

TitriSoft 2.5



Inhalt

TitriSoft 2.5	1
Inhalt	2
Allgemeine Bemerkungen	3
PC-Anforderungen für TitriSoft 2.5	4
Installation.....	5
Allgemeines Vorgehen.....	7
Hardware Center	10
Methoden Center.....	13
Titrations Center	29
Datenbank.....	34
Anwendung von Funktionen des Formeleditors	37

Allgemeine Bemerkungen

TitriSoft 2.5 erlaubt die Titration mit folgenden Schott Titratoren, Büretten und Probenwechslern:

- TitroLine alpha plus
- TitroLine alpha
- TR 250
- T 110 plus
- T 200
- T 110
- T Universal
- T 97
- TW alpha plus
- TW alpha
- TW 280

Die Titrationen werden dabei von der Software gesteuert. Dabei werden Messeingänge der Titratoren und Büretten in den Methoden unabhängig voneinander verwendet. Damit sind für eine Titration Messeingänge eines Titrators definierbar, während das Titrier-Reagenz aus einer anderen Bürette dosiert wird

Die Hardware wird in einer Reihe an einer seriellen Schnittstelle des PCs angeschlossen. Das Konzept heißt „Daisy Chain“. Dabei wird die serielle Schnittstelle des PCs mit der RS-Schnittstelle 1 des ersten Gerätes (Titrator, Bürette oder Probenwechsler) verbunden, die RS-Schnittstelle 2 des ersten Gerätes mit der RS-Schnittstelle 1 des zweiten Gerätes. Jedes Gerät benötigt eine andere Adresse. Da bis zu 16 Adressen zur Verfügung stehen, können bis zu 16 Geräte angeschlossen werden.

Achtung. TitroLine alpha muss das letzte Gerät in einer solchen Reihe sein!

Eine solche Reihe von Geräten wird „Konfiguration“ genannt!

Die Kabel können mit ihren Bezeichnungen aus den Gebrauchsanleitungen oder auch der Preisliste entnommen werden.

PC-Anforderungen für TitriSoft 2.5

TitriSoft 2.5 erfordert:

- 64 MB RAM
- 600 MHz Processor
- 10 GB Festplatte
- WIN 98, WIN NT 4.0 Service pack > 5.0, WIN 2000, WIN XP
- MS Internet Explorer 6.0 oder neuer oder Installation der MS Data Access Software (Der Treiber steht im TitriSoft Verzeichnis zur Verfügung)

Wenn andere Programme parallel verwendet werden, wie z.B. MS EXCEL ist mehr Speicher erforderlich. Wir empfehlen 128 MB RAM.

Installation

Um die Software einsetzen zu können sind folgende Schritte erforderlich:

- Die Hardware an den PC anschließen.
- Die Software installieren.
- Die Methoden und Arbeitslisten konfigurieren.

Der Anschluss der Hardware wurde schon kurz im ersten Teil beschrieben. Die Installation der Software erfolgt analog der Installation auch anderer Software auf einem PC.

Nach Start des WINDOWS EXPLORERS wird die Installation durch Doppelklick der linken Maustaste auf die Datei "setup.exe" auf der Installations CD gestartet. Danach führt die Installationroutine durch verschiedene Fenster, die für eine erfolgreiche Installation bestätigt werden müssen.

Die verschiedenen Bildschirme sind:

- Lizenz Vereinbarung
- Letzte Informationen zu Anforderungen oder andere Hinweise
- Anwender Name und Firmen Name
- Installationsverzeichnis und Festplatte

