dosierschritt durchgeführt wird. Es können vordefinierte oder anwenderspezifische Geschwindigkeiten verwendet werden.
Dämpfung	Verwendung einer Glättung des Messsignals. Wird in der Regel bei nicht-wässrigen Titration angewendet.
Messzeit (s)	Zeitraum, über den ein Messwert aufgenommen wird.
Delta mv/Minute	Stabilitätskriterium für den nächsten Dosierschritt der Titration.
Minimale Zeit (s)	Minimaler Zeitraum, der für den nächsten Dosierschritt gewartet wird.
Maximale Zeit (s)	Maximaler Zeitraum, der für den nächsten Dosierschritt gewartet wird.
Steigungstyp	Legt den Steigungstyp (steigend/fallend) und die Schrittweiten im dynamischen Teil der Titration fest. Es können vordefinierte oder anwender-spezifische Geschwindigkeiten verwendet werden. Bei Verwendung von Endwerten als Endkriterium definiert der Steigungstyp in welcher Richtung der Endwert liegt (steigende oder fallende Kurve).
Maximales Dosiervolumen	Maximaler Dosierschritt, der bei der Steigung bei max. Dosiervolumen angewendet wird.
Minimales Dosiervolumen	Minimaler Dosierschritt, der bei der Steigung bei min. Dosiervolumen angewendet wird.
Steigung bei max. Dosiervolumen	Steigung der Titrationskurve, bei welcher der max. Dosierschritt dosiert wird.
Steigung bei min. Dosiervolumen	Steigung der Titrationskurve, bei welcher der min. Dosierschritt dosiert wird.
Custom axis	Es können anwenderspezifische Achsen für die Titrationsgraphik definiert werden.

#### 4.2.3.1.2 Lineare Titration

Linear titration Titroline 7800:RS1:01:pHA 8,0; buret: Titroline 7800:RS1:01	
Name	Value
<b>Optionen</b>	
Typ	Linear
Parameter	Titroline 7800:RS1:01:pHA
Bürette	Titroline 7800:RS1:01
Reagenz	HCl 0.1 mol/l <span style="float: right;">...</span>
Reagenz überprüfen	<input checked="" type="checkbox"/>
Füll-Optionen	Never
Rührgeschwindigkeit	
<b>Ende-Bedingungen</b>	
Endwert verwenden	<input type="checkbox"/>
Endvolumen verwenden	<input checked="" type="checkbox"/>
Endvolumen	20 <span style="float: right;">...</span>
Anzahl EQ's	-
Lineare Schrittweite	0,02
<b>Drift-Einstellungen</b>	
Messgeschwindigkeit	Custom
Dämpfung	None
Messzeit (s)	2
Delta mV/Minute	20
Minimale Zeit (s)	2
Maximale Zeit (s)	15
<b>Steigungs-Einstellungen</b>	
Steigungstyp	Down
<b>Anzeige-Einstellungen</b>	
Custom axis	<input type="checkbox"/>

Typ	Legt den Titrationstyp fest, hier Linear.
Parameter	Legt das Gerät, mit dem gemessen wird und den zu messenden Parameter fest (z.B. pH-Wert).
Bürette	Legt das Gerät fest, mit dem das Titrationsreagenz dosiert werden soll.
Reagenz	Name des zu dosierenden Reagenzes. Dieser muss mit dem auf dem Wechselaufsatz gespeicherten Reagenznamen übereinstimmen. Nur so wird die gespeicherte Konzentration des Reagenzes automatisch übernommen bzw. im Falle einer Standardisierung/Titerbestimmung auf dem Aufsatz gespeichert.
Reagenz überprüfen	Überprüfung, ob das definierte Reagenz mit dem Reagenz des Aufsatzes übereinstimmt.
Füll-Optionen	Legt den Zeitpunkt des automatischen Füllens fest.
Rührgeschwindigkeit	Legt die Rührgeschwindigkeit während der Titration fest.
Endwert verwenden	Messwert, an dem die Titration automatisch stoppt, wenn aktiviert.
Endvolumen verwenden	Endvolumen, an dem die Titration automatisch stoppt wenn aktiviert. Empfohlen als Sicherheitskriterium.

Anzahl EQ's	Anzahl EQ's, die als Abbruchkriterium verwendet werden sollen.
EQ-Empfindlichkeit	Steigung der Titrationskurve, ab der ein Peak als EQ gewertet werden soll.
Lineare Schrittweite	Schrittweite der linearen Titration.
Messgeschwindigkeit	Legt den Zeitpunkt fest, nach dem ein Messwert aufgenommen und der nächste Dosierschritt durchgeführt wird. Es können vordefinierte oder anwenderspezifische Geschwindigkeiten verwendet werden.
Dämpfung	Verwendung einer Glättung des Messsignals. Wird in der Regel bei nicht-wässrigen Titration angewendet.
Messzeit (s)	Zeitraum, über den ein Messwert aufgenommen wird.
Delta mv/minute	Stabilitätskriterium für den nächsten Dosierschritt.
Minimale Zeit (s)	Minimaler Zeitraum, der für den nächsten Dosierschritt gewartet wird.
Maximale Zeit (s)	Maximaler Zeitraum, der für den nächsten Dosierschritt gewartet wird.
Steigungstyp	Definiert den Steigungstyp (steigend oder fallend). Bei Verwendung von Endwerten als Endkriterium definiert der Steigungstyp in welcher Richtung der Endwert liegt (steigende oder fallende Kurve).
Custom axis	Es können anwenderspezifische Achsen für die Titrationsgraphik definiert werden.

### 4.2.3.1.3 Dynamische Titration

Dynamische Titration Titroline 7800:RS1:01:pHA 8,0; Bürette: Titroline 7800:RS1:01	
Name	Value
<b>Optionen</b>	
Typ	Dynamic
Parameter	Titroline 7800:RS1:01:pHA
Bürette	Titroline 7800:RS1:01
Reagenz	HCl 0.1 mol/l <span style="float: right;">...</span>
Reagenz überprüfen	<input checked="" type="checkbox"/>
Füll-Optionen	Never
Rührgeschwindigkeit	
<b>Ende-Bedingungen</b>	
Endwert verwenden	<input type="checkbox"/>
Endvolumen verwenden	<input checked="" type="checkbox"/>
Endvolumen	20 <span style="float: right;">...</span>
Anzahl EQ's	1
EQ-Empfindlichkeit	150
<b>Drift-Einstellungen</b>	
Messgeschwindigkeit	Custom
Dämpfung	None
Messzeit (s)	2
Delta mV/Minute	20
Minimale Zeit (s)	2
Maximale Zeit (s)	15
<b>Steigungs-Einstellungen</b>	
Steigungstyp	Custom down
Maximales Dosiervolumen	1
Minimales Dosiervolumen	0,05
Steigung bei max. Dosiervolumen	10
Steigung bei min. Dosiervolumen	120
<b>Anzeige-Einstellungen</b>	
Custom axis	<input type="checkbox"/>

Typ	Legt den Titrationstyp fest, hier Dynamic.
Parameter	Legt das Gerät, mit dem gemessen wird und den zu messenden Parameter fest (z.B. pH-Wert).
Bürette	Legt das Gerät fest, mit dem das Titrationsreagenz dosiert werden soll.
Reagenz	Name des zu dosierenden Reagenzes. Dieser muss mit dem auf dem Wechselaufsatz gespeicherten Reagenznamen übereinstimmen. Nur so wird die gespeicherte Konzentration des Reagenzes automatisch übernommen bzw. im Falle einer Standardisierung/Titerbestimmung auf dem Aufsatz gespeichert.
Reagenz überprüfen	Überprüfung, ob das definierte Reagenz mit dem Reagenz des Aufsatzes übereinstimmt.
Füll-Optionen	Legt den Zeitpunkt des automatischen Füllens fest.
Rührgeschwindigkeit	Legt die Rührgeschwindigkeit während der Titration fest.
Endwert	Messwert, an dem die Titration automatisch stoppt wenn aktiviert.

Endvolumen verwenden	Endvolumen, an dem die Titration automatisch stoppt wenn aktiviert. Empfohlen als Sicherheitskriterium.
Anzahl EQ's	Anzahl EQ's, die als Abbruchkriterium verwendet werden sollen.
EQ-Empfindlichkeit	Steigung der Titrationskurve, aber der ein Peak als EQ gewertet werden soll.
Messgeschwindigkeit	Legt den Zeitpunkt fest, nach dem ein Messwert aufgenommen und der nächste Dosierschritt durchgeführt wird. Es können vordefinierte oder anwenderspezifische Geschwindigkeiten verwendet werden.
Dämpfung	Verwendung einer Glättung des Messsignals. Wird in der Regel bei nicht-wässrigen Titration angewendet.
Messzeit (s)	Zeitraum, über den ein Messwert aufgenommen wird.
Delta mv/minute	Stabilitätskriterium für den nächsten Dosierschritt.
Minimale Zeit (s)	Minimaler Zeitraum, der für den nächsten Dosierschritt gewartet wird.
Maximale Zeit (s)	Maximaler Zeitraum, der für den nächsten Dosierschritt gewartet wird.
Steigungstyp	Definiert den Steigungstyp (steigend/fallend) und die Schrittweiten im dynamischen Teil der Titration. Es können vordefinierte oder anwender-spezifische Geschwindigkeiten verwendet werden. Bei Verwendung von Endwerten als Endkriterium definiert der Steigungstyp in welcher Richtung der Endwert liegt (steigende oder fallende Kurve).
Maximales Dosiervolumen	Maximaler Dosierschritt, der bei der Steigung bei max. Dosiervolumen angewendet wird.
Minimales Dosiervolumen	Minimaler Dosierschritt, der bei der Steigung bei min. Dosiervolumen angewendet wird.
Steigung bei max. Dosiervolumen	Steigung der Titrationskurve, bei welcher der max. Dosierschritt dosiert wird.
Steigung bei min. Dosiervolumen	Steigung der Titrationskurve, bei welcher der min. Dosierschritt dosiert wird.
Custom axis	Es können anwenderspezifische Achsen für die Titrationsgraphik definiert werden.

