

TitriSoft

SOFTWARE

Version 3.4.0/3.4.0 P

SI Analytics

a **xylem** brand

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	2
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	5
3 Einstellungscenter	6
3.1 Management - Einstellungen	6
3.2 Application.....	7
3.2.1 Datenbank auswählen	8
3.3 Konfiguration	8
3.3.1 Konfiguration	9
3.3.2 Geräte	10
3.3.3 Elektroden	12
3.3.4 Reagenzien	12
3.3.5 Ergebnisse	13
3.3.6 Globale Variablen.....	13
3.3.7 Proben text.....	14
3.3.8 Proben daten.....	14
3.4 Profile	15
3.4.1 Benutzerprofil erstellen.....	16
3.5 Benutzer.....	17
3.5.1 Funktionsübersicht	18
3.5.2 Voreingestellte Benutzer.....	18
3.5.3 Benutzer erstellen.....	18
3.5.4 Account zurücksetzen / Passwort ändern	19
3.5.5 Account deaktivieren	21
3.6 Logging.....	21
3.7 Audit Trail	21
3.8 Logout	21
4 Titrationscenter.....	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 Verwendung eines Probenwechslers.....	26

4.2	Methodencenter.....	27
4.2.1	Funktionsübersicht	28
4.2.2	Hinzufügen einer neuen Methode.....	28
4.2.3	Titrationenbausteine	29
4.2.3.1	Titrationsschleifen.....	30
4.2.3.1.1	Endpunktstirationen.....	30
4.2.3.1.2	Lineare Titration	32
4.2.3.1.3	Dynamische Titration.....	34
4.2.3.1.4	pH-Stat Titration	36
4.2.3.1.5	Photometrische Titrationen.....	38
4.2.3.2	Berechnungen.....	38
4.2.3.2.1	Ergebnistyp	39
4.2.3.2.2	Der Formeleditor	42
4.2.3.3	43
4.2.3.4	Dosierbaustein	44
4.2.3.5	Wartezeit, Rührgeschwindigkeit und Kurve zurücksetzen.....	45
4.2.3.6	IO-Box.....	45
4.2.3.7	Direktkommando	45
4.2.3.8	ISE	46
4.2.3.8.1	ISE – Kalibration.....	46
4.2.3.8.2	ISE-Messung.....	47
4.2.3.8.3	ISE-Addition	48
4.2.4	Logische Abfragen.....	50
4.2.5	Meldungen.....	50
4.3	Kurve und Schnellzugriff Probenwechsler.....	51
4.4	Beispielablauf einer Methode.....	52
5	Datenbankcenter	56
5.1	Selektionsbereich	56
5.2	Probenansicht.....	57
5.2.1	Funktionsübersicht	57
5.2.2	Ansichtsübersicht	58
5.2.2.1	Titrationsschleife und Titrationen.....	58
5.3	Tabellenansicht	59
5.3.1	Funktionsübersicht	60
6	Pharma-Version.....	60
6.1	Audit Trail	60
6.2	Prüfen und Freigeben von Methoden und Testergebnissen.....	61

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 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 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_3.4_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 **Titrisoft34.mdb** und eine Datenbank mit Beispiel-Methoden, **Titrisoft34_examples.mdb**. Die Pharmaversion der TitriSoft wird zusätzlich mit einer **Titrisoft34_P.mdb** bzw. **Titrisoft34_P_examples.mdb** ausgeliefert.

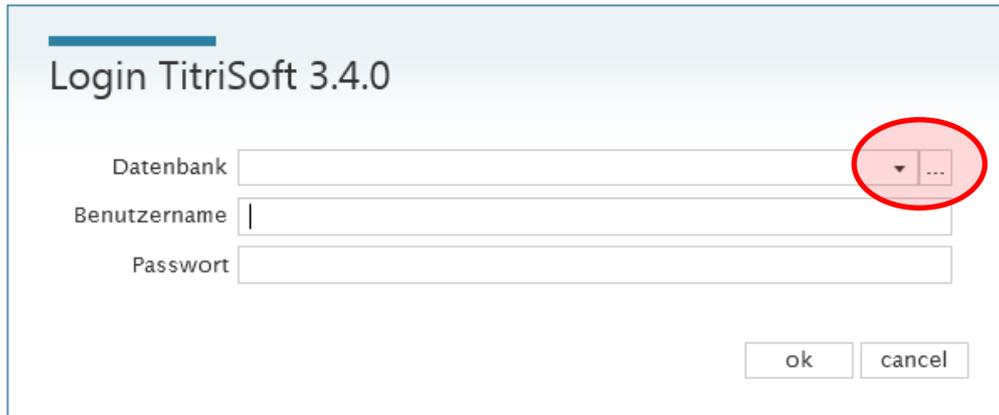
Die Datenbank kann nach der Installation auch an einem anderen Speicherort (z.B. einem Netzwerklaufwerk) abgelegt werden. Hier müssen volle Lese- und Schreibrechte vorhanden sein.

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.

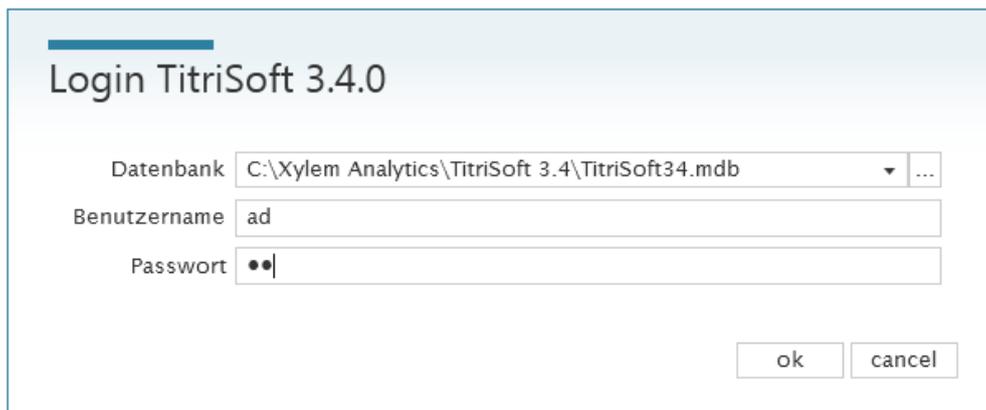


Die Auswahl der Datenbank steht an dieser Stelle nur beim ersten Start zur Verfügung. Danach kann die Datenbank über die Systemeinstellungen in TitriSoft ausgewählt werden.

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**.

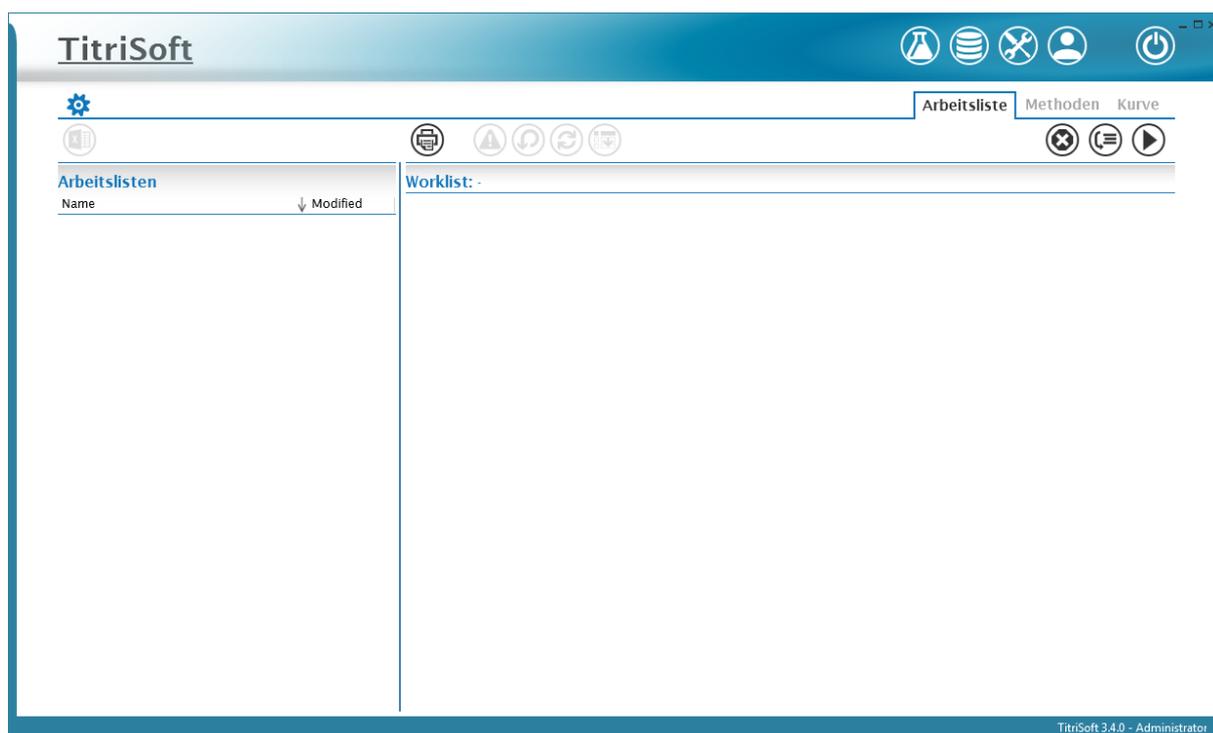


3 Einstellungszenter

3.1 Management - Einstellungen

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

Das Einstellungszenter erreicht man über den  Button.



3.2 Application

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

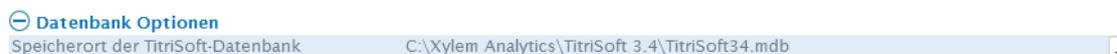
TitriSoft-Einstellungen	
Name	Value
Programm	
Version	3.4.0.0
Statistik	
Konfigurationen	0
Methoden	0
Arbeitslisten	0
Proben	0
Datenbank Optionen	
Speicherort der TitriSoft-Datenbank	C:\Xylem Analytics\TitriSoft 3.4\TitriSoft34.mdb
Backup-Pfad	C:\Xylem Analytics\TitriSoft 3.4
Backup-Intervall (Tagen)	7
Anzahl gespeicherter Backups	20
Letztes Backup	24.03.2020
Sicherheit	
Active directory domain	
Änderungsintervall (Monaten)	600
Minimale Länge	0
Sonderzeichen sind erforderlich	<input type="checkbox"/>
Ein numerisches Zeichen ist erforderlich	<input type="checkbox"/>

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 3.2.1 Datenbank auswählen .
Backup - Pfad	Speicherort der Backup-Dateien.