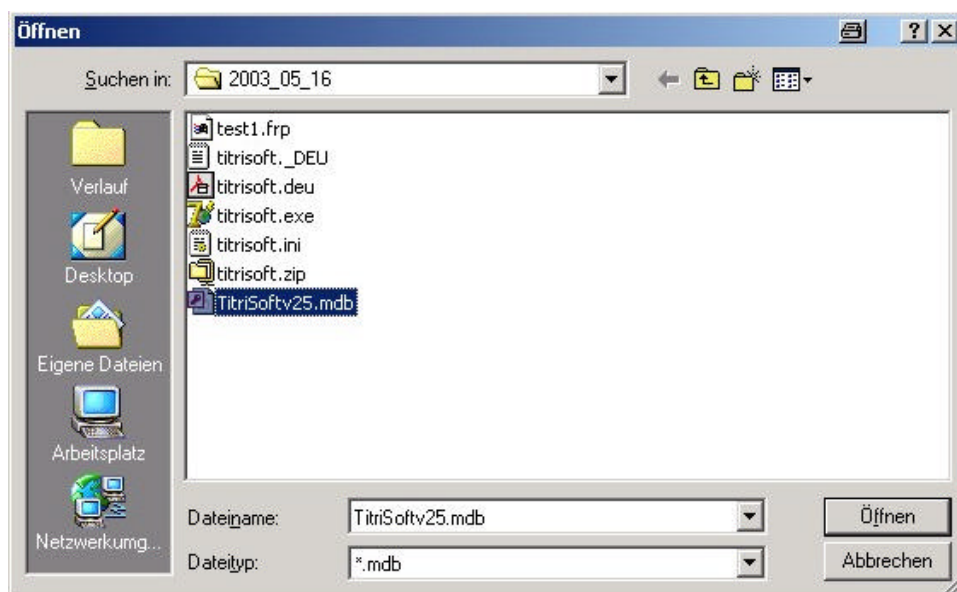
Wir empfehlen, die Informationen sorgfältig zu lesen und mit allen Einstellungen zu bestätigen. Danach beginnt die Installation automatisch in das festgelegte Verzeichnis:

"c:\Programme\Schott Geraete GmbHTitriSoft 2.5"

Nach dem Setup kann die Setup Routine verlassen werden. Ein Neustart der Software ist nicht erforderlich.

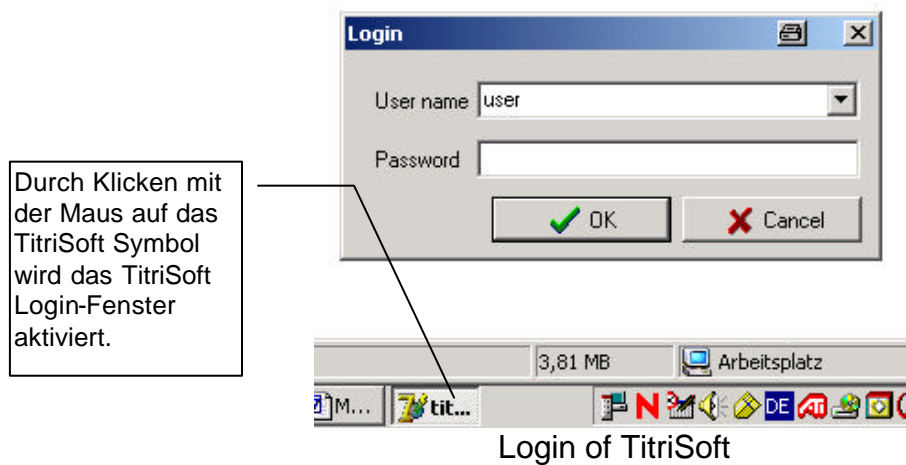
TitriSoft kann jetzt unter "START", "PROGRAMME", "TitriSoft 2.5" gestartet werden.

Beim ersten Start muss das Verzeichnis für die TitriSoft Datenbank ausgewählt werden. Der Ort der Datenbank kann frei gewählt werden, kann also auch auf dem Server liegen.



Auswahl des Datenbank-Verzeichnisses

Es muss die Datei: "TitriSoftv25.mdb" ausgewählt werden. Nach dieser Auswahl erscheint das Login-Fenster von TitriSoft. Gegebenenfalls muss es aus der Task-Leiste mit der Maus aktiviert werden:



Für den ersten Gebrauch sind einige Anwendernamen mit Ihrem Passwort vorgegeben:

<i>Name</i>	<i>Passwort</i>	<i>Level</i>
op	op	Operator, Anwender (Kann Titrationscenter starten)
user	user	User Fachanwender (Erstellt zusätzlich Konfigurationen, Methoden und Arbeitslisten)
ad	ad	Administrator (Kann zusätzlich Konfigurationen oder Methoden löschen)

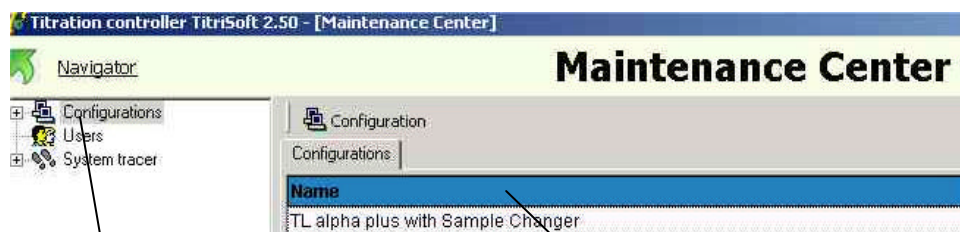
Allgemeines Vorgehen

Das Hauptmenü der Software ist der "**Navigator**". Der "Navigator" enthält die Center von TitriSoft:

- **Titration Center (Titration Center)**
- **Datenbank (Revision Center)**
- **Methoden Center (Analysis Center)**
- **Hardware Center (Maintenance Center)**



Die allgemeine Bedienung der Software folgt der des WINDOWS "Explorer", wie auf der linken Seite der Abbildung zu sehen ist. Die Inhalte werden dann auf der rechten Seite als Details angezeigt.:



Der Explorer Teil des Fensters. Die Details der markierten Zeile werden auf der rechten Seite angezeigt.

Das Hauptfenster. Hier werden die Namen der einzelnen Konfigurationen angezeigt

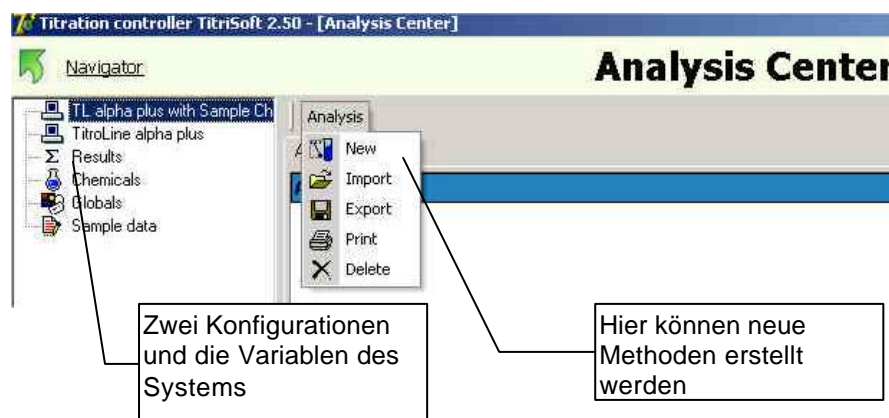
Der erste Schritt ist die Erstellung einer Hardwarekonfiguration im “**Hardware Center**”. In einer solchen Konfiguration werden die Titrationseinheiten (Titratoren, Bürette,..) definiert und auf Knopfdruck automatisch gescannt. In diesem Center werden zusätzlich Anwender definiert und die Log-Dateien können eingestellt werden.

In der Software können drei verschiedene Anwenderebenen zugeordnet werden:

- Operator:* Kann Titrationen starten, Arbeitslisten konfigurieren, Ergebnisse drucken und dokumentieren
- User:* Kann alle Funktionen der Software benutzen außer Löschen von Konfigurationen, Arbeitslisten, Methoden oder Titrationsergebnissen.
- Administrator:* Hat die Rechte eines “Users” und kann zusätzlich Löschen.

Nachdem die Hardware einer Konfiguration eingescannt wurde, ist es möglich Methoden zu erstellen. Dies erfolgt im “**Analysis Center**”. Im Analysis Center werden definiert:

- Methoden
- Reagentien
- Variablen



Die Methode wird aus sogenannten Methodenelementen erstellt. Die beiden wichtigsten Elemente sind Titrationsbausteine und Berechnungen. Ein Titrationsbaustein beinhaltet alle Titrationsparameter, die eine Titration beeinflussen: Endekriterien, Titrationsgeschwindigkeit, Messeinheiten, Volumenkontrolle des Titriermittels und die Auswahl des Titrators oder der Bürette. In der Berechnung können sowohl alle Äquivalenzpunkte und Endpunkte als auch alle variablen des Systems zur Ergebnisberechnung verwendet werden.

Der nächste Schritt ist die Erstellung einer Arbeitsliste. Die Arbeitsliste wird im “**Titration Center**” erstellt und beinhaltet alle Informationen, wie die Probe behandelt werden soll und wie das Ergebnis dokumentiert werden soll. Es ist sowohl eine Einzeltitration einstellbar als auch die Bearbeitung mit dem Probenwechsler. Die Dokumentation kann als Ergebnistabelle, Liste mit kleinen Kurven oder auch als Einzeltitration mit großer Grafik erstellt werden.

Titration Center

Position	Status	Analysis	Titrant	Amount	User	EQ in ml	Mittelwert EQ
1	Ready	Example	Test 2	0	SysOp	11.248	

Auswahl der Konfiguration

Eine Probenliste fertig zum Start

Nach einer Titration werden die Titration und die Ergebnisse in der Datenbank gespeichert. Der Zugriff zur Datenbank erfolgt über das "**Revision Center**". Die Datenselektion kann über Methodennamen, Probenamen oder Datum erfolgen.