## 4.2.3.1.4 pH-Stat Titration

pH-Stat Titration Titroline 7800:RS1:01:pHA 7; Bürette: Titroline 7800:RS1:01	
Name	Value
<b>Optionen</b>	
Typ	pHStat
Parameter	Titroline 7800:RS1:01:pHA
Bürette	Titroline 7800:RS1:01
Reagenz	NaOH 0,1 mol/l <span style="float: right;">...</span>
Reagenz überprüfen	<input checked="" type="checkbox"/>
Füll-Optionen	Never
Rührgeschwindigkeit	
<b>Ende-Bedingungen</b>	
Endvolumen verwenden	<input type="checkbox"/>
pH-Stat Wert	7
Lineare Schrittweite	0,02
Delta Wert	1
Endzeit	600
Messintervall (s)	10
<b>Drift-Einstellungen</b>	
Messgeschwindigkeit	Custom
Dämpfung	None
Messzeit (s)	2
Delta mV/Minute	20
Minimale Zeit (s)	2
Maximale Zeit (s)	15
<b>Steigungs-Einstellungen</b>	
Steigungstyp	Custom up
Maximales Dosiervolumen	1
Minimales Dosiervolumen	0,02
Steigung bei max. Dosiervolumen	15
Steigung bei min. Dosiervolumen	230
<b>Anzeige-Einstellungen</b>	
Custom axis	<input type="checkbox"/>

Typ	Legt den Titrationstyp fest, hier pH-Stat.
Parameter	Legt das Gerät fest, mit dem gemessen wird und den zu messenden Parameter (z.B. pH-Wert).
Bürette	Legt das Gerät fest, mit dem das Titrationsreagenz dosiert werden soll.
Reagenz	Name des zu dosierenden Reagenzes. Dieses muss mit dem auf dem Wechselaufsatz gespeicherten Reagenznamen übereinstimmen. Nur so wird die gespeicherte Konzentration des Reagenzes automatisch übernommen bzw. im Falle einer Standardisierung/Titerbestimmung auf dem Aufsatz gespeichert.
Reagenz überprüfen	Überprüfung, ob das definierte Reagenz mit dem Reagenz des Aufsatzes übereinstimmt.
Füll-Optionen	Legt den Zeitpunkt des automatischen Füllens fest.
Rührgeschwindigkeit	Legt die Rührgeschwindigkeit während der Titration fest.
Endvolumen verwenden	Endvolumen, an dem die Titration automatisch stoppt wenn aktiviert. Empfohlen als Sicherheitskriterium.

pH-Stat Wert	pH-Wert, der während der Statisierungsphase gehalten werden soll.
Lineare Schrittweite	Schrittweite für den linearen Titrationsteil, welcher zum Einstellen des pH-Werts angewendet wird.
Delta Wert	Delta-Kriterium, ab dem die Antitrierphase in die lineare Titration übergeht.
Endzeit (s)	Zeitraum, über den die pH-Stat Titration durchgeführt werden soll.
Messintervall (s)	Abstand zwischen den Datenpunkten der pH-Stat Kurve.
Messgeschwindigkeit	Legt den Zeitpunkt fest, nach dem ein Messwert aufgenommen und der nächste Dosierschritt durchgeführt wird. Es können vordefinierte oder anwenderspezifische Geschwindigkeiten verwendet werden.
Dämpfung	Verwendung einer Glättung des Messsignals. Wird in der Regel bei nicht-wässrigen Titration angewendet.
Messzeit (s)	Zeitraum, über den ein Messwert aufgenommen wird.
Delta mv/Minute	Stabilitätskriterium für den nächsten Dosierschritt.
Minimale Zeit (s)	Minimaler Zeitraum, der für den nächsten Dosierschritt gewartet wird.
Maximale Zeit (s)	Maximaler Zeitraum, der für den nächsten Dosierschritt gewartet wird.
Steigungstyp	Definiert den Steigungstyp (steigend/fallend) und die Schrittweiten im dynamischen Teil der Titration. Es können vordefinierte oder anwenderspezifische Geschwindigkeiten verwendet werden.
Maximales Dosiervolumen	Maximaler Dosierschritt, der bei der Steigung bei max. Dosiervolumen angewendet wird.
Minimales Dosiervolumen	Minimaler Dosierschritt, der bei der Steigung bei min. Dosiervolumen angewendet wird.
Steigung bei max. Dosiervolumen	Steigung der Titrationskurve, bei der der max. Dosierschritt dosiert wird.
Steigung bei min. Dosiervolumen	Steigung der Titrationskurve, bei der der min. Dosierschritt dosiert wird.
Custom axis	Es können anwenderspezifische Achsen für die Titrationsgraphik definiert werden.

#### 4.2.3.1.5 Photometrische Titrationen

Um eine Photometrische Titration durchzuführen, wird der photometrische Sensor OptiLine 6 benötigt. In der **Titrationsschleife** wird der Messkanal mVE ausgewählt. Photometrische Titrationen werden in der Regel linear durchgeführt, können aber je nach Titrationsverlauf auch dynamisch durchgeführt werden.

##### ⊖ OptiLine-Einstellungen

Wellenlänge	470nm
Intensität	40
Glättung	None

Wellenlänge	Auswahl der Wellenlängen, bei der die Titration durchgeführt werden soll. Diese hängt ab von dem verwendeten Indikator und dem dadurch bedingten größten Potentialunterschied vor und nach dem Farbwechsel.
Intensität	Prozentuale Intensität der verwendeten LED. Der mV-Wert zu Beginn der Titration sollte bei ca. 1000 liegen.
Glättung	Verwendung einer Glättung des Messsignals bei unruhigen Kurven.

#### 4.2.3.2 Berechnungen

Mit einer Berechnung werden Ergebnisse erzeugt, die in der Datenbank gespeichert werden. Bei Titrationen ist es empfehlenswert, zunächst Äquivalenz- bzw. Endpunkte zu berechnen und mit diesen berechneten Ergebnissen alle weiteren Berechnungen durchzuführen.

Formel:	
Name	Value
⊖ Berechnung	
Typ	Result
Ergebnis	...
Dezimalstellen	5
Glättung	None
Maximum EQ's	-
Formel	...
Marker	None
⊖ x-Fenster	
x-Fenster verwenden	<input type="checkbox"/>
⊖ y-Fenster	
y-Fenster verwenden	<input type="checkbox"/>

Typ	Legt den Ergebnis- bzw. Variablentyp fest. Siehe auch Kapitel <b>4.2.3.2.1 Ergebnistyp</b> .
Ergebnis	Name des Ergebnisses. Über <input type="text"/> können neue Namen eingegeben werden.
Dezimalstellen	Anzahl der Dezimalstellen mit denen das Ergebnis angegeben werden soll.
Glättung	Definiert die Anzahl an Datenpunkten, über die eine EQ Berechnung durchgeführt wird.
Maximum EQ's	Maximale Anzahl an zu erwartenden EQ's.
Formel	<input type="text"/> öffnet den Formeleditor zur Berechnung des Ergebnisses. Siehe auch Kapitel <b>4.2.3.2.2. Der Formeleditor</b> .

Marker	Setzt bei dem berechneten Ergebnis einen Marker in der Titrationsgraphik (z.B. für EQ's).
x-Fenster verwenden	Definieren eines Auswertefenster basierend auf der x-Achse.
y-Fenster verwenden	Definieren eines Auswertefenster basierend auf der y-Achse.

#### 4.2.3.2.1 Ergebnistyp

Chemical  
Global  
Result  
Sample

Chemical	Bei Auswahl dieses Variablentyps wird das Ergebnis automatisch auf dem für die Titration verwendeten Aufsatz übertragen und als Titer gespeichert. <b>Achtung: Der Variablenname muss hierfür mit dem auf dem Aufsatz gespeicherten Namen übereinstimmen!</b>
Global	Eine globale Variable, die Methodenübergreifend verwendet werden kann. Beispiel: Ergebnis einer Blindwert-Titration.
Result	Eine lokale Ergebnisvariable.
Sample	Eine Probenvariable, die für variable numerische Probeneigenschaften wie z.B. eine Dichte verwendet wird.

#### Beispiel 1: Result - Variable

Die Result – Variable ist die am häufigsten verwendete Ergebnisvariable. EQ's, Mess- oder Endwerte werden meist als Result - Variable gespeichert.

Eine Ergebnis - Variable kann im Managementcenter erstellt werden, aber auch direkt im Methodencenter. Über  öffnet sich ein Eingabefenster zur Eingabe des Variablennamens, hier EQ1.

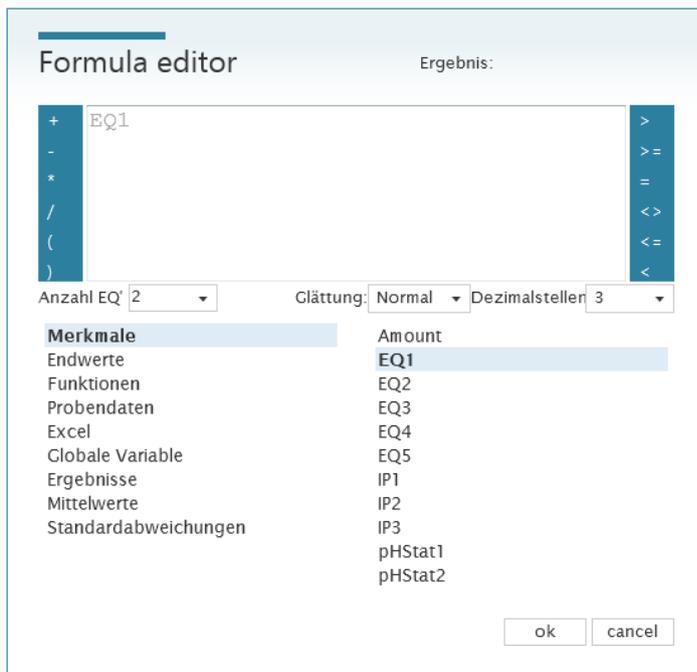
**Formel:**

Name	Value
<b>Berechnung</b>	
Typ	Result
Ergebnis	
Dezimalstellen	3
Glättung	
Maximum EQ's	2
Formel	
Marker	None
<b>x-Fenster</b>	
x-Fenster verwenden	<input type="checkbox"/>
<b>y-Fenster</b>	
y-Fenster verwenden	<input type="checkbox"/>

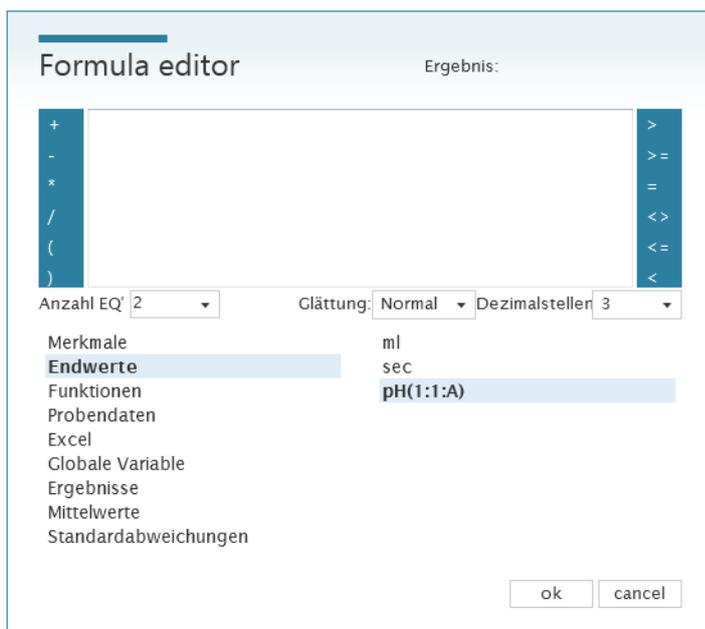
Enter Result name

ok cancel

Die Berechnung erfolgt mit dem Formeleditor. In diesem Beispiel wird der erste von zwei erwarteten Äquivalenzpunkten berechnet.



Zur Dokumentation eines Messwertes oder eines dosierten Volumens wird das Menü **Endwerte** im Formeleditor verwendet.

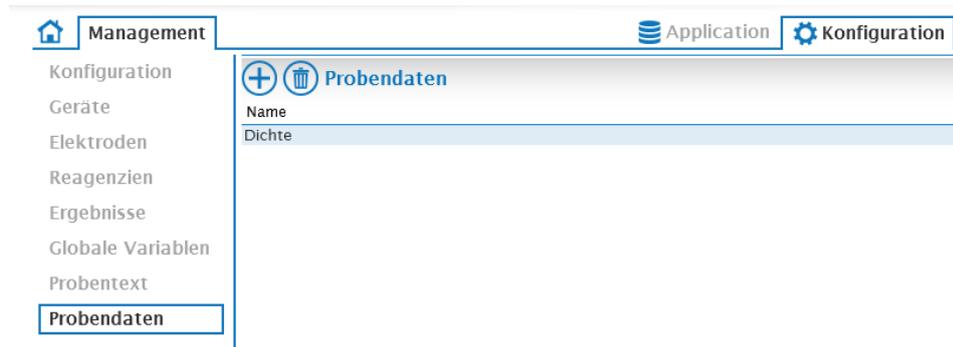


Mit dieser Funktion wird der zuletzt gemessene Wert berechnet, z.B. ein pH-Wert aber auch ein dosiertes Volumen über Verwendung von **ml**.