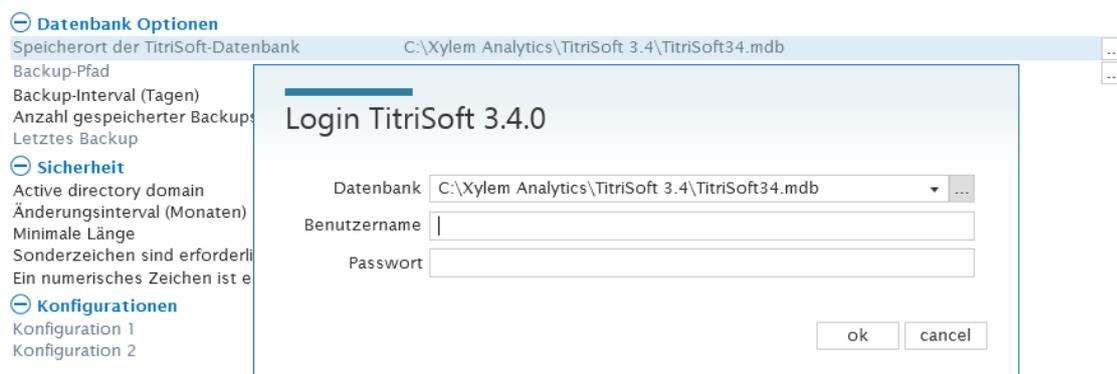
Backup - Interval (Tagen)	Definiert die Häufigkeit, mit der ein Backup durchgeführt werden soll.
Anzahl gespeicherter Backups	Legt die Anzahl an zurückliegend gespeicherten Backup – Dateien fest. Dateien hierüber hinaus werden automatisch gelöscht.
Letztes Backup	Zeigt an, wann das letzte Backup durchgeführt wurde.
Active directory domain	In Vorbereitung.
Änderungsintervall (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.

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

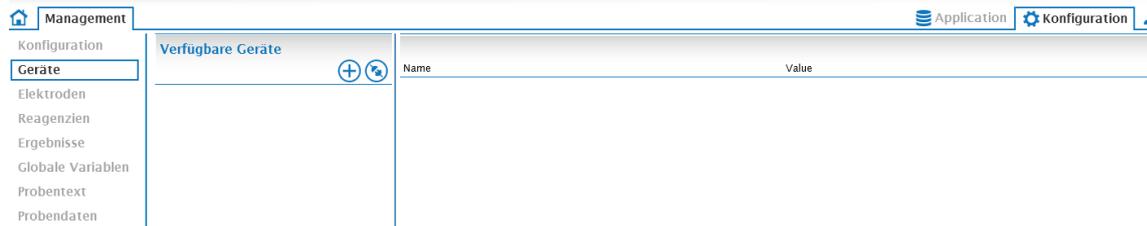
Diese Konfiguration steht automatisch im Titrationscenter zur Verfügung.

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

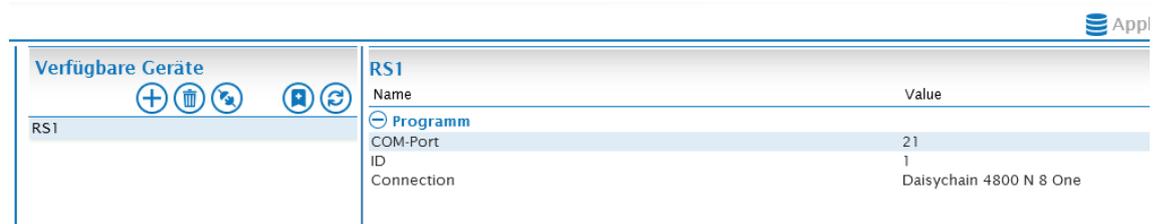
Unter **Geräte** werden RS-Schnittstellen konfiguriert und Geräte gescannt.



Durch Anklicken von  werden allen verfügbaren Schnittstellen ermittelt.



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



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

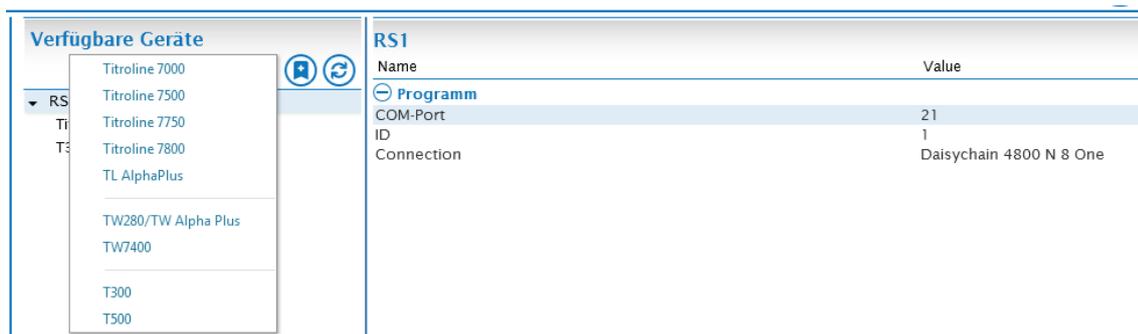
Mit  wird nach Geräten gesucht, die an dieser Schnittstelle angeschlossen sind.



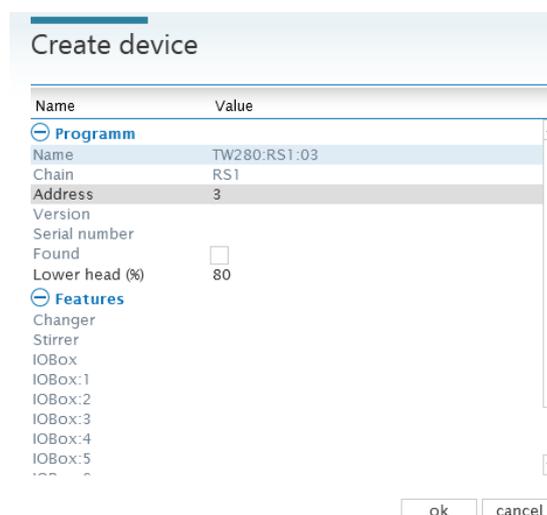
Das Popup-Fenster **Scan Hardware** zeigt alle gefundenen Geräte an. Diese Geräte werden automatisch unter **RS1** aufgeführt.

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 TW280 / TW alpha plus mit der Adresse 3 hinzugefügt.



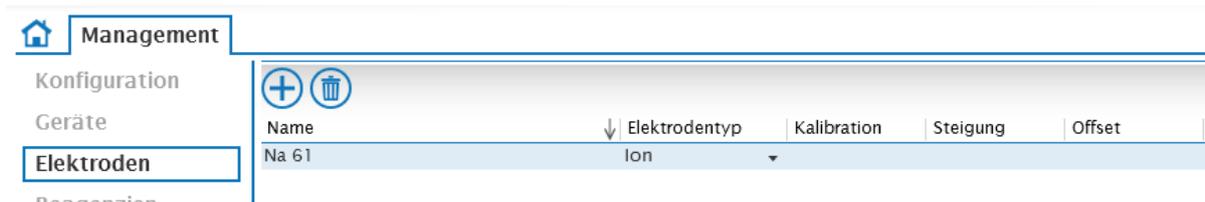
Geräte können mittels  wieder entfernt werden.

3.3.3 Elektroden

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



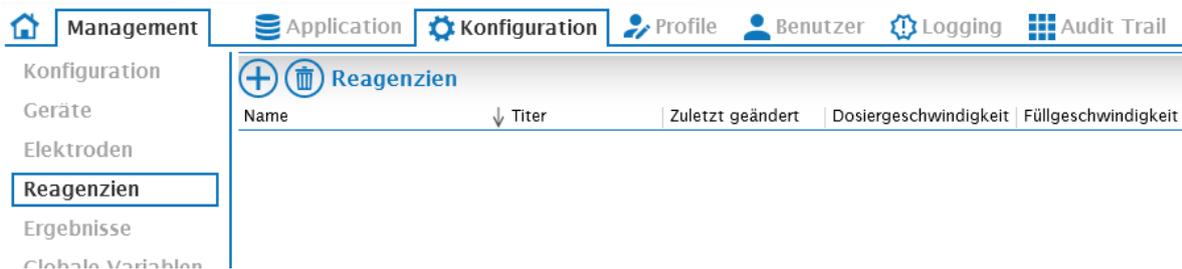
Mit  wird eine neue Elektrode hinzugefügt. Die Bezeichnung ist frei wählbar (Hier **Na 61**).



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.



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

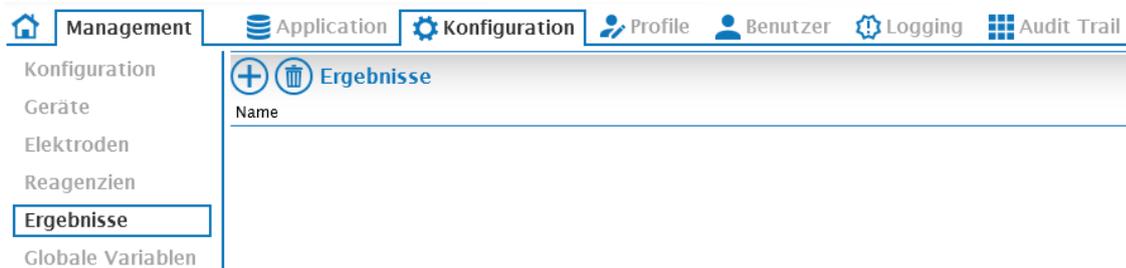
Ist die Bezeichnung des Reagenz identisch mit der Bezeichnung im Wechselaufsatz des Titrators oder der Bürette, so liest TitriSoft die Konzentration aus dem Wechselaufsatz aus und speichert diese in der Datenbank. Die bei einer Titerbestimmung bestimmte Konzentration wird bei identischer Bezeichnung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



Die erstellten Ergebnisvariablen stehen im Titrationscenter zur Verfügung.