Dabei ist ein Löschen von Proben in der Datenbank für die Anwender nicht möglich. Die Grafik in der Datenbank zeigt auf Wunsch einen oder mehrere Äquivalenzpunkt(e) und ermöglicht die Anzeige der ersten Ableitung und auch Zoomfunktionen.

Revision Center

Ident	Analysis	User	Date
Test 1	Example	SysOp	26.03.200
Test 2	Example		26.03.200

Auswahl einer Probe

Detailinformationen, wie z.B. Ergebnisse

Titration curve with equivalence point

Hardware Center

Das Hardware Center ist das erste Center beim Einsatz von TitriSoft. Die einzelnen Schritte bei der Konfiguration sind:

- Hardware anschließen
- Geräte alle einschalten
- Eine neue Konfiguration erstellen
- Der verwendete Namen der Konfiguration sollte widerspiegeln, welche Geräte eingesetzt werden
- Auswahl des verwendeten COM-Ports
- Entscheidung, ob eine Waage angeschlossen ist
- Scan der Hardware. Jedes angeschlossene Gerät meldet sich mit seiner Identität.

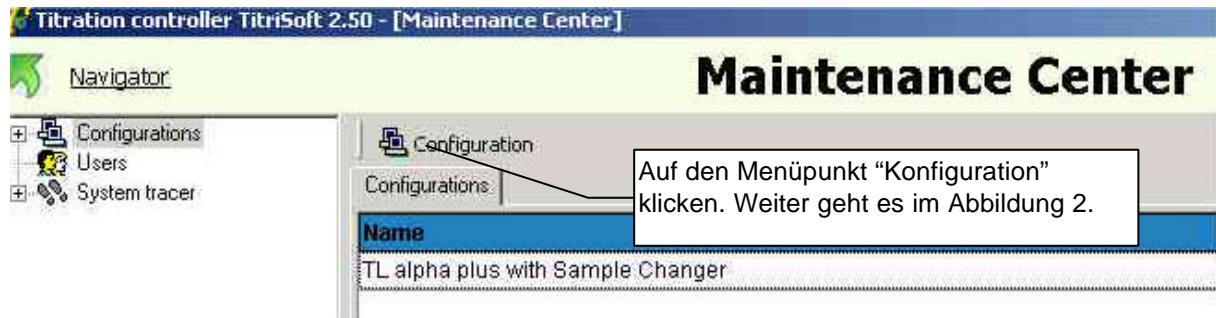


Abbildung 01: Beispiel einer Konfiguration "TL alpha plus mit Probenwechsler"

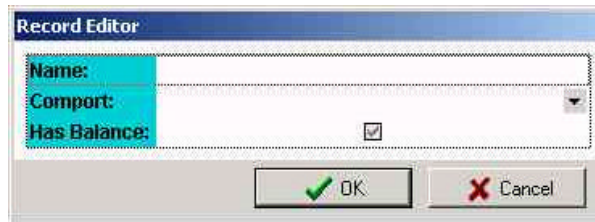


Abbildung 02: Hier kann der Namen der Konfiguration eingegeben werden. Die möglichen COM-Ports werden neben dem Namen aufgelistet. Wenn eine Waage angeschlossen ist, wird in der letzten Spalte ein Kreuz gemacht.