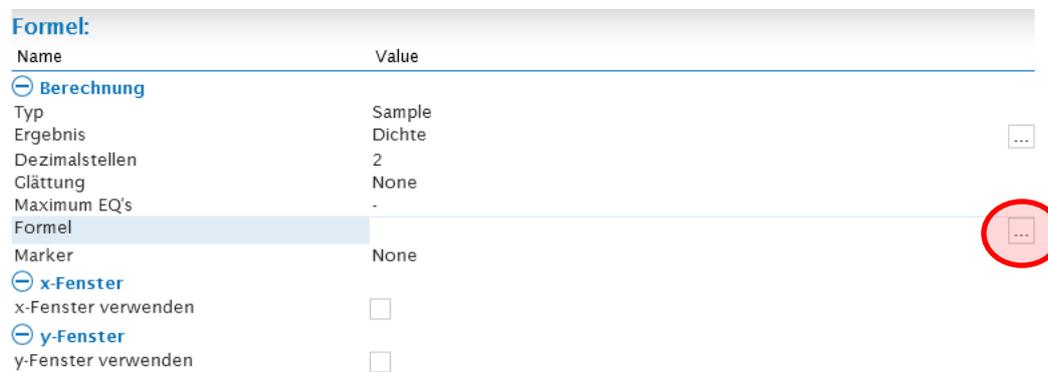
Ergebnisse vom Typ Result stehen nur innerhalb einer Methode für die jeweilige Probe zur Verfügung. Im Formeleditor stehen sie unter **Ergebnisse** für weitere Berechnungen zur Verfügung.

## Beispiel 2: Sample-Variable

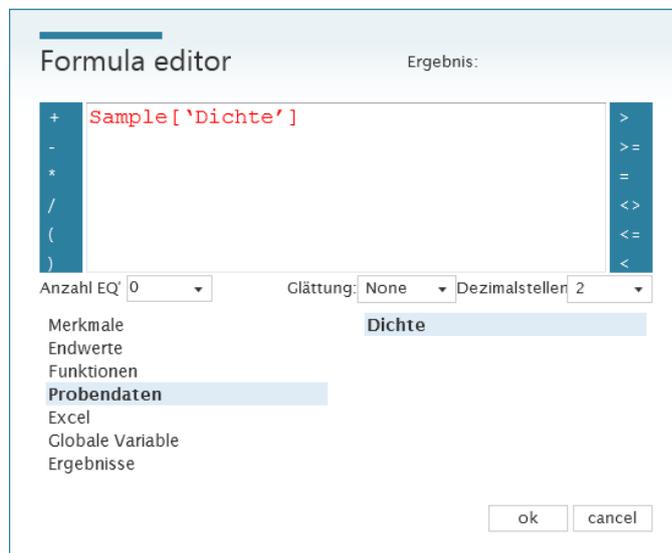
In dem Einstellungscenter wird über das +-Symbol eine neue Variable hinzugefügt.



In einer Berechnung wird der Variablentyp **Sample** ausgewählt und die entsprechende Variable ausgewählt.



Über [...] öffnet sich der Formeleditor. Unter **Probendaten** ist die entsprechende Variable zu finden und wird über einen Doppelklick ausgewählt und mit ok bestätigt.



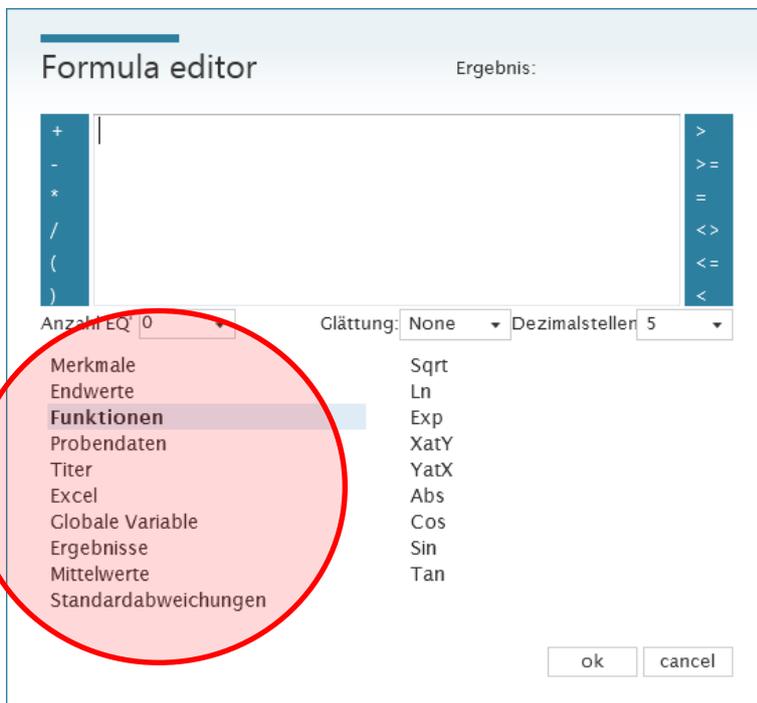
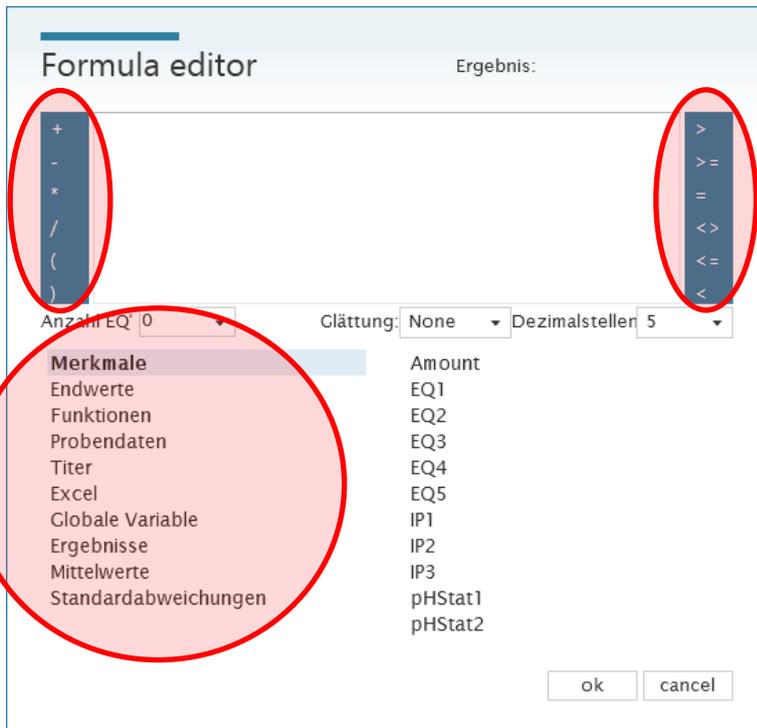
Bei Auswahl der Methode in der Arbeitsliste erscheint die Probenvariable als numerisches Eingabefeld. Alternativ kann eine in dem Einstellungscenter angelegte Variable direkt in einer Berechnung z.B. einer Result – Variable, verwendet werden. Das Eingabefeld erscheint auch in diesem Fall automatisch in der Arbeitsliste.

Worklist: Beispielarbeitsliste

no	Status	Methode	Bezeichnung	Amount	Datum	Benutzer	Kommentar	Kurve	Dichte
1	Pending	Beispiel Sample-Variable							

#### 4.2.3.2.2 Der Formeleditor

Generelle Rechensymbole befinden sich am rechten und linken Rand des Editors. Variablen und weiterführende Rechenfunktionen befinden sich in den darunter-liegenden Untermenüs.



Merkmale	Amount	Einwaage der Probe.
	EQ1 – EQ5	Berechnet bis zu 5 EQ's in der Titrationskurve.
	IP1 – IP3	Berechnet bis zu drei Schnittpunkte.
	pHStat1 – pHStat2	In Vorbereitung.
Endwerte	z.B. ml, pH, s	Entspricht dem zuletzt gemessenen Wert am Ende einer Titration oder einer Messung.
Funktionen	Sqrt	Berechnung der Quadratwurzel einer Zahl.
	Ln	Berechnung des natürlichen Logarithmus.
	Exp	Berechnung einer Exponentialfunktion.
	XatY;YatX	Berechnet einen x-Wert bei gegebenem y-Wert bzw. einen y-Wert bei gegebenem x-Wert.
	Abs	Berechnet den Absolutwert (Betrag) einer Zahl.
	Cos;Sin;Tan	Berechnung von Winkelfunktionen.
Probendaten	z.B. Dichte	Stellt variable Probendaten zur weiteren Berechnung zur Verfügung.
Titer		Auswahl der Konzentration von zur Titration verwendeten Reagenzien.
Excel		Zur externen Berechnung mittels makrobasierten Excel-Sheets.
Globale Variablen		Verwendung von Ergebnissen, die als globale Variable hinterlegt sind.
Ergebnisse	z.B. ml at EQ1	Verwendung bereits berechneter Zwischenergebnisse zur weiteren Berechnung.
Mittelwerte		Berechnet Mittelwerte aus mehreren Ergebnissen der ausgewählten Variable. <b>Achtung: Es werden nur Mittelwerte aus Ergebnissen berechnet, deren Probenbezeichnung identisch ist!</b>
Standardabweichungen		Berechnet Standardabweichungen aus mehreren Ergebnissen der ausgewählten Variable. <b>Achtung: Es werden nur Standardabweichungen aus Ergebnissen berechnet, deren Probenbezeichnung identisch ist!</b>

### 4.2.3.3 Messbaustein

Ein Messbaustein führt nur die eigentliche Messung durch. Der Messwert muss durch einen Berechnungsbaustein dokumentiert werden.

Messung: Titroline 7000:RS1:01:pHA	
Name	Value
<b>Optionen</b>	
Parameter	Titroline 7000:RS1:01:pHA
Rührgeschwindigkeit	
Wartezeit (s)	0
Meldung	
<b>Drift-Einstellungen</b>	
Messgeschwindigkeit	Custom
Messzeit (s)	2
Delta mV/minute	20
Minimale Zeit (s)	2
Maximale Zeit (s)	15
Dämpfung	None

Parameter	Legt das Gerät fest, mit dem gemessen wird und den zu messenden Parameter (z.B. pH-Wert).
Rührgeschwindigkeit	Legt die Rührgeschwindigkeit während der Messung fest
Wartezeit	Legt eine Wartezeit fest, die nach der Messung startet.
Meldung	Eine frei definierbare Meldung, die während der Wartezeit in der Statuszeile angezeigt wird.
Messgeschwindigkeit	Legt den Zeitpunkt fest, nach dem ein Messwert aufgenommen wird. Es können vordefinierte oder anwenderspezifische Geschwindigkeiten verwendet werden.
Messzeit (s)	Zeitraum, über den ein Messwert aufgenommen wird.
Delta mv/minute	Stabilitätskriterium für die Messung.
Minimale Zeit (s)	Minimaler Zeitraum, der für die Messung gewartet wird.
Maximale Zeit (s)	Maximaler Zeitraum, der für die Messung gewartet wird.
Dämpfung	Verwendung einer Messsignalglättung. Wird in der Regel bei Messungen in nicht-wässrigen Medien angewendet.