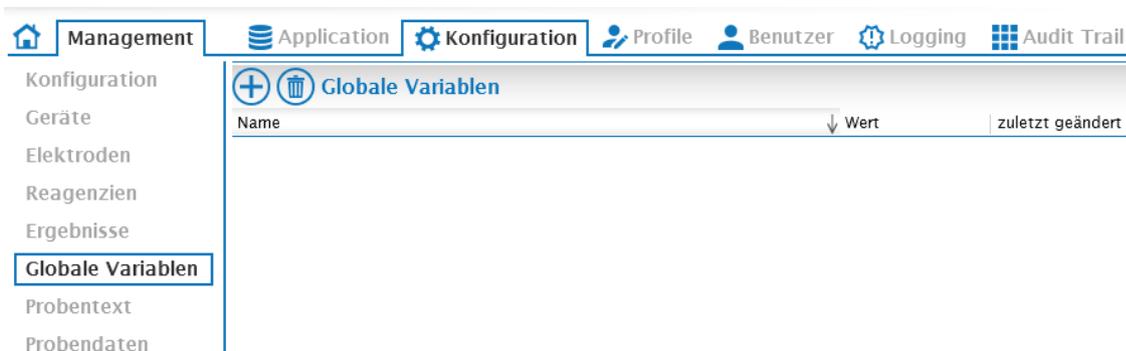
Eine neue Ergebnisvariable wird in der Regel im Methodencenter erstellt. Diese sind ebenfalls in diesem Abschnitt zu finden.

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.



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).

+ - Globale Variablen		
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.

+ - Probendaten	
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.

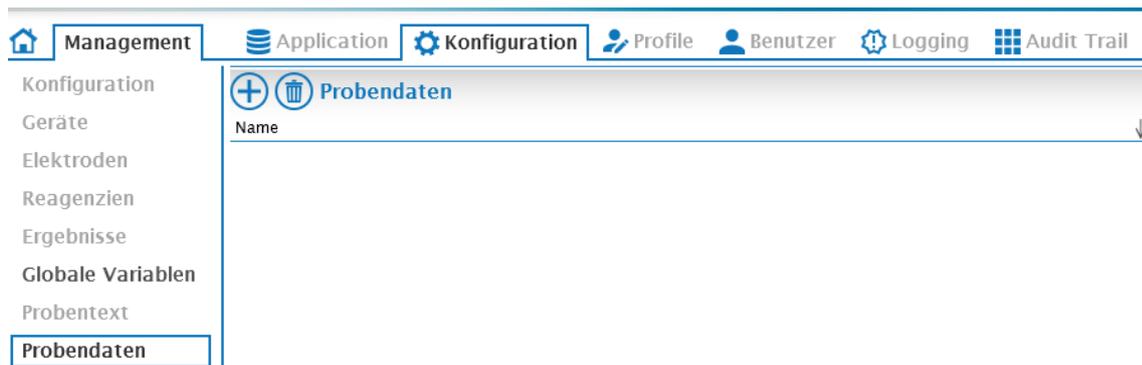
+ - Probendaten	
Name	
Probe Herkunft	

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

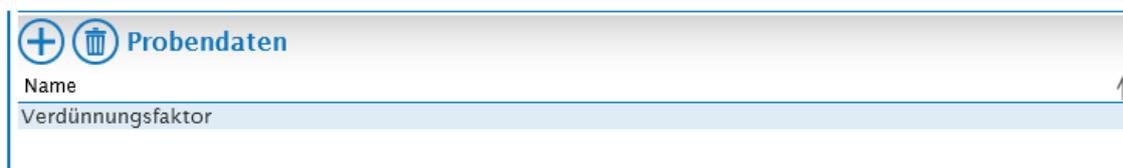
3.3.8 Probendaten

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.



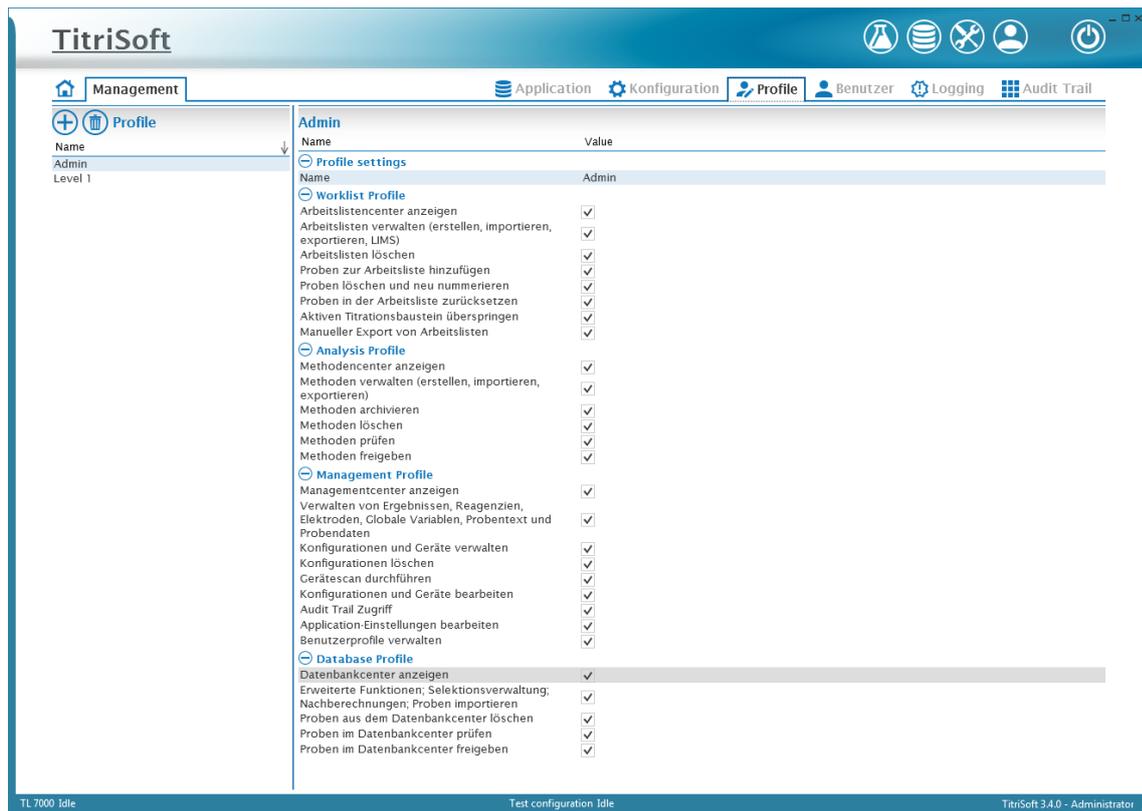
Die so erstellten Probendaten - Variablen stehen im Titrations- und Methodencenter zur Verfügung.

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 **Geräte scannen**) und **Datenbankcenter** (**Probe löschen**) sollten dem Administrator vorbehalten sein.

Name	Value
Profile settings	
Name	Admin
Worklist Profile	
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"/>
Analysis Profile	
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"/>
Management Profile	
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"/>
Database Profile	
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.

3.5 Benutzer

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

Management Application Konfiguration Profile Benutzer Logging Audit Trail				
+ Benutzer				
Name	↓ vollständiger Name	Profil	Letzter Login	Status
ad	Administrator	Admin	25.03.2020	Active
ad1	Administrator 1	Admin		Active
op	Operator	Level 1		Active

3.5.1 Funktionsübersicht

	Hinzufügen
	Account zurücksetzen
	Account deaktivieren

3.5.2 Voreingestellte Benutzer

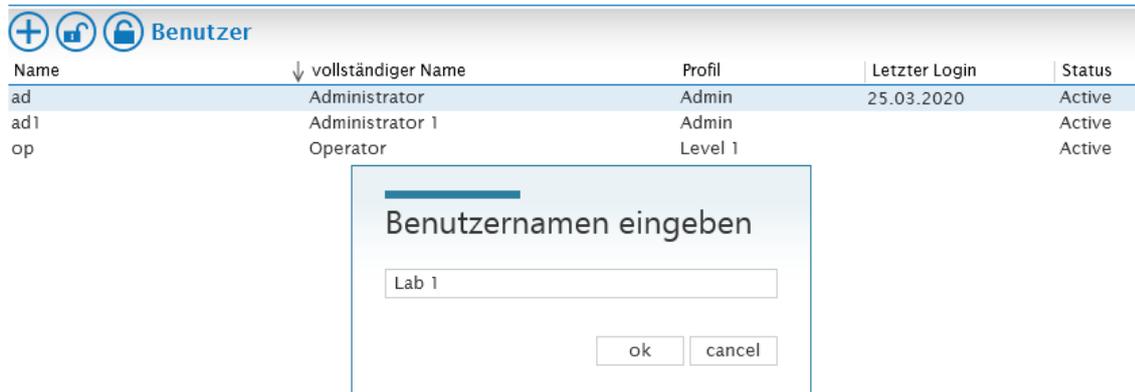
In den mitgelieferten Datenbanken sind drei Benutzer voreingestellt. Zwei Benutzer besitzen volle Administratorrechte und ein Benutzer eingeschränkte Rechte.

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 Benutzer erstellen

Mit  wird ein neuer Benutzer erstellt. Zunächst wird der Benutzername (Anmeldename, User-ID) eingegeben.

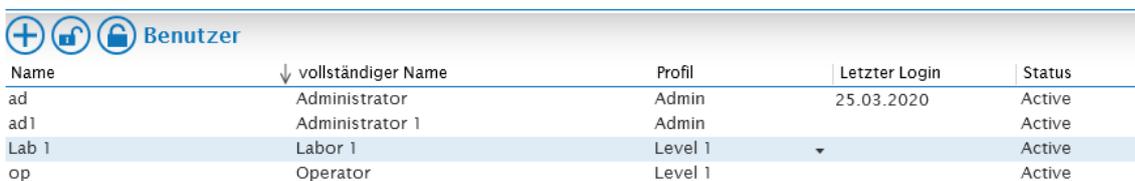


The screenshot shows a user management interface with a table of users and a dialog box for creating a new user.

Name	↓ vollständiger Name	Profil	Letzter Login	Status
ad	Administrator	Admin	25.03.2020	Active
ad1	Administrator 1	Admin		Active
op	Operator	Level 1		Active

The dialog box titled "Benutzernamen eingeben" contains a text input field with the value "Lab 1" and two buttons: "ok" and "cancel".

Anschließend wird der vollständige Name eingegeben und dem neuen Benutzer ein Profil zugewiesen.



The screenshot shows the user management interface after creating a new user. The table now includes a new user 'Lab 1' with the full name 'Labor 1' and profile 'Level 1'.

Name	↓ vollständiger Name	Profil	Letzter Login	Status
ad	Administrator	Admin	25.03.2020	Active
ad1	Administrator 1	Admin		Active
Lab 1	Labor 1	Level 1		Active
op	Operator	Level 1		Active

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



Ein neuer Benutzer muss beim ersten Anmeldevorgang sein Passwort vergeben. Bei der ersten Anmeldung wird der Benutzername (User ID) eingegeben und ohne Passwordeingabe mit **ok** bestätigt.