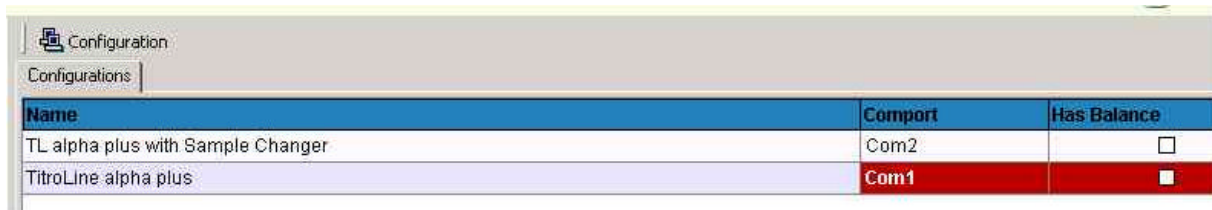
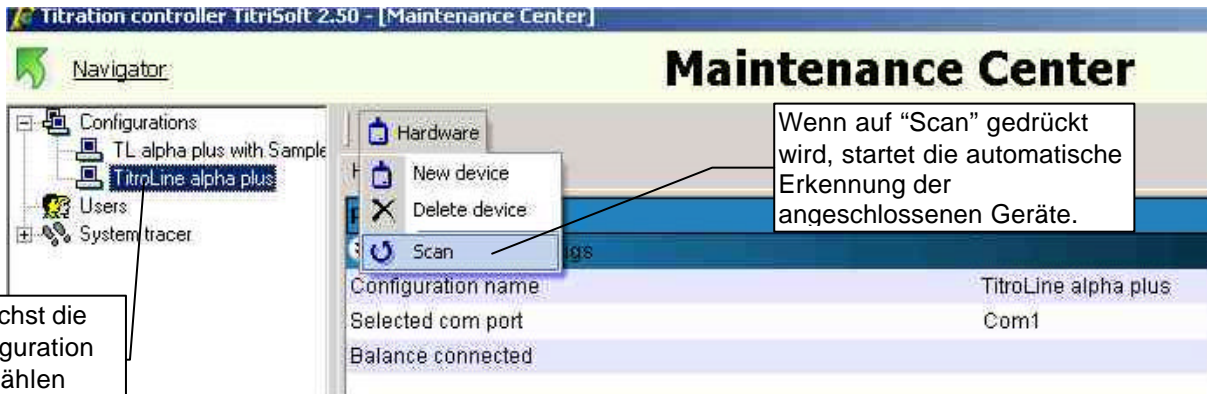


Abbildung 03: Eine Liste mit zwei Konfigurationen. Es ist wichtig, dass jede Konfiguration eine andere Schnittstelle hat.



Abbildung 04: Der Überblick zeigt zwei Konfigurationen. Die zweite Konfiguration ist markiert und ihre Details werden auf der rechten Seite im Detail dargestellt.



Zunächst die Konfiguration auswählen

Abbildung 05: Den Menüpunkt "Hardware" auswählen und mit "Scan" die automatische Hardwareerkennung zu starten.

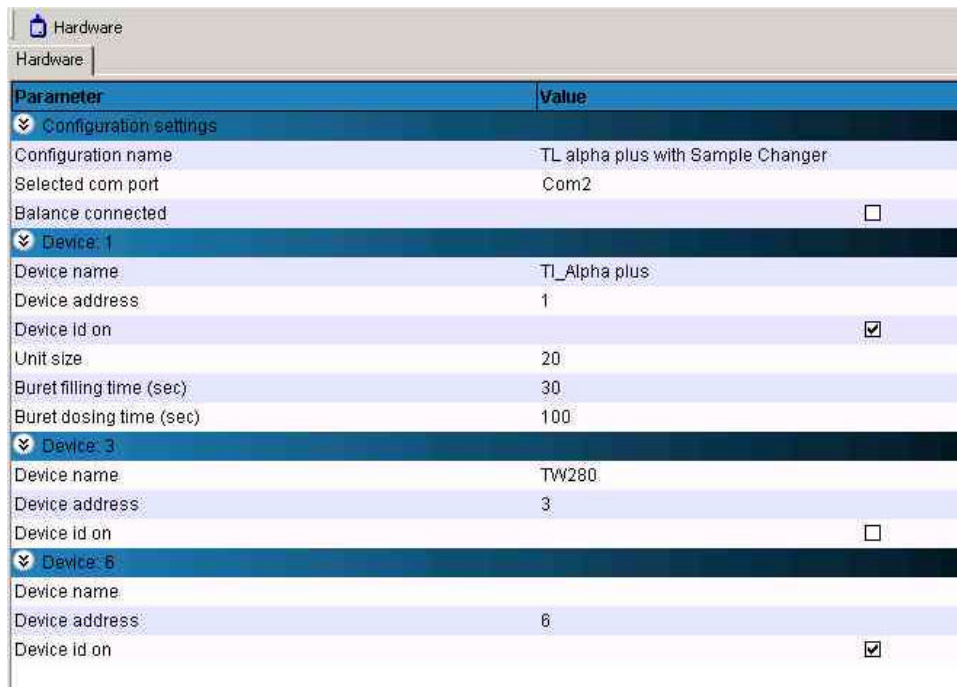
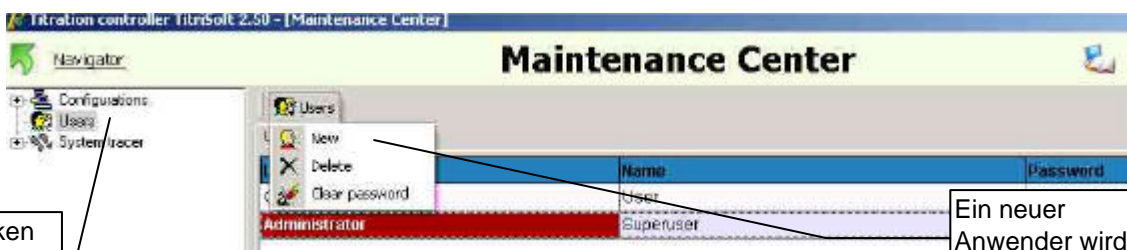