#### 4.2.3.4 Dosierbaustein

Dosierte Volumen: HCl 0.1 mol/l von T500:RS2:01	
Name	Value
⊖ Dosieren	
Bürette	T500:RS2:01
Reagenz	HCl 0.1 mol/l <span style="float: right;">...</span>
Reagenz überprüfen	<input checked="" type="checkbox"/>
Volumen	<span style="float: right;">...</span>
Wartezeit (s)	0
Messung durchführen	<input type="checkbox"/>
Füll-Optionen	Never

Bürette	Legt das Gerät fest, mit dem das Reagenz dosiert werden soll.
Reagenz	Name des zu dosierenden Reagenzes. Dieser muss mit dem auf dem Wechselaufsatz gespeicherten Reagenznamen übereinstimmen. Nur so wird die gespeicherte Konzentration des Reagenzes automatisch übernommen.
Reagenz überprüfen	Überprüfung, ob das definierte Reagenz mit dem Reagenz des Aufsatzes übereinstimmt.
Volumen	Gibt das zu dosierende Volumen an. Über <span style="border: 1px solid gray; padding: 2px;">...</span> wird der Formeleditor geöffnet.
Wartezeit	Legt eine Wartezeit fest, die nach der Dosierung startet.
Messung durchführen	Bei Aktivierung wird nach der Dosierung automatisch ein Messwert aufgenommen.
Füll-Optionen	Legt den Zeitpunkt des automatischen Füllens fest.

#### 4.2.3.5 Wartezeit, Rührgeschwindigkeit und Kurve zurücksetzen

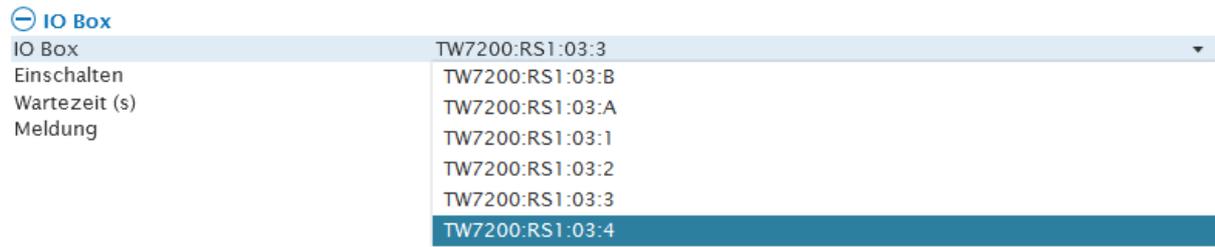
Wartezeit	Einfügen einer Wartezeit. Während der Wartezeit kann eine Meldung angezeigt werden.
Rührgeschwindigkeit	Einfügen einer Rührgeschwindigkeit. Eine Wartezeit und Meldung, die während der Wartezeit angezeigt wird, kann ebenfalls festgelegt werden.
Kurve zurücksetzen	Setzt eine Titrationsgraphik wieder auf 0 zurück, z.B. nach Durchführung einer Vordosierung (Dosierbaustein), dessen Volumen nicht in der Titration berücksichtigt werden soll.

#### 4.2.3.6 IO-Box und Pumpenansteuerung

⊖ IO Box	
IO Box <span style="float: right;">▼</span>	
Einschalten	TW280:RS1:03
Wartezeit (s)	TW280:RS1:03:1
Meldung	TW280:RS1:03:2 TW280:RS1:03:3 TW280:RS1:03:4

Ist eine Pumpe MP25 direkt an dem Probenwechsler angeschlossen, kann sie hier über einen definierten Zeitraum angeschaltet werden. Dies geschieht über Auswahl des Ports ohne Adresse, hier **TW280:RS1:03**.

Für den TW 7200 stehen zwei Pumpenanschlüsse zur Verfügung.



Der mit A gekennzeichnete Port steuert die am Anschluss **Pump 1** angeschlossene Pumpe an, über den mit B gekennzeichneten Port wird **Pump 2** angesteuert.

Eine optionale IO-Box zur Verwendung von zusätzlichem Zubehör kann ebenfalls an einen Probenwechsler angeschlossen werden. Die Ansteuerung des Ports der IO-Box erfolgt über Auswahl des entsprechenden Ports 1 - 4 der IO-Box, an dem das Zubehör angeschlossen wurde.

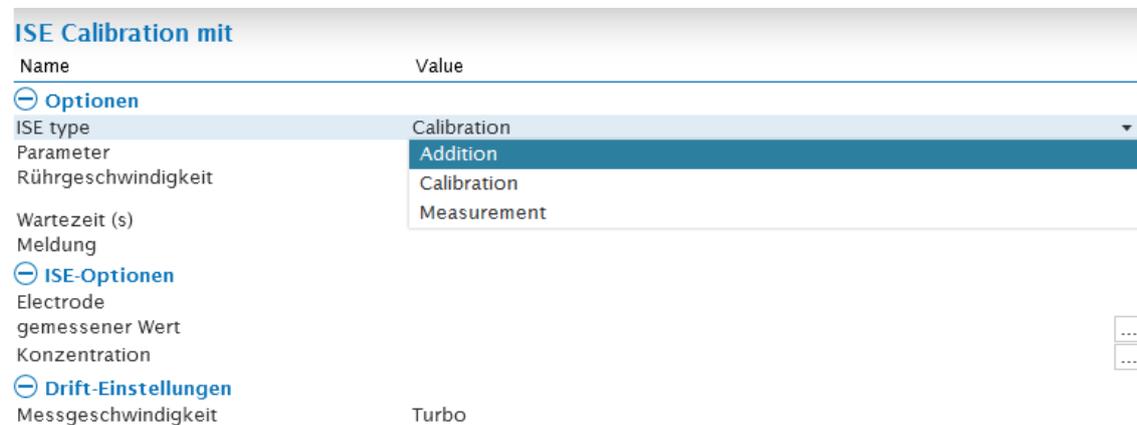
#### 4.2.3.7 Direktkommando



Gerät	Gerät, an das ein RS-Befehl gesendet werden soll.
Befehl	RS-Befehl, der als Direktkommando an das Gerät gesendet wird.
Abschaltzeit	Time Out (max. Wartezeit), die TitriSoft auf eine Antwort des Titrators wartet.

Eine Auflistung der wichtigsten RS-Befehle finden Sie in den entsprechenden Geräteanleitungen.

#### 4.2.3.8 ISE



#### 4.2.3.8.1 ISE – Kalibration

ISE Calibration mit Titroline 7000:RS1:01:mVA

Name	Value
<b>Optionen</b>	
ISE type	Calibration
Parameter	Titroline 7000:RS1:01:mVA
Rührgeschwindigkeit	<input type="text"/>
Wartezeit (s)	0
Meldung	<input type="text"/>
<b>ISE-Optionen</b>	
Electrode	<input type="text"/>
gemessener Wert	<input type="text"/>
Konzentration	<input type="text"/>
<b>Drift-Einstellungen</b>	
Messgeschwindigkeit	Custom
Messzeit (s)	2
Delta mV/minute	20
Minimale Zeit (s)	2
Maximale Zeit (s)	15
Dämpfung	None

ISE Typ	Typ der ISE-Messung, hier Calibration.
Parameter	Legt das Gerät, mit dem gemessen wird und den zu messenden Parameter fest (z.B. mV).
Rührgeschwindigkeit	Legt die Rührgeschwindigkeit während der Messung fest.
Wartezeit (s)	Legt eine Wartezeit fest, die nach der Messung startet.
Meldung	Eine frei definierbare Meldung, die während der Wartezeit in der Statuszeile angezeigt wird.
Elektrode	Auswahl der Elektrode, für die die Kalibrationsdaten aufgenommen werden. Diese muss im Vorfeld angelegt werden (siehe auch Kapitel 3. <b>Einstellungscenter</b> ).
gemessener Wert	Result-Variable, auf die der Messwert gespeichert wird.
Konzentration	Sample-Variable, auf welche die zu dem Messwert gehörige Konzentration hinterlegt wird. Die Konzentration wird in dem Eingabefeld der Arbeitsliste eingegeben.
Messgeschwindigkeit	Legt den Zeitpunkt fest, nach dem ein Messwert aufgenommen wird. Es können vordefinierte oder anwenderspezifische Geschwindigkeiten verwendet werden.
Messzeit (s)	Zeitraum, über den ein Messwert aufgenommen wird.
Delta mv/Minute	Stabilitätskriterium für die Messung.
Minimale Zeit (s)	Minimaler Zeitraum, der für die Messung gewartet wird.
Maximale Zeit (s)	Maximaler Zeitraum, der für die Messung gewartet wird.
Dämpfung	Verwendung einer Messsignalglättung.

### 4.2.3.8.2 ISE-Messung

ISE Measurement mit Titroline 7000:RS1:01:mVA	
Name	Value
<b>Optionen</b>	
ISE type	Measurement
Parameter	Titroline 7000:RS1:01:mVA
Rührgeschwindigkeit	
Wartezeit (s)	0
Meldung	
<b>ISE-Optionen</b>	
Electrode	
gemessener Wert	...
Ergebnis	...
Dezimalstellen	-
<b>Drift-Einstellungen</b>	
Messgeschwindigkeit	Custom
Messzeit (s)	2
Delta mV/minute	20
Minimale Zeit (s)	2
Maximale Zeit (s)	15
Dämpfung	None

ISE Typ	Typ der ISE-Messung, hier Measurement.
Parameter	Legt das Gerät, mit dem gemessen wird und den zu messenden Parameter (z.B. mV) fest.
Rührgeschwindigkeit	Legt die Rührgeschwindigkeit während der Messung fest.
Wartezeit (s)	Legt eine Wartezeit fest, die nach der Messung startet.
Meldung	Eine frei definierbare Meldung, die während der Wartezeit in der Statuszeile angezeigt wird.
Elektrode	Auswahl der Elektrode, die für die Messung verwendet werden soll. Diese muss im Vorfeld angelegt und kalibriert werden (siehe auch Kapitel <b>3. Einstellungscenter</b> ).
gemessener Wert	Result-Variable, auf die der Messwert gespeichert wird.
Ergebnis	Result-Variable, auf die die Konzentration gespeichert wird, berechnet aus dem Messwert und der Kalibrationsgeraden.
Dezimalstellen	Anzahl an Dezimalstellen, mit denen das Ergebnis angegeben werden soll.
Messgeschwindigkeit	Legt den Zeitpunkt fest, an dem die Messung abgeschlossen wird. Es können vordefinierte oder anwenderspezifische Geschwindigkeiten verwendet werden.
Messzeit (s)	Zeitraum, über den ein Messwert aufgenommen wird.
Delta mv/Minute	Stabilitätskriterium für die Messung.
Minimale Zeit (s)	Minimaler Zeitraum, der für die Messung gewartet wird.
Maximale Zeit (s)	Maximaler Zeitraum, der für die Messung gewartet wird.
Dämpfung	Verwendung einer Messsignalglättung.

#### 4.2.3.8.3 ISE-Addition

##### ISE Addition mit Titroline 7000:RS1:01:mVA

Name	Value
<b>Optionen</b>	
ISE type	Addition
Parameter	Titroline 7000:RS1:01:mVA
Rührgeschwindigkeit	
Wartezeit (s)	0
Meldung	
<b>ISE-Optionen</b>	
Electrode	
Konzentration	...
Startvolumen	...
Ergebnis	...
Dezimalstellen	-
Bürette	
Anzahl an Zugaben	0
Volumen	...
<b>Drift-Einstellungen</b>	
Messgeschwindigkeit	Custom
Messzeit (s)	2
Delta mV/minute	20
Minimale Zeit (s)	2
Maximale Zeit (s)	15
Dämpfung	None

ISE Typ	Typ der ISE-Messung, hier Addition.
Parameter	Legt das Gerät, mit dem gemessen wird und den zu messenden Parameter fest (z.B. mV).
Rührgeschwindigkeit	Legt die Rührgeschwindigkeit während der Messung fest.
Wartezeit (s)	Legt eine Wartezeit fest, die nach der Messung startet.
Meldung	Eine frei definierbare Meldung, die während der Wartezeit in der Statuszeile angezeigt wird.
Elektrode	Auswahl der Elektrode, die für die Messung verwendet werden soll. Diese muss im Vorfeld angelegt werden (siehe auch Kapitel <b>3. Einstellungscenter</b> ).
Konzentration	Sample-Variable, über die die Konzentration des zu addierenden Standards angegeben wird.
Startvolumen	Sample-Variable, über die das Startvolumen (Probenvolumen incl. TISAB) angegeben wird.
Ergebnis	Result-Variable, auf die die Konzentration gespeichert wird, berechnet aus dem Messwert und der Kalibrationsgeraden.
Dezimalstellen	Anzahl an Dezimalstellen mit denen das Ergebnis berechnet werden soll.
Bürette	Bürette, die den Additionsstandard dosiert.
Anzahl an Zugaben	Angabe der Anzahl an durchzuführenden Standard-additionen.