Es öffnet sich ein weiteres Fenster, in dem das neue Passwort vergeben wird.

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

Wird ein Passwort 6x falsch eingegeben, ist der Benutzer automatisch gesperrt.

3.5.4 Account zurücksetzen / Passwort ändern

Mit  kann ein Account zurückgesetzt werden. Nach dem Zurücksetzen muss ein neues Passwort vergeben werden.

Name	↓ vollständiger Name	Profil	Letzter Login	Status
ad	Administrator	Admin	25.03.2020	Active
ad1	Administrator 1	Admin	25.03.2020	Active
Lab 1	Labor 1	Level 1	25.03.2020	Active
op	Operator	Level 1		Active

Zurücksetzen

Wollen Sie den Account Lab 1Labor 1 wirklich zurücksetzen?

Der Status des Benutzers wird als **Reset** angezeigt.

Der Benutzer muss beim nächsten Anmeldevorgang sein neues Passwort vergeben. Hierzu gibt er seinen Benutzernamen ein und bestätigt mit **ok**.

Login TitriSoft 3.4.0

Datenbank: C:\Xylem Analytics\TitriSoft 3.4\TitriSoft34.mdb

Benutzername: Lab 1

Passwort:

Es öffnet sich ein weiteres Fenster, in dem das neue Passwort vergeben wird

Login TitriSoft 3.4.0

Altes Passwort:

Neues Passwort:

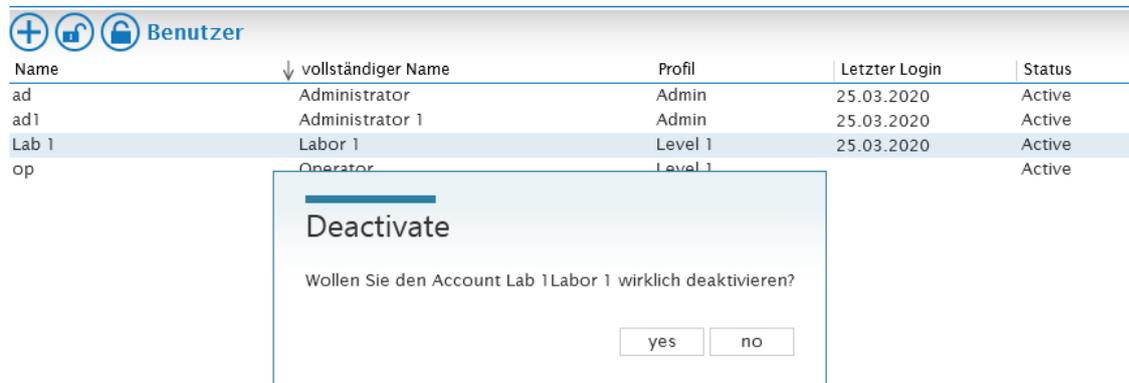
Passwort bestätigen:

Das neue Passwort darf nicht mit den letzten zwei verwendeten Passwörtern identisch sein.

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

3.5.5 Account deaktivieren

Über  wird ein Account deaktiviert.



Name	vollständiger Name	Profil	Letzter Login	Status
ad	Administrator	Admin	25.03.2020	Active
ad1	Administrator 1	Admin	25.03.2020	Active
Lab 1	Labor 1	Level 1	25.03.2020	Active
op	Operator	Level 1		Active

Deactivate

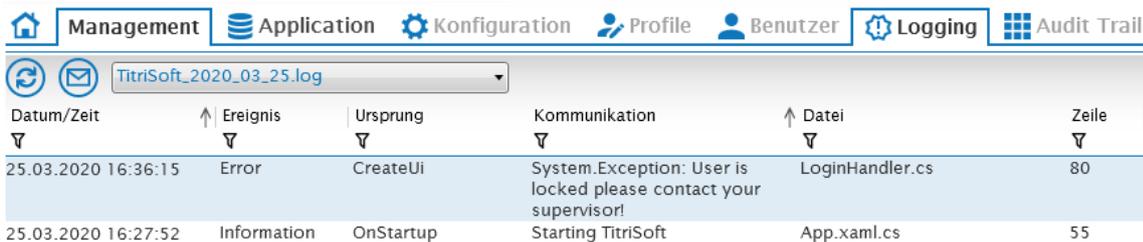
Wollen Sie den Account Lab 1Labor 1 wirklich deaktivieren?

Nach dem Deaktivieren wird der Status des Benutzers als **Locked** angezeigt. Deaktivierte Benutzer können sich nicht mehr in TitriSoft einloggen.

Um einen deaktivierten User wieder zu aktivieren, muss der Account zunächst zurückgesetzt werden. Anschließend kann der Benutzer ein neues Passwort vergeben.

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.

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**.

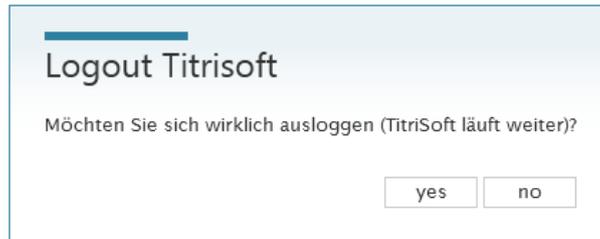
3.8 Logout

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

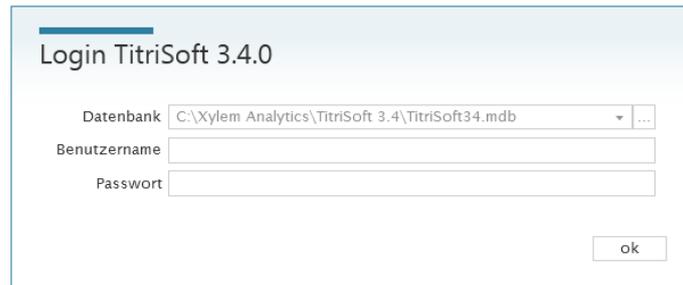
Das Abmelden erfolgt über den Logout – Button .



Nach Bestätigung des Logouts ist der aktuelle User abgemeldet.



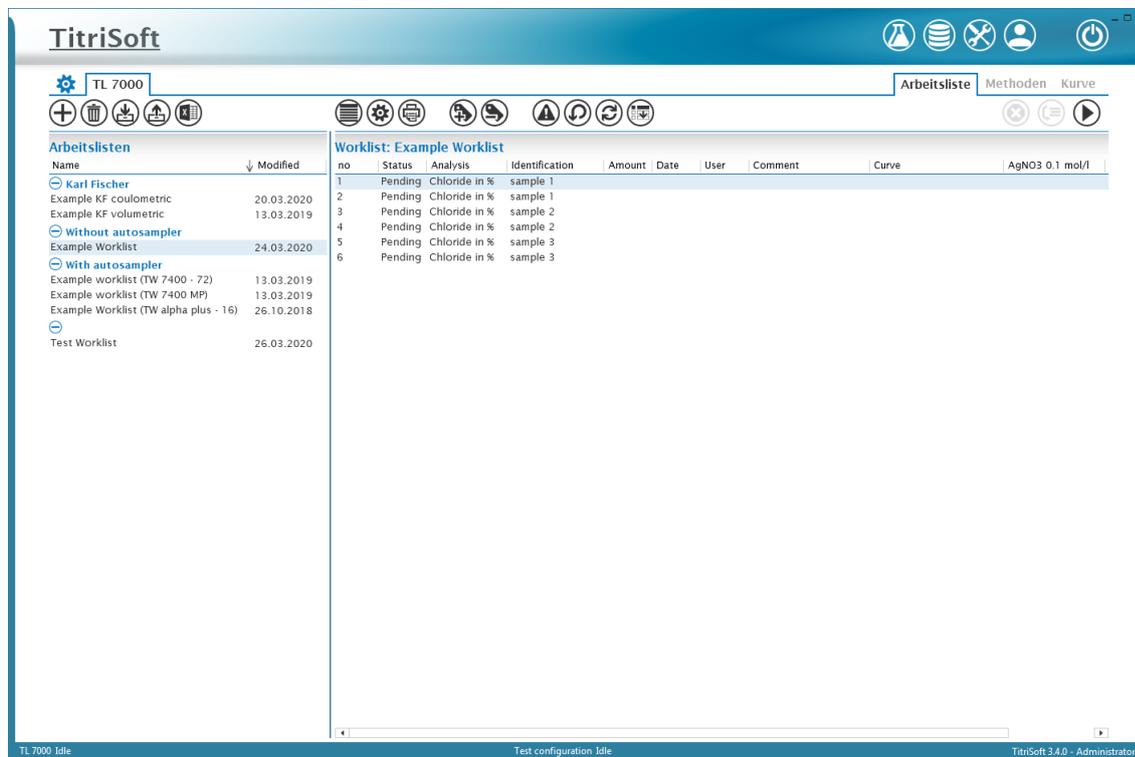
Nach dem Abmelden wird das Anmeldefenster angezeigt. TitriSoft arbeitet im Hintergrund weiter.



Es wird jeweils der Nutzer dokumentiert, bei dem die Probe gestartet wurde. Bei Neuanmeldung 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 4.1.2 Im- und Exportieren von Arbeitslisten .
	Erstellen eines LIMS Excel-Templates.
	Organisation der Arbeitslistenspalten. Siehe auch Kapitel 4.1.3 Arbeitslistenspalten organisieren .
	Aufruf der Arbeitslisteneinstellungen. Siehe auch Kapitel 4.1.4 Arbeitslisteneinstellungen .
	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.
	Neunnummerierung 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 Titrationsen, 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 TitriSoft 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
⊖ Allgemein	
Name	Example Worklist
Kategorie	Without autosampler
Arbeitslistentyp	Normal
Erstellt von	Administrator
Erstellt am	26.10.2018
Zuletzt geändert am	20.03.2020
⊖ Report-Eigenschaften	
Reporttyp	Curve list
Reporttitel	
Querformat	<input type="checkbox"/>
Report bei Fertigstellung	<input type="checkbox"/>
⊖ LIMS-Import Eigenschaften	
Automatischer Import-Typ	<input type="checkbox"/>
⊖ Export-Eigenschaften	
Exportieren bei Fertigstellung	None
Datum in Export-Dateinamen einfügen	<input type="checkbox"/>
⊖ Changer Properties	
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-Titrationsen 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 Fertigstellung einer Arbeitsliste erstellt. Nach Aktivierung kann ein Speicherpfad ausgewählt werden.
Datum im Export-Dateinamen einfügen	Bei Aktivierung wird dem Dateinamen automatisch ein Datum und eine Uhrzeit angefügt. Andernfalls wird eine bereits vorhandene Datei überschrieben.
Wechsler	Bei Verwendung eines Probenwechslers wird dieser hier ausgewählt. Zu den Einstellungen siehe Kapitel 4.1.4.1. Verwendung eines Probenwechslers

4.1.4.1 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.
Kalibrierung mit Wechsler	Bei Aktivierung wird bei Start einer Arbeitsliste eine Kalibrierung einer pH-Elektrode durchgeführt (2- oder 3-Punkt). Die Definition der zu verwendenden Puffer erfolgt am Titrator.
Leere Positionen überspringen	Nur für 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 None ausgewählt, reinigt die Pumpe in der Probenposition.
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. Nicht aktiv, wenn eine Pumpe verwendet wird.