Abbildung 06: Die aufgelisteten Geräte nach einem Hardware-Check. In diesem Beispiel wurden erkannt: TL alpha plus und Probenwechsler TW alpha plus/TW 280

Es ist wichtig, dass jedes angeschlossenen Geräte auch erkannt wird, wie in Abbildung 06 gezeigt ist, da ein nicht angezeigtes Gerät in einer Methode nicht verwendet werden kann.

Es ist nicht möglich, in einer Methode die Geräte von zwei unterschiedlichen Konfigurationen zu verwenden.

Jetzt sind die angeschlossenen Geräte bereit, um in einer Methode verwendet zu werden. Der nächste Schritt ist die Installation der Anwender mit ihren Zugangsrechten.



Auf der linken Seite werden die "Anwender" markiert

Abbildung 07: Neue Anwender mit unterschiedlichen Zugangsrechten

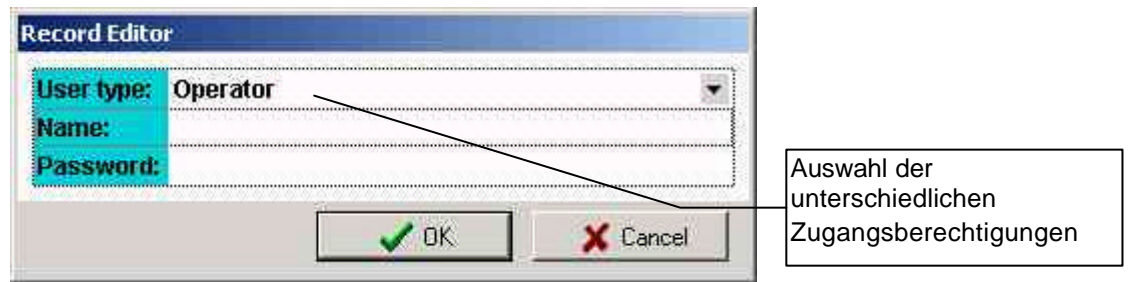


Abbildung 8: Eingabe eines Neuen Anwenders

In TitriSoft könne drei verschiedene Anwenderzugangsrechte vergeben werden:

- Operator:* Kann Arbeitlisten organisieren, Ergebnisse mit Kurven dokumentieren
- User:* Kann alle Funktionen der Software nutzen, außer Löschen
- Administrator:* Hat zusätzlich die Möglichkeit zu löschen

Es ist unbedingt erforderlich, den Namen und das Passwort für einen neuen Anwender einzugeben, da sonst ein Zugang zu TitriSoft nicht möglich ist.

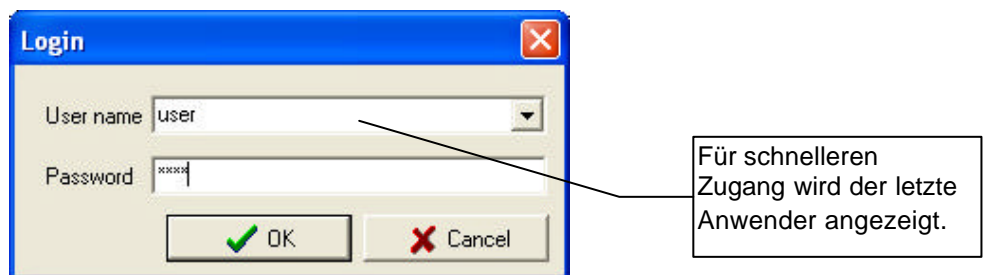


Abbildung 09: Program Access with name and password

Nach der Konfiguration der Anwender werden die Log-Optionen eingestellt.