Volumen	Angabe des zu dosierenden Volumens pro Additionsschritt.
Messgeschwindigkeit	Legt den Zeitpunkt fest, an dem die Messung abgeschlossen wird. Es können vordefinierte oder anwenderspezifische Geschwindigkeiten verwendet werden.
Messzeit (s)	Zeitraum, über den ein Messwert aufgenommen wird.
Delta mv/Minute	Stabilitätskriterium für die Messung.
Minimale Zeit (s)	Minimaler Zeitraum, der für die Messung gewartet wird.
Maximale Zeit (s)	Maximaler Zeitraum, der für die Messung gewartet wird.
Dämpfung	Definiert eine Glättung des Messsignals.

#### 4.2.3.9 Coulometrische Karl Fischer Titrationsen

Zur Automatischen Durchführung einer Coulometrischen Karl Fischer Titration steht der Titrationsbaustein **Coulometrie** zur Verfügung. Dieser dient zur Ansteuerung des TL 7500 KF Trace sowohl als Stand-Alone Variante als auch in Kombination mit einem Headspace Ofen TO7280 bzw. Headspace Ofen plus Wechsler TW7650. Die hier dargestellten Erläuterungen sollen der Übersicht dienen. Es ist eine gesonderte Anleitung des Headspace Ofens mit weiterführenden Information und technischen Details erhältlich.

##### 4.2.3.9.1 Parametereinstellungen des TitroLine 7500 KF Trace

Coulometer	
Name	Value
⊖ Coulometer	
Typ	Result
Ergebnis	µg water <span style="float: right;">...</span>
KF Trace	Titroline 7500 KF Trace:RS1:01
Ofen	<span style="border: 1px solid black; padding: 0 2px;">x</span>
⊖ Drift parameter	
Startdrift	15
Startdrift-Toleranz	0,3
Startdrift-Toleranz Intervall	20
Stoppdrift-Delta	10
Stoppdrift-Toleranz	0,02
Minimale Dauer	60
Maximale Dauer	2100
Nachlaufzeit	5
Arbeitspunkt	300
Kontrollfaktor	4

Typ	Definiert den Variablentypen, auf dem das Ergebnis der Wasserbestimmung hinterlegt wird. In der Regel Result.
Ergebnis	Bezeichnung der Variable, auf dem das Ergebnis der Wasserbestimmung in $\mu\text{g}$ hinterlegt wird, z.B. Wasser [ $\mu\text{g}$ ].
KF Trace	Auswahl des für die Titration verwendeten Titrators.
Ofen	Auswahl des für die Titration verwendeten Ofens TO7280 bzw. Ofen incl Wechsler TW7650. Wird kein Ofen verwendet bleibt dieses Feld frei
Startdrift	Driftwert, ab dem eine Titration gestartet wird.
Startdrift-Toleranz	Toleranz, welche die Startdrift einhalten muss. Stabilitätskriterium
Startdrift-Toleranz Intervall	Zeitintervall, über welches die Startdrift ermittelt wird
Stoppdrift-Delta	Deltakriterium zur Startdrift, ab dem eine Titration als abgeschlossen angenommen wird.
Stoppdrift-Toleranz	Toleranz, welche die Stoppdrift einhalten muss. Stabilitätskriterium
Minimale Dauer	Minimale Dauer der Titration
Maximale Dauer	Maximale Dauer der Titration
Nachlaufzeit	Zeitfenster, über welches die Stoppkriterien eingehalten werden müssen
Arbeitspunkt	Arbeitspunkt der Generatorelektrode in mV
Kontrollfaktor	Kontrollfaktor der Generatorelektrode. Kann Werte von 1 bis 15 einnehmen

#### 4.2.3.9.2 Parametereinstellungen des Ofens TO 7280

Coulometer	
Name	Value
⊖ Coulometer	
Typ	Result
Ergebnis	µg water <span style="float: right;">...</span>
KF Trace	Titroline 7500 KF Trace:RS1:01
Ofen	T07280:RS1:03 <span style="float: right;">x</span>
⊖ Drift parameter	
Startdrift	15
Startdrift-Toleranz	0,3
Startdrift-Toleranz Intervall	20
Stoppdrift-Delta	10
Stoppdrift-Toleranz	0,02
Minimale Dauer	60
Maximale Dauer	2100
Nachlaufzeit	5
Arbeitspunkt	300
Kontrollfaktor	4
⊖ Ofen Optionen	
Gasversorgung	Pump
Ofentemperatur	160
Automatische Lüfterkontrolle	<input type="checkbox"/>
Ofentemperatur Delta	0,5
Kopf unten lassen am Ende der Methode	<input type="checkbox"/>

Driftparameter	Siehe 4.2.3.9.1 Parametereinstellungen des TitroLine 7500 KF Trace
Gasversorgung	Die Gasversorgung kann über die eingebaute Pumpe (Luft) oder eine angeschlossene Gasversorgung (Stickstoff) erfolgen.
Ofentemperatur	Einstellung der Ofentemperatur
Automatische Lüfterkontrolle	Bei Aktivierung wird ein Lüfter verwendet, wenn der Ofen runter gekühlt werden muss
Ofentemperatur Delta	Deltakriterium, ab dem eine Temperatur als erreicht gilt
Kopf unten lassen am Ende der Methode	Bei Aktivierung wird der Kopf am Ende einer Methode unten gelassen, so dass das System weiter konditioniert. Das Probenvial kann so als neues 0-Vial verwendet werden.

#### 4.2.3.9.3 Parametereinstellungen des Ofens mit Wechsler TW7650

Coulometer	
Name	Value
⊖ Coulometer	
Typ	Result
Ergebnis	µg water <span style="float: right;">...</span>
KF Trace	Titroline 7500 KF Trace:RS1:01
Ofen	TW7650:RS1:03 <span style="float: right;">x</span>
⊖ Drift parameter	
Startdrift	15
Startdrift-Toleranz	0,3
Startdrift-Toleranz Intervall	20
Stoppdrift-Delta	10
Stoppdrift-Toleranz	0,02
Minimale Dauer	60
Maximale Dauer	2100
Nachlaufzeit	5
Arbeitspunkt	300
Kontrollfaktor	4
⊖ Ofen Optionen	
Gasversorgung	Pump
Ofentemperatur	160
Automatische Lüfterkontrolle	<input type="checkbox"/>
Ofentemperatur Delta	0,5
0-Vial Intervall	Never
0-Vial bei Methodenwechsel	<input checked="" type="checkbox"/>

Drift Parameter	Siehe 4.2.3.9.1 Parametereinstellungen des TitroLine 7500 KF Trace
Gasversorgung	Die Gasversorgung kann über die eingebaute Pumpe (Luft) oder eine angeschlossene Gasversorgung (Stickstoff) erfolgen.
Ofentemperatur	Einstellung der Ofentemperatur
Automatische Lüfterkontrolle	Bei Aktivierung wird ein Lüfter verwendet, wenn der Ofen runter gekühlt werden muss
Ofentemperatur Delta	Deltakriterium, ab dem eine Temperatur als erreicht gilt
0-Vial Intervall	Legt fest, wie oft ein 0-Vial gemessen werden soll
0-Vial bei Methodenwechsel	Legt fest, ob vor Wechsel auf diese Methode ein 0-Vial gemessen werden soll.

Wird ein Wechsler verwendet, muss dieser in den Arbeitslisteneinstellungen ausgewählt werden. Des Weiteren kann gewählt werden, ob nach einem kompletten Durchlauf mit der ersten Probe fortgefahren werden soll.

#### ⊖ Changer Properties

Wechsler

Nach kompletten Durchlauf mit der ersten Probe fortfahren

TW7650:RS1:03

#### 4.2.3.10 Temperaturrempe

Zur Bestimmung der idealen Ausheiztemperatur kann eine so genannte Temperaturrempe mit dem KF-Headspaceofen aufgenommen werden. Hierbei wird die Probe mit einer gewählten Aufheizrate erhitzt und die Entwicklung der Drift dokumentiert.

Temperaturrempe	
Name	Value
⊖ <b>Temperaturrempe</b>	
KF Trace	Titroline 7500 KF Trace:RS1:01
Ofen	TW7650:RS1:03 <span style="float: right;">x</span>
⊖ <b>Drift parameter</b>	
Startdrift	15
Startdrift-Toleranz	0,3
Startdrift-Toleranz Intervall	20
Arbeitspunkt	300
Kontrollfaktor	4
⊖ <b>Ofen Optionen</b>	
Gasversorgung	Pump
Starttemperatur	40
Endtemperatur	200
Ofentemperatur Delta	0,5
Temperaturrempe	1
Automatische Lüfterkontrolle	<input checked="" type="checkbox"/>

Drift Parameter	Siehe 4.2.3.9.1 Parametereinstellungen des TitroLine 7500 KF Trace
Gasversorgung	Die Gasversorgung kann über die eingebaute Pumpe (Luft) oder eine angeschlossene Gasversorgung (Stickstoff) erfolgen.
Starttemperatur	Einstellung der Starttemperatur der Rampe
Endtemperatur	Einstellung der Endtemperatur der Rampe
Ofentemperatur Delta	Deltakriterium, ab dem eine Temperatur als erreicht gilt
Temperaturrempe	Anstieg der Temperatur in °C / min. Einstellbar von 1 bis 9,6 °C
Automatische Lüfterkontrolle	Bei Aktivierung wird ein Lüfter verwendet, wenn der Ofen runter gekühlt werden muss

#### 4.2.4 Logische Abfragen

Die folgenden Schleifen/Abfragen werden durchgeführt, so lange das in der Bedingung formulierte Kriterium erfüllt ist. Das Kriterium wird in dem Formeleditor der jeweiligen Abfrage definiert.

Wiederholschleife
While-Schleife
If-Befehl
Sleep-Methode

Wiederholschleife	Die Anzahl an durchzuführenden Wiederholungen wird in der Schleifenbedingung festgelegt.
While-Schleife	Die Bausteine in der Schleife werden durchgeführt, so lange das Kriterium erfüllt wird.
If-Befehl	Die Bausteine in der Schleife werden durchgeführt, wenn das Kriterium erfüllt wird.
Sleep-Methode	In Vorbereitung.