4.2 Methodencenter

TitriSoft Arbeitsliste Methoden Kurve

TL 7000

Methode	Alkalinity (p+m)	Version	Alkalinity (p+m)
Methods	Alkalinity (p+m)	1	Alkalinity (p+m)
Alkalinity (p+m)	Endpunktstirration Titroline 7000:RS1:01:pHA 8.0; Burette: Titroline 7000:RS1:01		Name Value
Bases (non-aqueous)	Formel: XatY(8,2)		Methodenbeschreibung
Beispiel Sample-Variable	Formel: Result[ml at pH 8.2]*Titer[HCl 0.1 mol/l]*1000/Amount		Name Alkalinity (p+m)
Blank Bromine number	Endpunktstirration Titroline 7000:RS1:01:pHA 4.1; Burette: Titroline 7000:RS1:01		Archiviert (nicht verfügbar in der Arbeitsliste) <input type="checkbox"/>
Blank TAN ASTM 664	Formel: XatY(4,3)		Version 1
Blank TBN ISO 3771	Formel: Result[ml at pH 4.3]*Titer[HCl 0.1 mol/l]*1000/Amount		Kategorie Methods
Bromine number			Erstellt von Administrator
Ca + Mg			Erstellt am 23.10.2018
Chloride in %			Zuletzt geändert am 04.05.2020
Chloride in mg/l			Analysis Properties
COD Blank			Stirrer
COD Sample			Balance None
FOS/TAC			Methodenkommentar
H2O2 (Ce(SO4)2)			Kommentar
Hydrochlorides			
Mercaptane			
Methode Nachrichten			
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			
Karl Fischer Titrations			
KF Sample			
KF Titer			
Standardisation			
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			

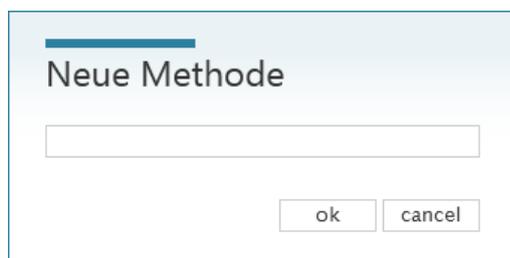
TL 7000 Idle TitriSoft 3.4.0 - Administrator

4.2.1 Funktionsübersicht

	Hinzufügen einer neuen Methode. Siehe auch Kapitel 4.2.2 Hinzufügen einer neuen Methode .
	Kopieren einer bereits bestehenden Methode.
	Löschen einer Methode
	Importieren einer Methode
	Exportieren einer Methode
	Archivieren einer Methode. Dies steht nicht mehr in der Arbeitsliste zur Verfügung.
	Titrationsteile zu der Methode hinzufügen. Siehe auch Kapitel 4.2.3 Titrationsbausteine .
	Logische Abfragen zu einer Methode hinzufügen- Siehe auch Kapitel 4.2.4 Logische Abfragen .
	Automatische Meldungen einer Methode hinzufügen. Siehe auch Kapitel 4.2.5 Meldungen .
	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.



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

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

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 7000:RS1:01:pHA 8,0; Bürette: Titroline 7000:RS1:01

Name	Value
Optionen	
Typ	EndPoint
Parameter	Titroline 7000:RS1:01:pHA
Bürette	Titroline 7000:RS1:01
Reagenz	HCl 0.1 mol/l ...
Füll-Optionen	Never
Rührgeschwindigkeit	
End-Bedingungen	
Endwert	8,0 ...
Endvolumen verwenden	<input checked="" type="checkbox"/>
Endvolumen	20 ...
Endpunktverzögerung	10
Lineare Schrittweite	0,02
Delta Wert	1,2
Drift-Einstellungen	
Messgeschwindigkeit	Custom
Dämpfung	None
Messzeit (s)	2
Delta mV/minute	20
Minimale Zeit (s)	2
Maximale Zeit (s)	15
Steigungs-Einstellungen	
Steigungstyp	Custom down
Maximales Dosiervolumen	1
Minimales Dosiervolumen	0,05
Steigung bei max. Dosiervolumen	10
Steigung bei min. Dosiervolumen	120
Anzeige-Einstellungen	
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.
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

Lineare Titration Titroline 7000:RS1:01:pHA 8,0; Bürette: Titroline 7000:RS1:01	
Name	Value
Optionen	
Typ	Lineair
Parameter	Titroline 7000:RS1:01:pHA
Bürette	Titroline 7000:RS1:01
Reagenz	HCl 0.1 mol/l ...
Füll-Optionen	Never
Rührgeschwindigkeit	
End-Bedingungen	
Endwert verwenden	<input type="checkbox"/>
Endvolumen verwenden	<input checked="" type="checkbox"/>
Endvolumen	20 ...
Anzahl EQ's	-
Lineare Schrittweite	0,02
Drift-Einstellungen	
Messgeschwindigkeit	Custom
Dämpfung	None
Messzeit (s)	2
Delta mV/minute	20
Minimale Zeit (s)	2
Maximale Zeit (s)	15
Steigungs-Einstellungen	
Steigungstyp	Down ▼
Anzeige-Einstellungen	
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
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 7000:RS1:01:pHA 8,0; Bürette: Titroline 7000:RS1:01

Name	Value
Optionen	
Typ	Dynamic
Parameter	Titroline 7000:RS1:01:pHA
Bürette	Titroline 7000:RS1:01
Reagenz	HCl 0.1 mol/l ...
Füll-Optionen	Never
Rührgeschwindigkeit	
End-Bedingungen	
Endwert verwenden	<input type="checkbox"/>
Endvolumen verwenden	<input checked="" type="checkbox"/>
Endvolumen	20 ...
Anzahl EQ's	1
EQ-Empfindlichkeit	150
Drift-Einstellungen	
Messgeschwindigkeit	Custom
Dämpfung	None
Messzeit (s)	2
Delta mV/minute	20
Minimale Zeit (s)	2
Maximale Zeit (s)	15
Steigungs-Einstellungen	
Steigungstyp	Custom down
Maximales Dosiervolumen	1
Minimales Dosiervolumen	0,05
Steigung bei max. Dosiervolumen	10
Steigung bei min. Dosiervolumen	120
Anzeige-Einstellungen	
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
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 7000:RS1:01:pHA 7; Bürette: Titroline 7000:RS1:01

Name	Value
Optionen	
Typ	pHStat
Parameter	Titroline 7000:RS1:01:pHA
Bürette	Titroline 7000:RS1:01
Reagenz	NaOH 0.1 mol/l ...
Füll-Optionen	Never
Rührgeschwindigkeit	
End-Bedingungen	
Endvolumen verwenden	<input type="checkbox"/>
pH-Stat Wert	7
Lineare Schrittweite	0,02
Delta Wert	1
Endzeit	600
Messintervall (s)	10
Drift-Einstellungen	
Messgeschwindigkeit	Custom
Dämpfung	None
Messzeit (s)	2
Delta mV/minute	20
Minimale Zeit (s)	2
Maximale Zeit (s)	15
Steigungs-Einstellungen	
Steigungstyp	Custom up
Maximales Dosiervolumen	1
Minimales Dosiervolumen	0,02
Steigung bei max. Dosiervolumen	15
Steigung bei min. Dosiervolumen	230
Anzeige-Einstellungen	
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.
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	<input type="text"/>
Dezimalstellen	5
Glättung	None
Maximum EQ's	-
Formel	<input type="text"/>
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 4.2.3.2.1 Ergebnistyp .
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 4.2.3.2.2. Der Formeleditor .

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. Achtung: Der Variablenname muss hierfür mit dem auf dem Aufsatz gespeicherten Namen übereinstimmen!
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.

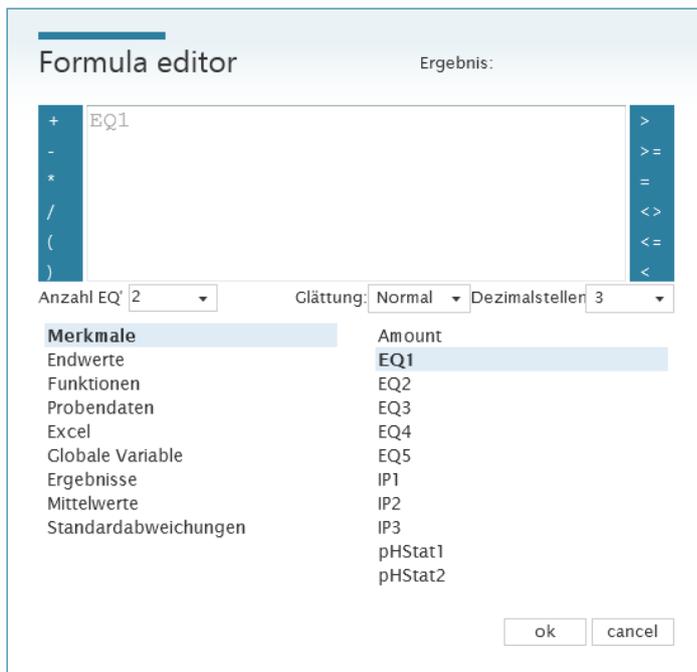
Eine Ergebnis - Variable kann im Managementcenter erstellt werden, aber auch direkt im Methodencenter. Über  öffnet sich ein Eingabefenster zur Eingabe des Variablennamens, hier EQ1.