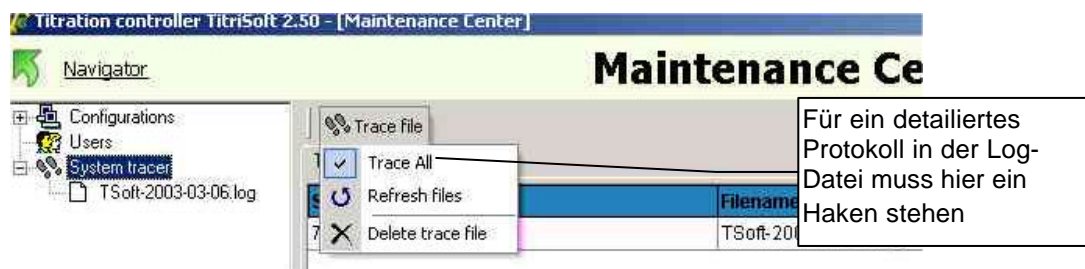


Abbildung 09: Switching on or off the log files

Die Voreinstellung für die Log-Dateien sind: Allgemeine Informationen zum Start und Beenden der Software und von Arbeitslisten.

Detailliertere Informationen erhält man, wenn "Alles Tracen" eingestellt ist. Dann werden auch alle seriellen Kommandos zwischen PC und Geräten in Log-Dateien mitgeschrieben. Die Log-Dateien lassen hier auswählen und auf dem Bildschirm anzeigen.

Wenn ein Anwender die entsprechende Berechtigung hat, kann er sich Log-Dateien ansehen oder auch löschen.

Methoden Center

Im Methoden Center (Analysis Center) werden die Methoden mit ihren Abläufen und Variablen definiert. Im Einzelnen werden eingestellt und definiert:

- Methoden
- Reagentien
- Ergebnisse
- Globale Variablen
- Proben Variablen

Reagentien haben folgende Eigenschaften:

- Name
- Titer
- Datum der letzten Titerstellung
- Erlaubter Minimal-Wert
- Erlaubter Maximal-Wert

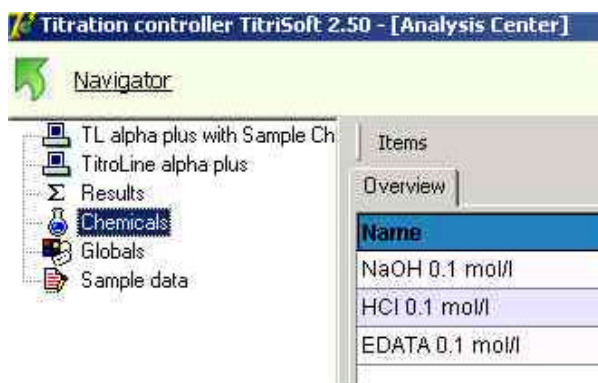


Abbildung 10: Definition der Reagentien

Ergebnisse haben die Eigenschaften:

- Name
- Erlaubter Minimal-Wert
- Erlaubter Maximal-Wert

Globale- und Proben-Variablen haben die Eigenschaften:

- Name
- Wert
- Erlaubter Minimal-Wert
- Erlaubter Maximal-Wert

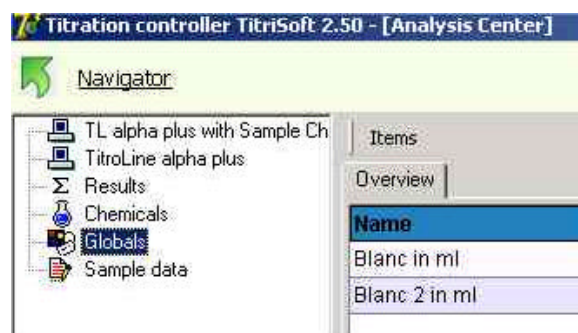


Abbildung 11: Globale Variable, Beispiele

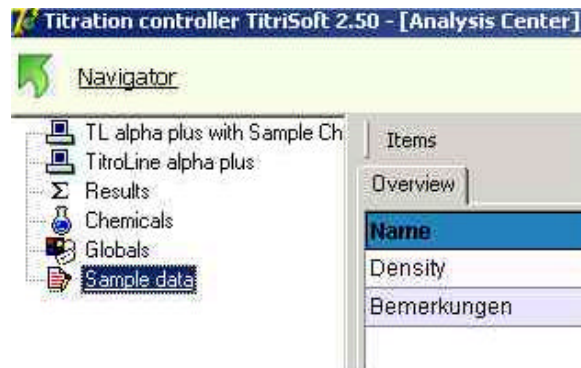


Abbildung 12: Beispiel Probenvariable

Der Unterschied zwischen Globalen und Probenvariablen liegt im Zweck. Globale Variable dienen dem Transfer von Werten zwischen den Methoden. Ein Beispiel dafür ist der Blindwert. Dieser ist ein Ergebnis einer ersten Methode und wird bei einer anderen Methode abgezogen. Proben-Variable werden in einer Arbeitsliste verwendet, damit für die Berechnung notwendige Werte für die Berechnung eingegeben werden können. ein Beispiel ist die Dichte oder Verdünnungsfaktor.