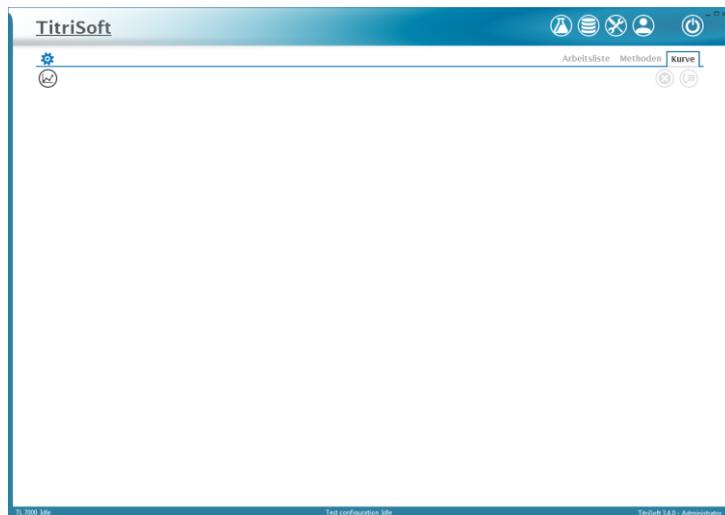
#### 4.2.5 Meldungen

Nachrichtfenster
Eingabefenster
Einwaagefenster
Probentext

Nachrichtfenster	Ein Titel und eine Nachricht kann eingegeben werden. Nach Bestätigung der Nachricht fährt die Methode mit dem nächsten Baustein fort.
Eingabefenster	Es erscheint eine Eingabeaufforderung. Die Eingabe wird auf einem frei definierbaren Variablentyp gespeichert.
Einwaagefenster	Es erscheint eine Eingabeaufforderung für eine Einwaage (Amount). Bei angeschlossener Waage kann das Fenster optional schließen, sobald Daten empfangen wurden.
Probentext	Bei Verwendung der Methode wird in der Arbeitsliste eine zusätzliche Probentext-Variable als Eingabefeld angezeigt.

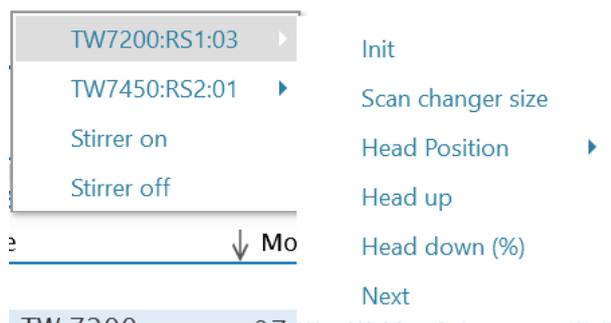
### 4.3 Kurve und Schnellzugriff Probenwechsler

Im Bereich **Kurve** wird während einer Titration die Online-Kurve der Titration groß dargestellt. Die Titrationspunkte können optional über  angezeigt werden.



Über das -Symbol können Direktbefehle an einen Probenwechsler gesendet werden. Dieses Symbol ist aus jedem Fenster im Titrationscenter erreichbar

#### 4.3.1 TW 7200



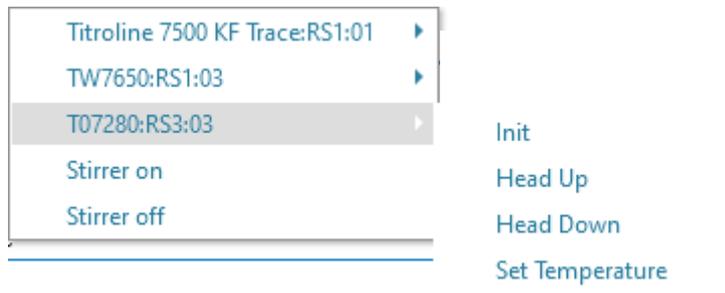
Init	Neuinitialisierung des TW 7200
Scan changer size	Ermittlung der aktuellen Tellergröße
Head Position	Umstellung der Kopfposition von <b>Normal</b> auf <b>High</b> . Die Position High wird für Anwendungen benötigt, bei denen der gesamte Weg des Turmes verwendet werden muss (z.B. CSB)
Head up	Fährt den Kopf des ausgewählten Probenwechslers in die höchste Position.
Head down (%)	Senkt den Kopf des Probenwechslers um die angegebene Prozentzahl.
Next	Fährt den Probenwechsler in die nächste Position.

#### 4.3.2 TW 7450



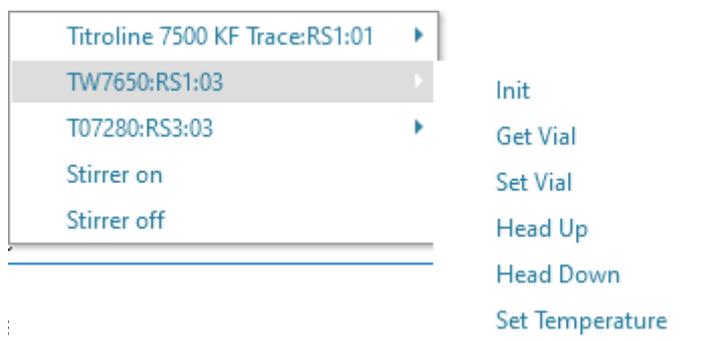
Head up	Führt den Kopf des ausgewählten Probenwechslers in die höchste Position.
Head down (%)	Senkt den Kopf des Probenwechslers um die angegebene Prozentzahl.
Home	Initialisiert den Probenwechsler und fährt in die Ausgangsposition.

#### 4.3.3 TO 7280



Init	Neuinitialisierung des TO 7280
Head up	Führt den Kopf des TO 7280 nach oben.
Head down	Führt den Kopf des TO 7280 nach unten.
Set Temperature	Übermittelt eine gewünschte Temperatur an den TO 7280, auf die der Ofen heizt.

#### 4.3.4 TW 7650



Init	Neuinitialisierung des TW 7650
Get Vial	Holt ein Vial aus dem Ofen und überbringt es in die gewünschte Tellerposition
Set Vial	Holt ein Vial aus der gewünschten Tellerposition dem Ofen und überbringt es in den Ofen
Head up	Fährt den Kopf des TO 7280 nach oben.
Head down	Fährt den Kopf des TO 7280 nach unten.
Set Temperature	Übermittelt eine gewünschte Temperatur an den TO 7280, auf die der Ofen heizt.

#### 4.3.5 Rührerbefehle

Stirrer on	Schaltet die Rührer aller angeschlossener Geräte ein.
Stirrer off	Schaltet die Rührer aller angeschlossener Geräte aus.

#### 4.4 Beispielablauf einer Methode

Im Folgenden soll der Ablauf einer Methode anhand eines Beispiels näher erläutert werden. Im Lieferumfang von TitrSoft ist eine Examples-Datenbank enthalten, welche weitere Methodenbeispiele enthält.

##### Ablauf der Beispielmethode:

**Methode Beispielablauf einer Methode**

▼ Beispielablauf einer Methode

Messung: Titroline 7800:RS1:01:pHB  
 Formel: End[pH(1:1:B)]  
 Dosiere Volumen: 30 Wasser von Titroline 7000:RS1:02  
 Clear curve data  
 Dynamische Titration Titroline 7800:RS1:01:mVA ; Bürette: Titroline 7800:RS1:01  
 Formel: EQ1  
 Formel: Result[EQ 1]\*Titer[AgNO3 0.1 mol/l]\*0,1\*35,453/Amount

##### 4.4.1 Messung

Zu Beginn der Methode wird der Start pH-Wert der Probe ermittelt. Dieser Baustein führt nur die Messung des pH-Wertes durch, die Dokumentation erfolgt in Schritt 2. Es wird ein TL 7800 verwendet, Messkanal B.

**Messung: Titroline 7800:RS1:01:pHB**

Name	Value
<b>Optionen</b>	
Parameter	Titroline 7800:RS1:01:pHB
Rührgeschwindigkeit	<input type="range"/>
Wartezeit (s)	0
Meldung	
<b>Drift-Einstellungen</b>	
Messgeschwindigkeit	Normal

#### 4.4.2 Berechnung des Start pH-Wertes

Zur Dokumentation des pH-Wertes wird ein Berechnungsbaustein eingefügt. Im Formeleditor dieses Bausteins wird unter der Rubrik Endwerte der pH-Wert ausgewählt.

Formel: End['pH(1:1:B)']	
Name	Value
<b>Berechnung</b>	
Typ	Result
Ergebnis	Start pH <span style="float:right">...</span>
Dezimalstellen	2
Glättung	None
Maximum EQ's	-
Formel	End[ 'pH (1:1:B) ' ] <span style="float:right">...</span>
Marker	None
<b>x-Fenster</b>	
x-Fenster verwenden	<input type="checkbox"/>
<b>y-Fenster</b>	
y-Fenster verwenden	<input type="checkbox"/>

**Formula editor** Ergebnis:

+ End[ 'pH (1:1:B) ' ]

Anzahl EQ: 0
Glättung: None
Dezimalstellen: 2

Merkmale  
**Endwerte**  
 Funktionen  
 Probendaten  
 Excel  
 Globale Variable  
 Ergebnisse  
 Mittelwerte  
 Standardabweichungen

ml  
 sec  
**pH(1:1:B)**

Die Zahlen in Klammern stehen für: RS1, Geräteadresse 1, Messkanal B.

#### 4.4.3 Verdünnung der Probe

Über einen Dosierbaustein wird die Probe mit 30 ml Wasser verdünnt. Es wird ein TL 7000 mit der Adresse 2 als Dosierbürette verwendet.

Dosiere Volumen: 30 Wasser von Titroline 7000:RS1:02	
Name	Value
<b>Dosieren</b>	
Bürette	Titroline 7000:RS1:02
Reagenz	Wasser <span style="float:right">...</span>
Volumen	30 <span style="float:right">...</span>
Wartezeit (s)	0
Messung durchführen	<input type="checkbox"/>
Füll-Optionen	Finish

#### 4.4.4 Zurücksetzen der Kurve

Über ein **Clear Curve** wird die Kurve vor der Titration zurückgesetzt. Andernfalls würden die 30 ml Vordosiervolumen Wasser mit in der Titrationskurve berücksichtigt werden.

**Achtung: Bei Durchführung einer Vortitration würde kein Clear Curve Baustein eingesetzt werden.**

#### 4.4.5 Dynamische Titration

Es wird eine Dynamische Titration mit  $\text{AgNO}_3$  auf mV durchgeführt. Verwendet wird Messkanal A, bestimmt werden soll der Chloridgehalt der Probe.

**Dynamische Titration Titroline 7800:RS1:01:mVA ; Burette: Titroline 7800:RS1:01**

Name	Value
<b>Optionen</b>	
Typ	Dynamic
Parameter	Titroline 7800:RS1:01:mVA
Bürette	Titroline 7800:RS1:01
Reagenz	AgNO <sub>3</sub> 0.1 mol/l
Füll-Optionen	Finish
Rührgeschwindigkeit	
<b>End-Bedingungen</b>	
Endwert verwenden	<input type="checkbox"/>
Endvolumen verwenden	<input checked="" type="checkbox"/>
Endvolumen	20
Anzahl EQ's	1
EQ-Empfindlichkeit	100
<b>Drift-Einstellungen</b>	
Messgeschwindigkeit	Custom
Dämpfung	None
Messzeit (s)	3
Delta mV/minute	10
Minimale Zeit (s)	3
Maximale Zeit (s)	15
<b>Steigungs-Einstellungen</b>	
Steigungstyp	Medium down
<b>Anzeige-Einstellungen</b>	
Custom axis	<input type="checkbox"/>

#### 4.4.6 Berechnung des Äquivalenzpunktes

Nach einer Titration muss der Äquivalenzpunkt berechnet werden. Dies geschieht über einen Berechnungsbaustein.

**Formel: EQ1**

Name	Value
<b>Berechnung</b>	
Typ	Result
Ergebnis	EQ 1
Dezimalstellen	3
Glättung	None
Maximum EQ's	1
Formel	EQ1
Marker	Blue box
Formula calculates	X-value
<b>x-Fenster</b>	
x-Fenster verwenden	<input type="checkbox"/>
<b>y-Fenster</b>	
y-Fenster verwenden	<input type="checkbox"/>

Im Formeleditor wird EQ1 unter **Merkmale** ausgewählt.