Formel:

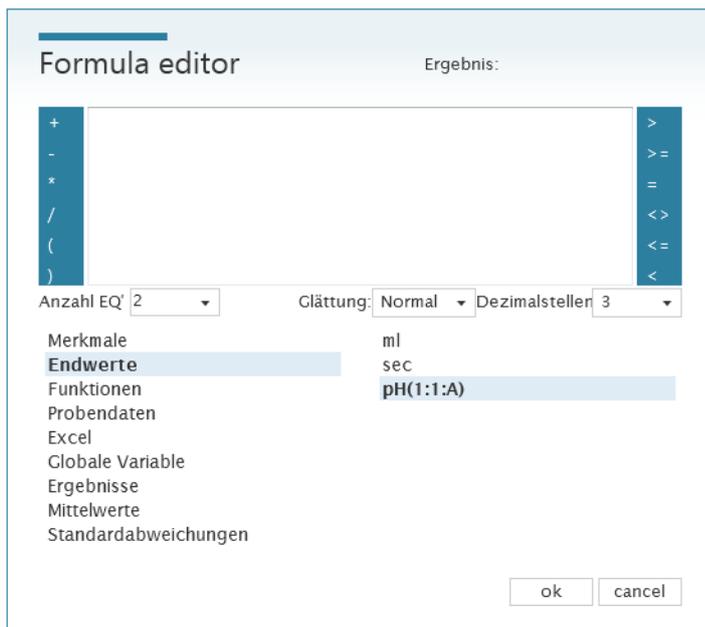
Name	Value
Berechnung	
Typ	Result
Ergebnis	
Dezimalstellen	3
Glättung	NONE
Maximum EQ's	2
Formel	
Marker	None
x-Fenster	
x-Fenster verwenden	<input type="checkbox"/>
y-Fenster	
y-Fenster verwenden	<input type="checkbox"/>

Enter Result name

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.

The screenshot shows the 'Management' section of the software. The left sidebar contains a menu with the following items: Konfiguration, Geräte, Elektroden, Reagenzien, Ergebnisse, Globale Variablen, Probentext, and **Probendaten** (which is highlighted with a blue border). The main content area is titled 'Probendaten' and contains a table with two columns: 'Name' and 'Dichte'. The 'Dichte' row is highlighted in light blue.

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

The screenshot shows the 'Formel:' configuration window. It has a table with columns 'Name' and 'Value'. The 'Formel' row is highlighted in light blue. To the right of the 'Formel' row, there is a red circle around an ellipsis button (...). Other rows in the table include 'Typ' (Sample), 'Ergebnis' (Dichte), 'Dezimalstellen' (2), 'Glättung' (None), 'Maximum EQ's' (-), 'Marker' (None), 'x-Fenster verwenden' (checkbox), and 'y-Fenster verwenden' (checkbox).

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

The screenshot shows the 'Formel editor' dialog box. The title bar says 'Formel editor' and 'Ergebnis:'. The main area contains a formula field with the text 'Sample[\'Dichte\']'. Below the formula field, there are dropdown menus for 'Anzahl EQ' (0), 'Glättung' (None), and 'Dezimalstellen' (2). A list of variables is shown below, with 'Probendaten' highlighted in blue. At the bottom, there are 'ok' and 'cancel' buttons.

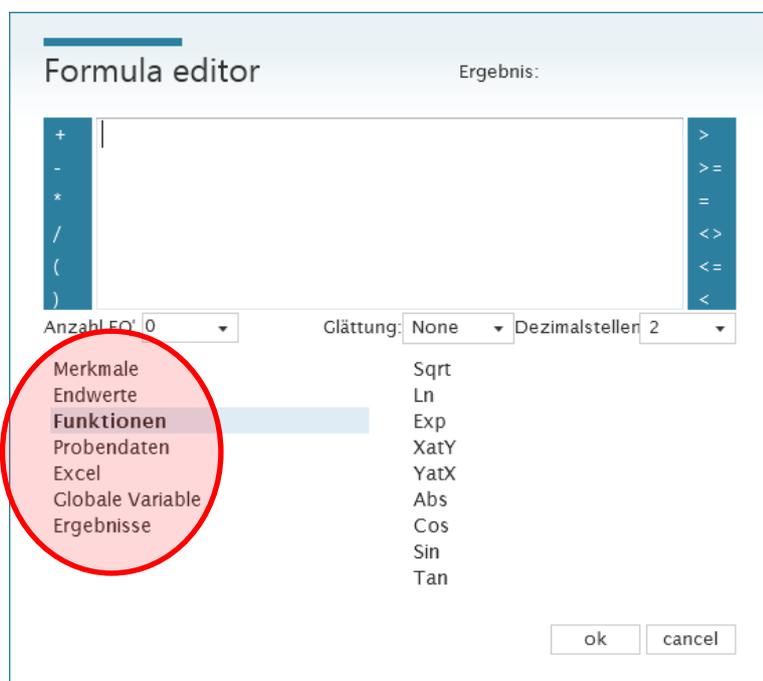
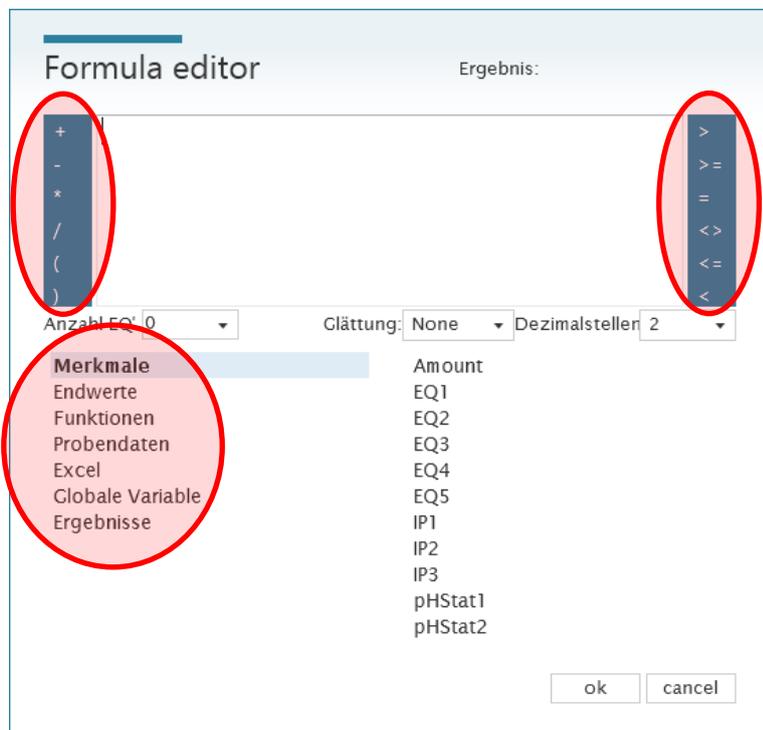
Bei Auswahl der Methode in der Arbeitsliste erscheint die Probenvariable als numerisches Eingabefeld. Alternativ kann eine in dem Einstellungscenter angelegte Variable direkt in einer Berechnung z.B. einer Result – Variable, verwendet werden. Das Eingabefeld erscheint auch in diesem Fall automatisch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

4.2.3.3

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

Messung: Titroline 7000:RS1:01:pHA

Name	Value
Optionen	
Parameter	Titroline 7000:RS1:01:pHA
Rührgeschwindigkeit	<input type="range"/>
Wartezeit (s)	0
Meldung	
Drift-Einstellungen	
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

Dosiere Volumen: 10 HCl 0.1 mol/l von Titroline 7000:RS1:01	
Name	Value
⊖ Dosieren	
Bürette	Titroline 7000:RS1:01
Reagenz	HCl 0.1 mol/l
Volumen	10
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.
Volumen	Gibt das zu dosierende Volumen an. Über <input type="text"/> 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

⊖ IO Box

IO Box	
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 ist, kann sie hier über einen definierten Zeitraum angeschaltet werden. Dies geschieht über Auswahl des Ports ohne Adresse, hier **TW280:RS1:03**.

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

Direktkommando: M

Name	Value
⊖ Optionen	
Gerät	Titroline 7000:RS1:01
Befehl	M
Abschaltzeit (sec)	5

Gerät	Gerät, an das ein RS-Befehl gesendet werden soll.
Befehl	RS-Befehl, der als Direktkommando an das Gerät gesendet wird.
Abschaltzeit	Wartezeit, welche nach Senden des Direktbefehls eingehalten wird.

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

4.2.3.8 ISE

ISE Calibration mit

Name	Value
Optionen	
ISE type	Calibration
Parameter	Addition
Rührgeschwindigkeit	Calibration
Wartezeit (s)	Measurement
Meldung	
ISE-Optionen	
Electrode	
gemessener Wert	...
Konzentration	...
Drift-Einstellungen	
Messgeschwindigkeit	Turbo

4.2.3.8.1 ISE – Kalibration

ISE Calibration mit Titroline 7000:RS1:01:mVA

Name	Value
Optionen	
ISE type	Calibration
Parameter	Titroline 7000:RS1:01:mVA
Rührgeschwindigkeit	
Wartezeit (s)	0
Meldung	
ISE-Optionen	
Electrode	
gemessener Wert	...
Konzentration	...
Drift-Einstellungen	
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 gemessenen 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. Einstellungszentrum).

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
Optionen	
ISE type	Measurement
Parameter	Titroline 7000:RS1:01:mVA
Rührgeschwindigkeit	
Wartezeit (s)	0
Meldung	
ISE-Optionen	
Electrode	
gemessener Wert	...
Ergebnis	...
Dezimalstellen	-
Drift-Einstellungen	
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 3. Einstellungscenter).
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
Optionen	
ISE type	Addition
Parameter	Titroline 7000:RS1:01:mVA
Rührgeschwindigkeit	
Wartezeit (s)	0
Meldung	
ISE-Optionen	
Electrode	
Konzentration	...
Startvolumen	...
Ergebnis	...
Dezimalstellen	-
Bürette	
Anzahl an Zugaben	0
Volumen	...
Drift-Einstellungen	
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 3. Einstellungscenter).
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.

4.2.4 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.

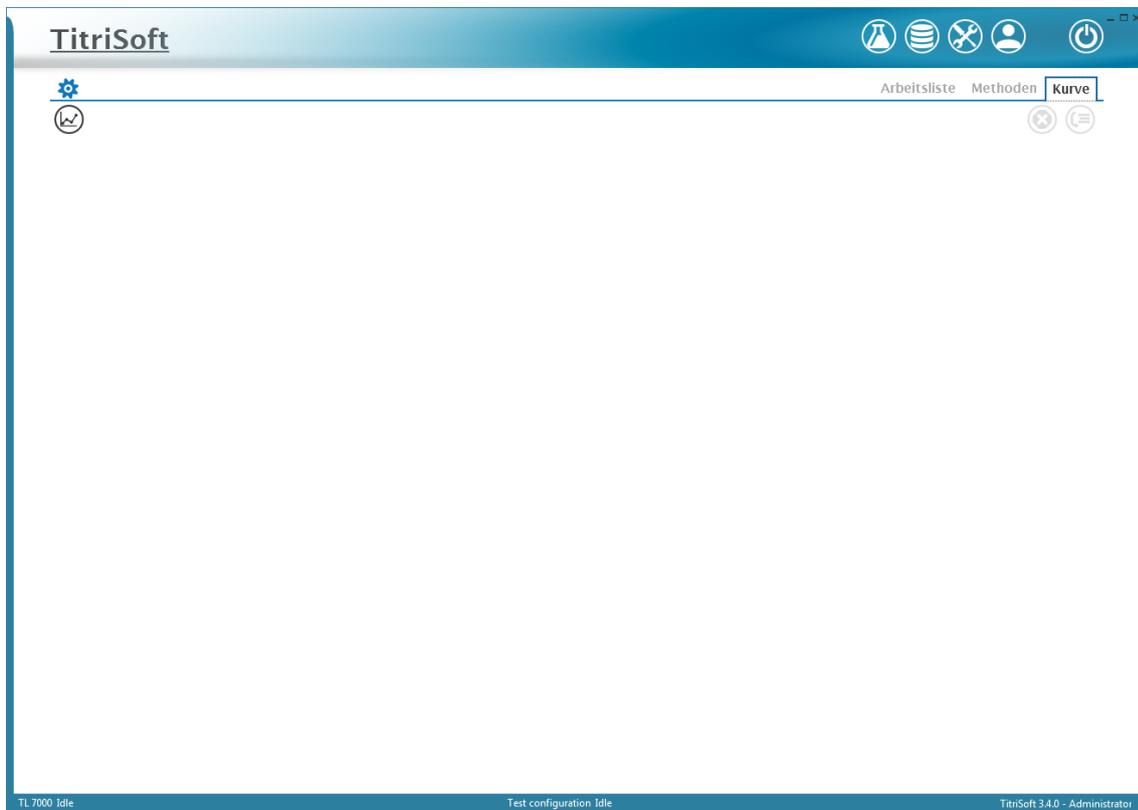
4.2.5 Meldungen

Nachrichtenfenster
Eingabefenster
Einwaagefenster
Probentext

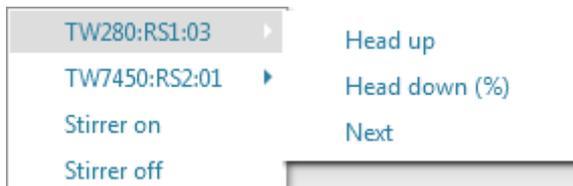
Nachrichtfenster	Ein Titel und eine Nachricht kann eingegeben werden. Nach Bestätigung der Nachricht fährt die Methode mit dem nächsten Baustein fort.
Eingabefenster	Es erscheint eine Eingabeaufforderung. Die Eingabe wird auf einem frei definierbaren Variablentyp gespeichert.
Einwaagefenster	Es erscheint 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.



Head up	Führt den Kopf des ausgewählten Probenwechslers in die höchste Position.
Head down (%)	Senkt den Kopf des Probenwechslers um die angegebene Prozentzahl.
Next	Führt den Probenwechsler in die nächste Position.
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)']
Dosierte Volumen:	30 Wasser von Titroline 7000:RS1:02
Clear curve data	
Dynamische Titration Titroline 7800:RS1:01:mVA ; Burette: Titroline 7800:RS1:01	
Formel:	EQ1
Formel:	Result['EQ 1']*Titer['AgNO3 0.1 mol/l']*0,1*35,453/Amount

1. Messung

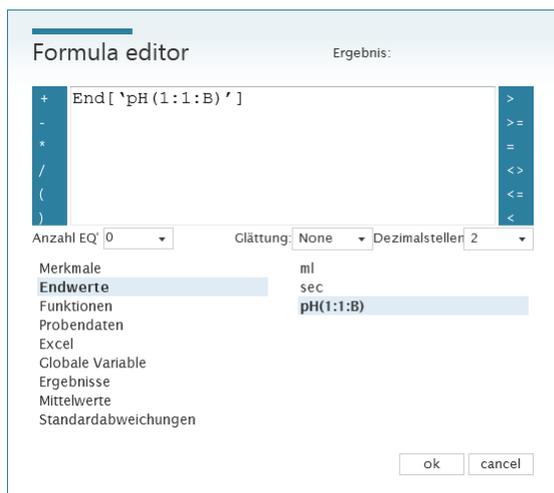
Zu Beginn der Methode wird der Start pH-Wert der Probe ermittelt. Dieser Baustein führt nur die Messung des pH-Wertes durch, die Dokumentation erfolgt in Schritt 2. Es wird ein TL 7800 verwendet, Messkanal B.

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

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



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

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 Dosierburette verwendet.

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

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.

5. Dynamische Titration

Es wird eine Dynamische Titration mit AgNO_3 auf mV durchgeführt. Verwendet wird Messkanal A, bestimmt werden soll der Chloridgehalt der Probe.

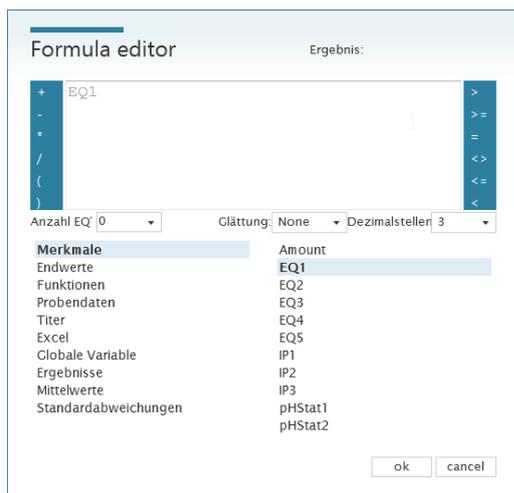
Dynamische Titration Titroline 7800:RS1:01:mVA ; Bürette: Titroline 7800:RS1:01	
Name	Value
Optionen	
Typ	Dynamic
Parameter	Titroline 7800:RS1:01:mVA
Bürette	Titroline 7800:RS1:01
Reagenz	AgNO ₃ 0.1 mol/l ...
Füll-Optionen	Finish
Rührgeschwindigkeit	<input type="range"/>
End-Bedingungen	
Endwert verwenden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

6. Berechnung des Äquivalenzpunktes

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

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

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



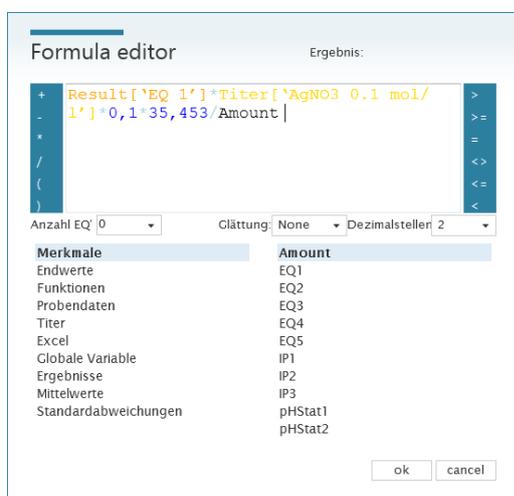
7. Berechnung des Ergebnisses

Die Berechnung der Chloridkonzentration erfolgt ebenfalls über einen Berechnungsbaustein.

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

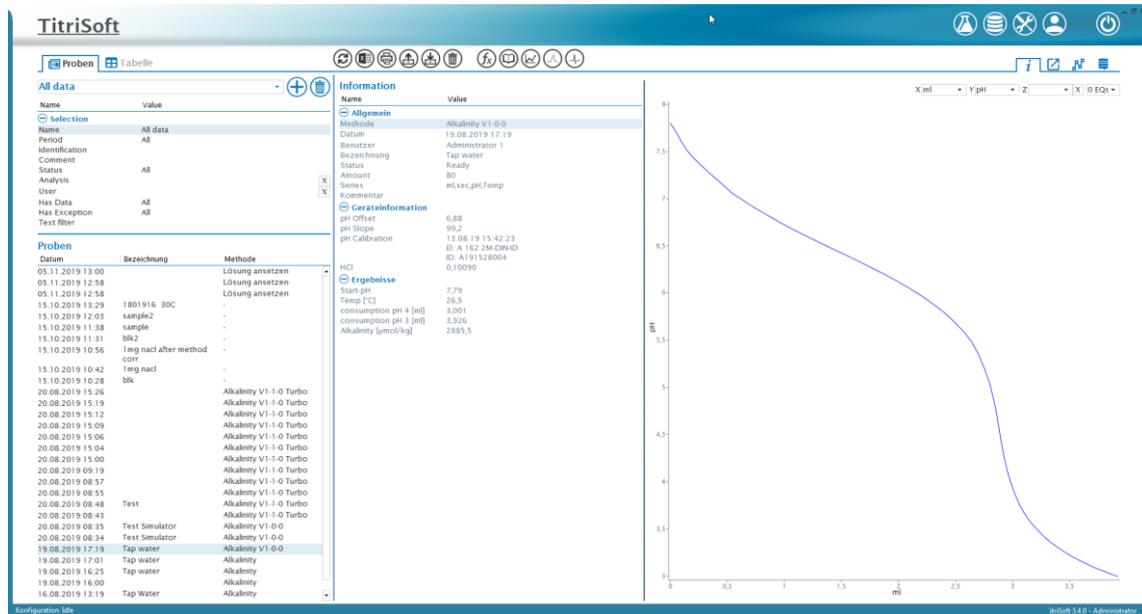
Name	Value
Berechnung	
Typ	Result
Ergebnis	Chloride [%] ...
Dezimalstellen	2 ...
Glättung	None
Maximum EQ's	-
Formel	Result['EQ 1']*Titer['AgNO3 0.1 mol/l']*0,1*35,453/Amount ...
Marker	None
x-Fenster	
x-Fenster verwenden	<input type="checkbox"/>
y-Fenster	
y-Fenster verwenden	<input type="checkbox"/>

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 AgNO₃-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.



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.