**Formeleditor** Ergebnis:

EQ1

Anzahl Eq: 0 Glättung: None Dezimalstellen: 3

<b>Merkmale</b>	Amount
Endwerte	EQ1
Funktionen	EQ2
Probandaten	EQ3
Titer	EQ4
Excel	EQ5
Globale Variable	IP1
Ergebnisse	IP2
Mittelwerte	IP3
Standardabweichungen	pHStat1
	pHStat2

ok cancel

#### 4.4.7 Berechnung des Ergebnisses

Die Berechnung der Chloridkonzentration erfolgt ebenfalls über einen Berechnungsbaustein.

**Formel: Result['EQ 1']\*Titer['AgNO3 0.1 mol/l']\*0,1\*35,453/Amount**

Name	Value
<b>Berechnung</b>	
Typ	Result
Ergebnis	Chloride [%] <span>...</span>
Dezimalstellen	2
Glättung	None
Maximum EQ's	-
Formel	Result['EQ 1']*Titer['AgNO3 0.1 mol/l']*0,1*35,453/Amount <span>...</span>
Marker	None
<b>x-Fenster</b>	
x-Fenster verwenden	<input type="checkbox"/>
<b>y-Fenster</b>	
y-Fenster verwenden	<input type="checkbox"/>

Im Formeleditor werden die benötigten Merkmale in den einzelnen Rubriken ausgewählt. Das berechnete Ergebnis für den EQ befindet sich unter der Rubrik **Ergebnisse**, die Konzentration der AgNO<sub>3</sub>-Lösung unter **Titer** und die Einwaage unter **Merkmale**. Der Faktor 0,1 dient zur Umrechnung Ergebnisses in %, der zweite Faktor 35,453 entspricht der molaren Masse von Chlorid.

Formula editor Ergebnis:

`Result['EQ 1']*Titer['AgNO3 0.1 mol/l']*0,1*35,453/Amount`

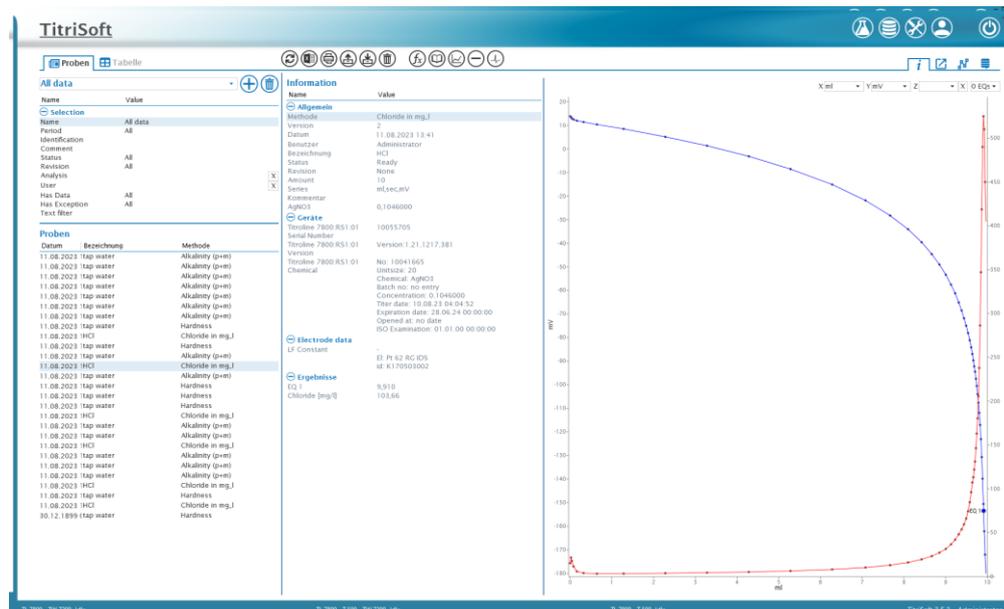
Anzahl EQ: 0    Glättung: None    Dezimalstellen: 2

Merkmale	Amount
Endwerte	EQ1
Funktionen	EQ2
Probandaten	EQ3
Titer	EQ4
Excel	EQ5
Globale Variable	IP1
Ergebnisse	IP2
Mittelwerte	IP3
Standardabweichungen	pHStat1
	pHStat2

ok    cancel

## 5 Datenbankcenter

Das Datenbankcenter wird über den  Button geöffnet.



Im Datenbankcenter können alle gemessenen Ergebnisse eingesehen werden. Ergebnisbezogene Metadaten sind hier dokumentiert. Die angezeigten Daten können nach Selektionskriterien gefiltert werden, welche im folgenden Kapitel beschrieben sind.

### 5.1 Selektionsbereich

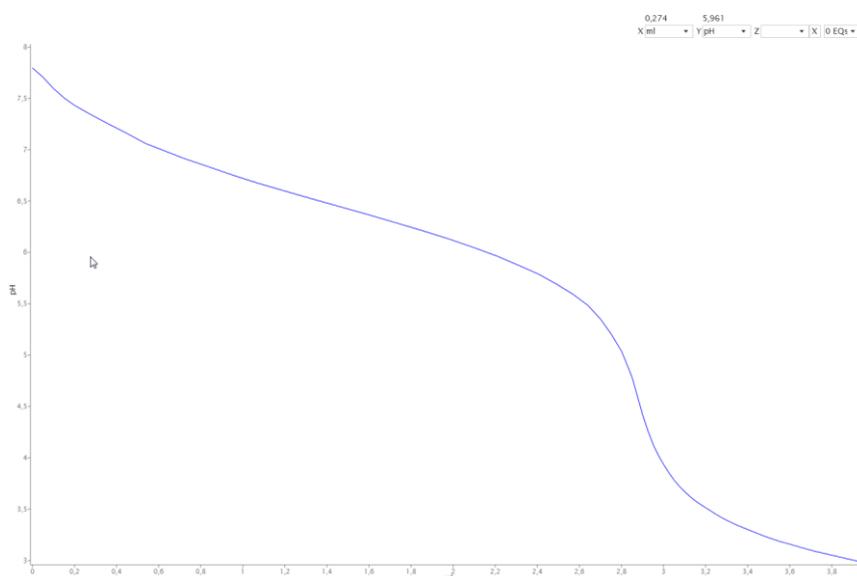
	Hinzufügen bzw. Löschen von Selektionen.
Name	Name der Selektion.
Period	Zeigt Daten für den definierten Zeitraum an.
Identification	Zeigt alle Proben mit der eingegebenen Probenbezeichnung an.
Comment	Zeigt alle Proben mit dem eingegebenen Kommentar an.
Status	Filtert nach einem Probenstatus (Ready, Aborted, User intervention, Imported).
Revision	Filtert nach einem Revisionsstatus der Probe (Modified, Review, Approved).
Analysis	Zeigt die Ergebnisse an, die mit der ausgewählten Methode gemessen worden sind.
User	Filtert nach einem Anwender, der die Messung durchgeführt hat.
Has Data	Zeigt nur Ergebnisse an, welche Daten enthält, keine enthält oder alle.
Has Exception	Zeigt nur Ergebnisse an, welche Ausnahmen aufweisen, keine Ausnahmen aufweist oder zeigt alle Ergebnisse an.
Text filter	Filtert nach weiteren Textkriterien, wie z.B. Proben-Text-Variablen.



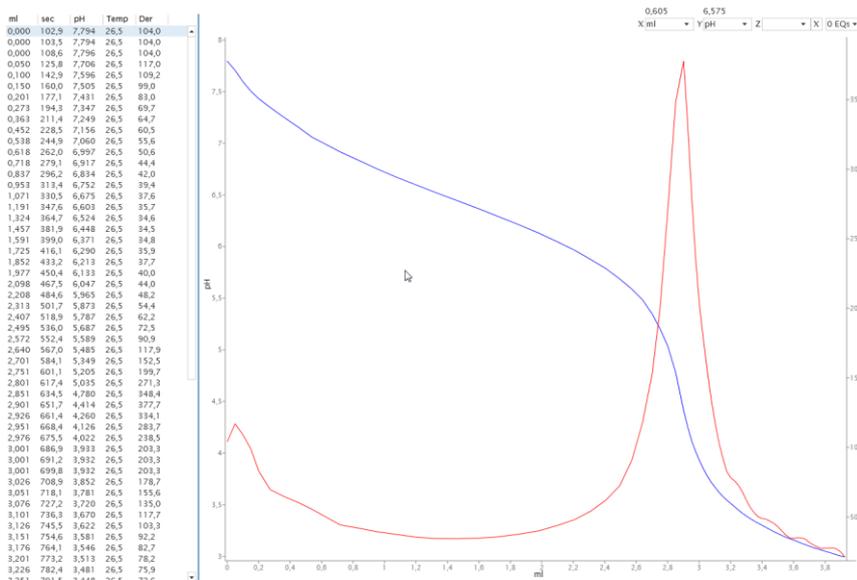
## 5.2.2 Ansichtsübersicht

	Anzeige der Probeninformationen incl. aller verknüpfter Metadaten wie Anwender, verwendete Methode und verwendete Instrumente.
	Anzeige der Titrationskurve. Siehe auch Kapitel <b>5.2.2.1 Titrationskurve und Titrationsdaten</b> .
	Anzeige der Titrationsdaten. Siehe auch Kapitel <b>5.2.2.1 Titrationskurve und Titrationsdaten</b> .
	Anzeige der verwendeten Methodendaten incl. statistischer Werte wie Versionsnummer, Ersteller und Datum der Erstellung.

### 5.2.2.1 Titrationskurve und Titrationsdaten



Die Titrationskurve ist in jeder der unter dem Kapitel **5.2.2. Ansichtsübersicht** aufgeführten Punkte sichtbar. Im rechten oberen Bereich kann die Darstellung der Kurve anwenderspezifisch angepasst werden. Die Einheit der x- und y-Achse sowie einer optionalen Sekundärachse z kann gewählt werden. Des Weiteren können bis zu 5 EQ's angezeigt werden. Die Darstellung der in der Methode berechneten EQ's ist hiervon nicht betroffen. Über die   Button kann die erste bzw. zweite Ableitung hinzugeschaltet werden. Die Absolutwerte der Ableitungen werden unter den Titrationsdaten angezeigt.



### 5.3 Tabellenansicht



Über Checkboxen können Probeninformation in der Tabellenansicht hinzugeschaltet bzw. ausgeblendet werden.

#### Spalten

Name	Verwendet
Alkalinity [µmol/kg]	<input checked="" type="checkbox"/>
Amount	<input checked="" type="checkbox"/>
consumption pH 3 [ml]	<input checked="" type="checkbox"/>
consumption pH 4 [ml]	<input checked="" type="checkbox"/>
HCl	<input type="checkbox"/>
NaOH	<input type="checkbox"/>
pH Calibration	<input type="checkbox"/>
pH Offset	<input type="checkbox"/>
pH Slope	<input type="checkbox"/>
Start-pH	<input type="checkbox"/>
Temp [°C]	<input type="checkbox"/>

Die Tabellenansicht zeigt die Probenergebnisse in tabellarischer Form. Es kann nach Datum absteigend oder aufsteigend sortiert werden.