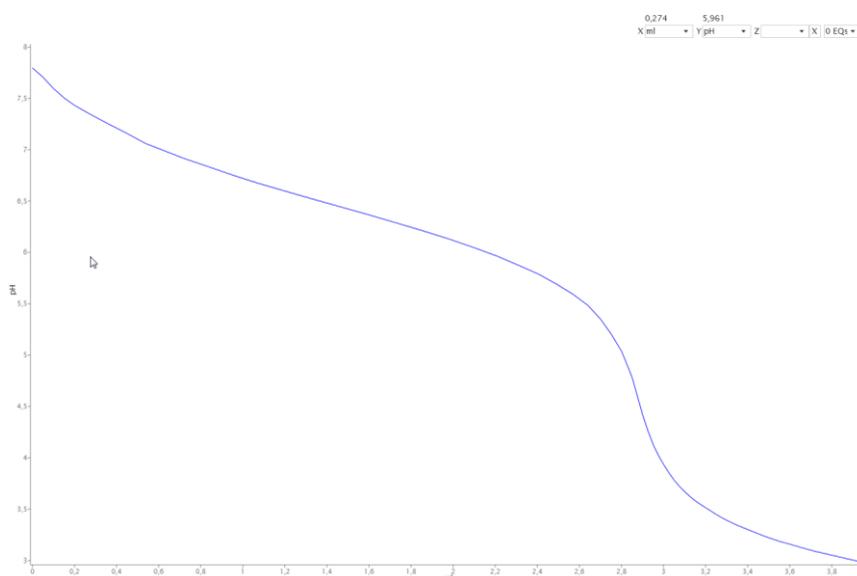
5.1 Selektionsbereich

	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 (z.B. Ready oder Aborted).
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 aufweisen oder alle Ergebnisse.
Text filter	Filtert nach weiteren Textkriterien, wie z.B. Proben text-Variablen.

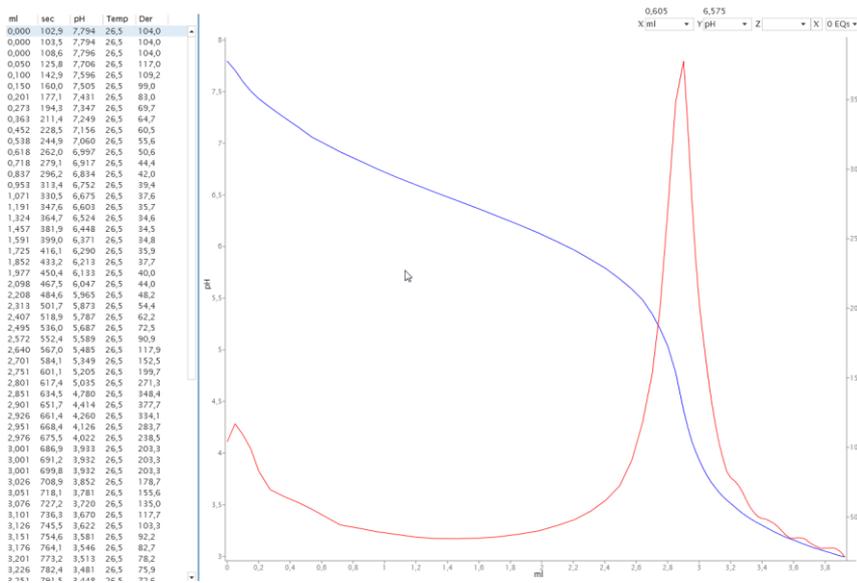
5.2.2 Ansichtsübersicht

	Anzeige der Probeninformationen incl. aller verknüpfter Metadaten wie Anwender, verwendete Methode und verwendete Instrumente.
	Anzeige der Titrationskurve. Siehe auch Kapitel 5.2.2.1 Titrationskurve und Titrationsdaten .
	Anzeige der Titrationsdaten. Siehe auch Kapitel 5.2.2.1 Titrationskurve und Titrationsdaten .
	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

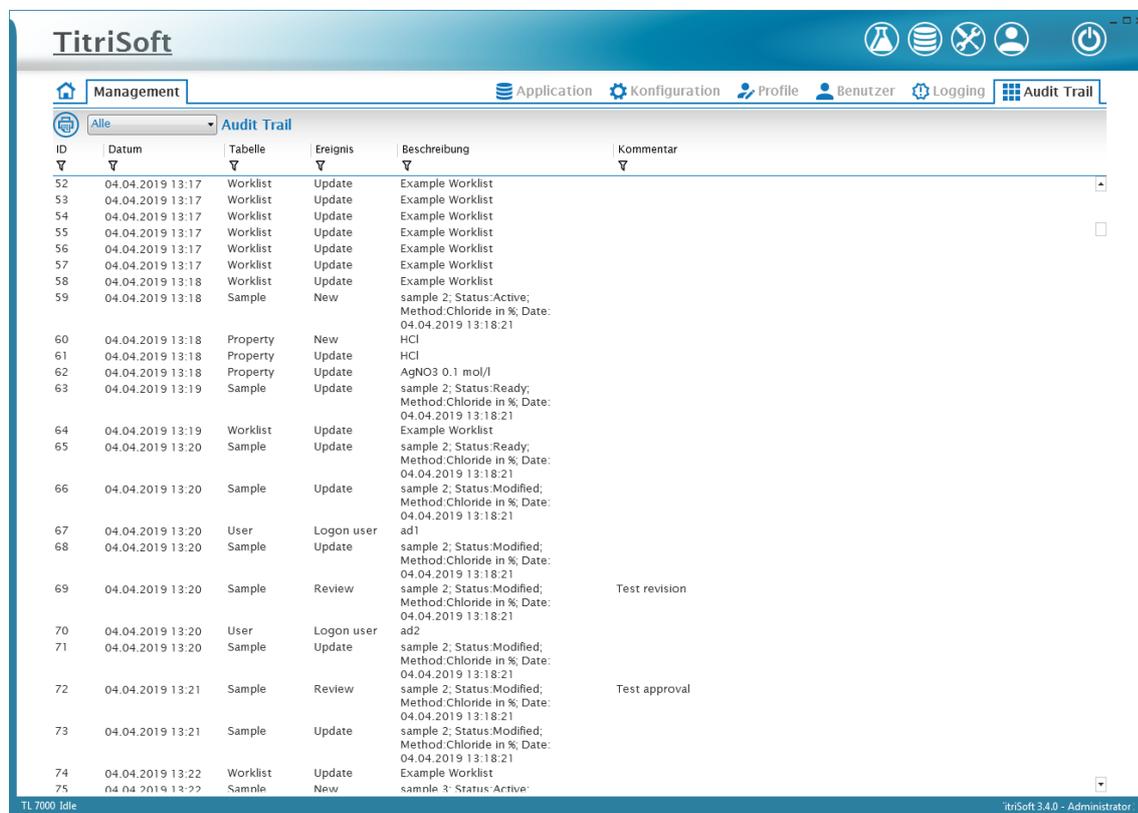
	Aktualisieren der Ansicht bei laufender Arbeitsliste.
	Export der Probenliste nach Excel.
	Export der Probenliste als .csv-Datei.
	Drucken der Probenliste. Es stehen verschiedene Darstellungsoptionen zur Verfügung (List Report und Single Curve).
	Im- und Exportieren von Probenergebnissen.
	Löschen von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

6 Pharma-Version

Eine separat erhältliche Pharma-Version der TitrSoft 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 TitrSoft-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.



ID	Datum	Tabelle	Ereignis	Beschreibung	Kommentar
52	04.04.2019 13:17	Worklist	Update	Example Worklist	
53	04.04.2019 13:17	Worklist	Update	Example Worklist	
54	04.04.2019 13:17	Worklist	Update	Example Worklist	
55	04.04.2019 13:17	Worklist	Update	Example Worklist	
56	04.04.2019 13:17	Worklist	Update	Example Worklist	
57	04.04.2019 13:17	Worklist	Update	Example Worklist	
58	04.04.2019 13:18	Worklist	Update	Example Worklist	
59	04.04.2019 13:18	Sample	New	sample 2; Status:Active; Method:Chloride in %; Date: 04.04.2019 13:18:21	
60	04.04.2019 13:18	Property	New	HCl	
61	04.04.2019 13:18	Property	Update	HCl	
62	04.04.2019 13:18	Property	Update	AgNO3 0.1 mol/l	
63	04.04.2019 13:19	Sample	Update	sample 2; Status:Ready; Method:Chloride in %; Date: 04.04.2019 13:18:21	
64	04.04.2019 13:19	Worklist	Update	Example Worklist	
65	04.04.2019 13:20	Sample	Update	sample 2; Status:Ready; Method:Chloride in %; Date: 04.04.2019 13:18:21	
66	04.04.2019 13:20	Sample	Update	sample 2; Status:Modified; Method:Chloride in %; Date: 04.04.2019 13:18:21	
67	04.04.2019 13:20	User	Logon user	ad1	
68	04.04.2019 13:20	Sample	Update	sample 2; Status:Modified; Method:Chloride in %; Date: 04.04.2019 13:18:21	
69	04.04.2019 13:20	Sample	Review	sample 2; Status:Modified; Method:Chloride in %; Date: 04.04.2019 13:18:21	Test revision
70	04.04.2019 13:20	User	Logon user	ad2	
71	04.04.2019 13:20	Sample	Update	sample 2; Status:Modified; Method:Chloride in %; Date: 04.04.2019 13:18:21	
72	04.04.2019 13:21	Sample	Review	sample 2; Status:Modified; Method:Chloride in %; Date: 04.04.2019 13:18:21	Test approval
73	04.04.2019 13:21	Sample	Update	sample 2; Status:Modified; Method:Chloride in %; Date: 04.04.2019 13:18:21	
74	04.04.2019 13:22	Worklist	Update	Example Worklist	
75	04.04.2019 13:22	Sample	New	sample 3; Status:Active;	

Zusätzlich zu den automatischen Einträgen öffnet sich ein Kommentarfenster für bestimmte Änderungen wie z.B. Methoden Anpassungen. Der Kommentar wird zu den automatischen

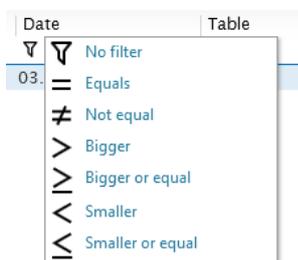
Einträgen dokumentiert. Zusätzlich kann jederzeit ein manueller Audit Trail-Kommentareintrag vorgenommen werden.



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.

SI Analytics

a **xylem** brand

Hersteller

(Manufacturer)

Xylem Analytics Germany GmbH

Dr.-Karl-Slevogt-Str. 1
82362 Weilheim
Germany

SI Analytics

Tel. +49(0)6131.66.5111

Fax. +49(0)6131.66.5001

E-Mail: si-analytics@xyleminc.com

www.XylemAnalytics.com

Service und Rücksendungen

(Service and Returns)

Xylem Analytics Germany Sales GmbH & Co.KG

SI Analytics

Gebäude G12, Tor Rheinallee 145

55122 Mainz

Deutschland, Germany

Tel. +49(0)6131.66.5042

Fax. +49(0)6131.66.5105

E-Mail: Service-Instruments.si-analytics@xyleminc.com

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

© 2020 Xylem, Inc. Version 200506 D