#### Proben

Date	Identification	Analysis	Name	Alkalinity [µmol/kg]	Amount	consumption pH 3 [ml]	consumption pH 4 [ml]
16.08.2019 10:08	Simulator	Alkalinity	Administrator 1	964,624099	50	1,482	1,107
16.08.2019 13:19	Tap Water	Alkalinity	Administrator 1		50	4,563	3,438
19.08.2019 16:00		Alkalinity	Administrator 1			4,716	3,566
19.08.2019 16:25	Tap water	Alkalinity	Administrator 1		100	4,457	3,357
19.08.2019 17:01	Tap water	Alkalinity	Administrator 1		80	3,953	3,003
19.08.2019 17:19	Tap water	Alkalinity V1-0-0	Administrator 1	2885,5	80	3,926	3,001
20.08.2019 08:35	Test Simulator	Alkalinity V1-0-0	Administrator 1	2025,5	53	2,461	2,211
20.08.2019 08:43		Alkalinity V1-1-0 Turbo	Administrator 1			0,936	0,511
20.08.2019 08:48	Test	Alkalinity V1-1-0 Turbo	Administrator 1		57	1,282	1,057
20.08.2019 08:55		Alkalinity V1-1-0 Turbo	Administrator 1			0,675	0,550
20.08.2019 08:57		Alkalinity V1-1-0 Turbo	Administrator 1			0,859	0,634
20.08.2019 09:19		Alkalinity V1-1-0 Turbo	Administrator 1			1,618	1,418
20.08.2019 15:00		Alkalinity V1-1-0 Turbo	Administrator 1		52	0,850	0,775
20.08.2019 15:04		Alkalinity V1-1-0 Turbo	Administrator 1	1054,09	53	0,777	0,577
20.08.2019 15:06		Alkalinity V1-1-0 Turbo	Administrator 1	2097,98	51	1,440	1,115
20.08.2019 15:09		Alkalinity V1-1-0 Turbo	Administrator 1		25	1,992	1,742
20.08.2019 15:12		Alkalinity V1-1-0 Turbo	Administrator 1		65	0,923	0,698
20.08.2019 15:19		Alkalinity V1-1-0 Turbo	Administrator 1		20	0,793	0,743
20.08.2019 15:26		Alkalinity V1-1-0 Turbo	Administrator 1	8546,96	23	2,197	1,997

### 5.3.1 Funktionsübersicht

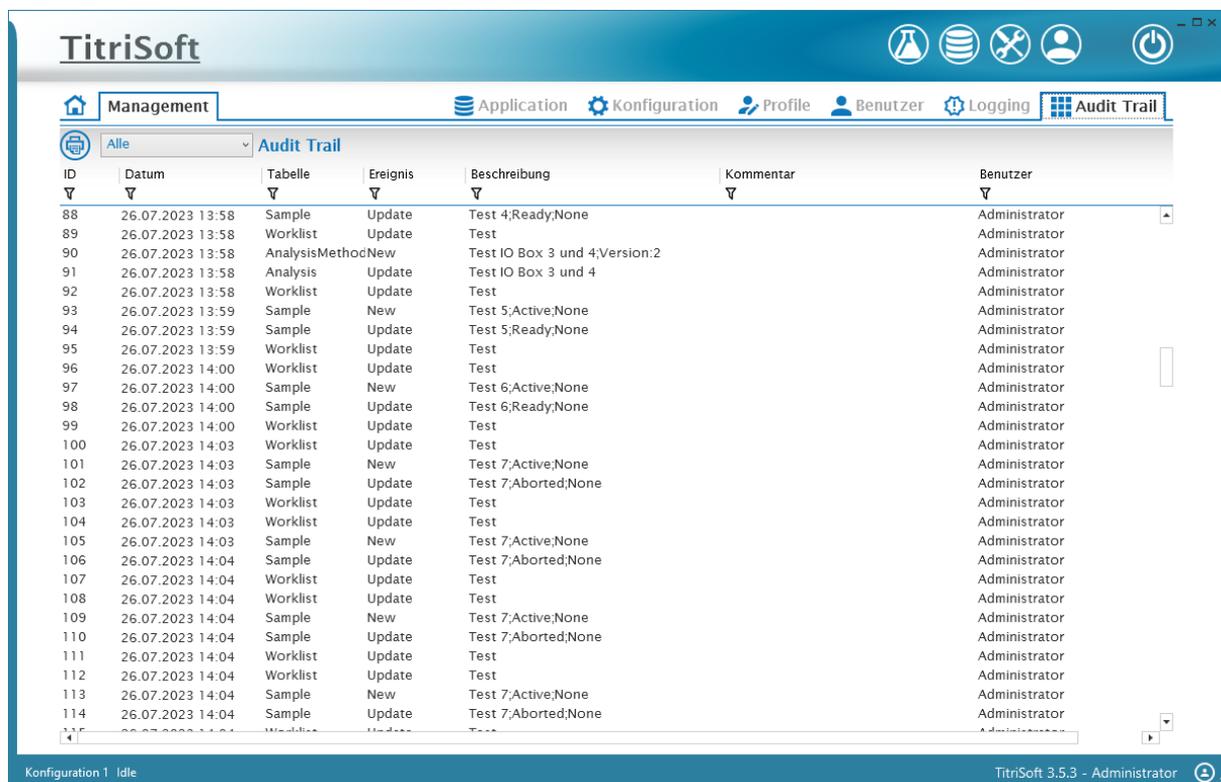
	Aktualisieren der Ansicht bei laufender Arbeitsliste.
	Export der Probenliste nach Excel.
	Export der Probenliste als .csv-Datei.
	Drucken der Probenliste. Es stehen verschiedene Darstellungsoptionen zur Verfügung (List Report und Single Curve).
	Im- und Exportieren von Probenergebnissen.
	Löschen von Probenergebnissen.

## 6 Pharma-Version

Eine separat erhältliche Pharma-Version der TitrISOft erfüllt weitere Vorgaben, die von Pharmarichtlinien wie dem CFR 21 Part 11 der FDA oder Eudralex Volume 4, Annex 11 der Europäischen Union gefordert sind. Die Standard TitrISOft-Version erfüllt bereits viele Anforderungen an den regulierten Bereich. Die folgenden Kapitel führt die Unterschiede zwischen der Pharma-Version und der Standard - Version auf.

### 6.1 Audit Trail

Der Audit Trail ist im Einstellungscenter verfügbar.



The screenshot displays the TitrISOft software interface with the 'Audit Trail' tab selected. The interface includes a navigation bar with icons for Application, Konfiguration, Profile, Benutzer, Logging, and Audit Trail. Below the navigation bar, there is a table with the following columns: ID, Datum, Tabelle, Ereignis, Beschreibung, Kommentar, and Benutzer. The table contains 21 rows of data, all of which are actions performed by the Administrator on 26.07.2023. The events include updates to Sample, Worklist, and AnalysisMethod, as well as new entries for Sample and updates to Sample and Worklist.

ID	Datum	Tabelle	Ereignis	Beschreibung	Kommentar	Benutzer
88	26.07.2023 13:58	Sample	Update	Test 4;Ready:None		Administrator
89	26.07.2023 13:58	Worklist	Update	Test		Administrator
90	26.07.2023 13:58	AnalysisMethodNew	Update	Test IO Box 3 und 4;Version:2		Administrator
91	26.07.2023 13:58	Analysis	Update	Test IO Box 3 und 4		Administrator
92	26.07.2023 13:58	Worklist	Update	Test		Administrator
93	26.07.2023 13:59	Sample	New	Test 5;Active:None		Administrator
94	26.07.2023 13:59	Sample	Update	Test 5;Ready:None		Administrator
95	26.07.2023 13:59	Worklist	Update	Test		Administrator
96	26.07.2023 14:00	Worklist	Update	Test		Administrator
97	26.07.2023 14:00	Sample	New	Test 6;Active:None		Administrator
98	26.07.2023 14:00	Sample	Update	Test 6;Ready:None		Administrator
99	26.07.2023 14:00	Worklist	Update	Test		Administrator
100	26.07.2023 14:03	Worklist	Update	Test		Administrator
101	26.07.2023 14:03	Sample	New	Test 7;Active:None		Administrator
102	26.07.2023 14:03	Sample	Update	Test 7;Aborted:None		Administrator
103	26.07.2023 14:03	Worklist	Update	Test		Administrator
104	26.07.2023 14:03	Worklist	Update	Test		Administrator
105	26.07.2023 14:03	Sample	New	Test 7;Active:None		Administrator
106	26.07.2023 14:04	Sample	Update	Test 7;Aborted:None		Administrator
107	26.07.2023 14:04	Worklist	Update	Test		Administrator
108	26.07.2023 14:04	Worklist	Update	Test		Administrator
109	26.07.2023 14:04	Sample	New	Test 7;Active:None		Administrator
110	26.07.2023 14:04	Sample	Update	Test 7;Aborted:None		Administrator
111	26.07.2023 14:04	Worklist	Update	Test		Administrator
112	26.07.2023 14:04	Worklist	Update	Test		Administrator
113	26.07.2023 14:04	Sample	New	Test 7;Active:None		Administrator
114	26.07.2023 14:04	Sample	Update	Test 7;Aborted:None		Administrator

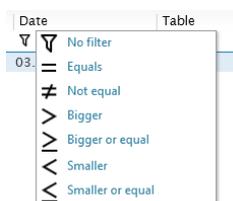
Zusätzlich zu den automatischen Einträgen öffnet sich ein Kommentarfenster für bestimmte Änderungen wie z.B. Methodenanpassungen. Der Kommentar wird zu den automatischen Einträgen dokumentiert. Zusätzlich kann jederzeit ein manueller Audit Trail-Kommentareintrag vorgenommen werden.



Die angezeigten Einträge im **Audit Trail** können über einen Zeitfilter reduziert werden.



Zusätzlich kann jede Spalte nach folgenden Kriterien gefiltert werden.



Über das Druckersymbol kann der Audit Trail jederzeit ausgedruckt werden.



## 6.2 Prüfen und Freigeben von Methoden und Testergebnissen

Methoden und Analyseergebnisse können mit folgendem Symbol geprüft werden.



Geprüft Blank TAN ASTM 664

Benutzername

Passwort

Nach einer Prüfung kann eine Methode/ein Analyseergebnis freigegeben werden.



Eine Prüfung kann nicht durch dieselbe Person erfolgen, die eine Methode erstellt bzw. ein Analyseergebnis aufgenommen hat. Die dritte Ebene der endgültigen Freigabe muss durch eine dritte Person erfolgen. Jede Prüfung muss durch Eingabe der Benutzer-ID und Passwort bestätigt werden. Ein Kommentarfenster zum automatischen Audit Trail-Eintrag öffnet sich.

Eine geprüfte Methode oder ein geprüftes Ergebnis kann nicht weiter verändert oder gelöscht werden. Eine Archivierung ist weiterhin möglich.

Standardmäßig ist es möglich, mehrere Proben in einem Schritt freizugeben (sogenannte Sammelfreigabe). Diese Möglichkeit kann unter den Pharma-Einstellungen im Einstellungscenter gesperrt werden. Siehe auch Kapitel **3.2 Application**.





# SI Analytics

a **xylem** brand

## Hersteller

(Manufacturer)

**Xylem Analytics Germany GmbH**

Am Achalaich 11  
82362 Weilheim  
Germany

SI Analytics

Tel. +49(0)6131.894.5111

Fax. +49(0)6131.894.5001

E-Mail: [si-analytics@xylem.com](mailto:si-analytics@xylem.com)

[www.XylemAnalytics.com](http://www.XylemAnalytics.com)

## Service und Rücksendungen

(Service and Returns)

**Xylem Analytics Germany Sales GmbH & Co.KG**

SI Analytics

Gebäude G12, Tor Rheinallee 145

55120 Mainz

Deutschland, Germany

Tel. +49(0)6131.894.5042

Fax. +49(0)6131.894.5105

E-Mail: [Service-Instruments.si-analytics@xylem.com](mailto:Service-Instruments.si-analytics@xylem.com)

SI Analytics is a trademark of Xylem Inc. or one of its subsidiaries.

© 2024 Xylem, Inc. Version 240508 D