Alle Variablen können auch während der Methodenerstellung erzeugt und mit Werten versehen werden.

Die wichtigste Funktion des Methoden Centers ist jedoch die Erstellung neuer Methoden.. TitriSoft unterstützt leistungsfähige Bausteine zum Ablauf einer Titration oder anderer Methoden, in denen Dosiereinheiten oder Waagen eingesetzt werden.

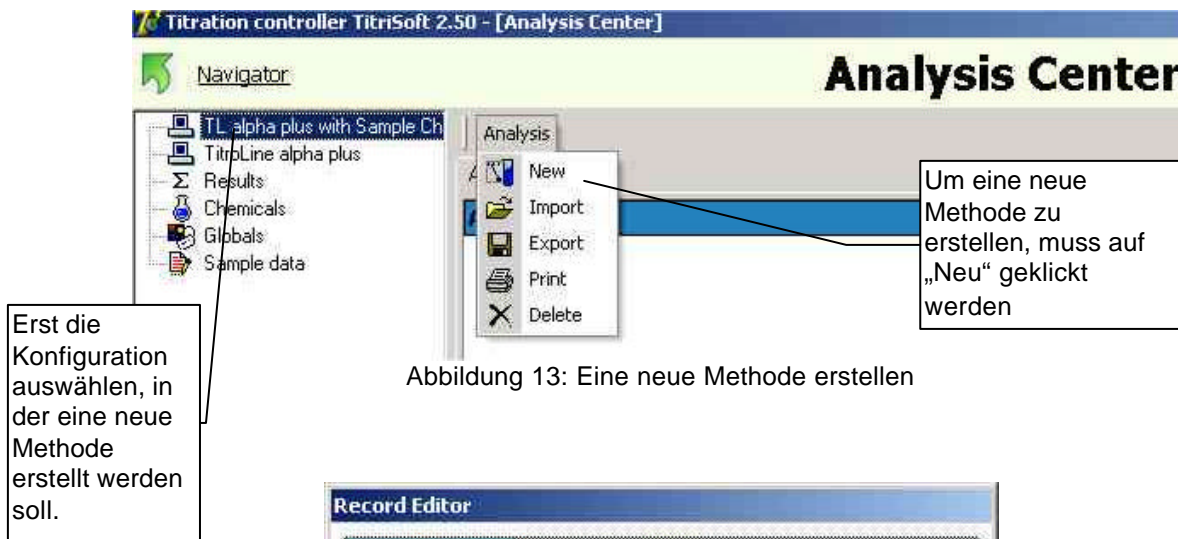


Abbildung 13: Eine neue Methode erstellen



Abbildung 14: Der Name einer neuen Methode

Der nächste Schritt ist die Vergabe eines eindeutigen Namens für die neue Methode. Er sollte den Zweck der Methode wiedergeben. Er kann Leerzeichen, Groß- und Kleinbuchstaben enthalten. Mit „Ok“ wird bestätigt.

Um eine Methode zu editieren, wird auf der linken Explorerseite mit der Maus markiert.

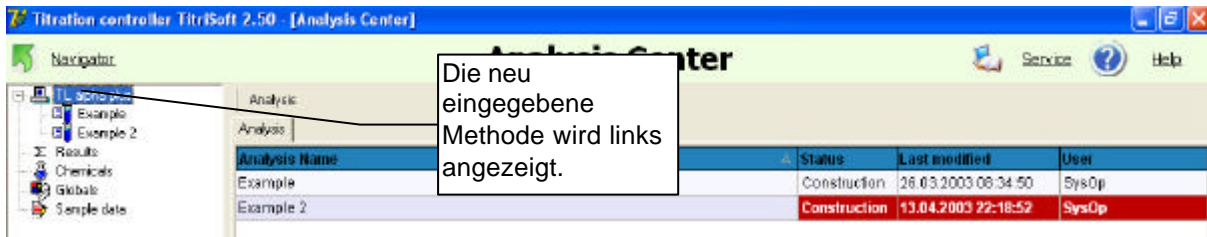


Abbildung 15: Auswahl zur Erstellung einer neuen Methode

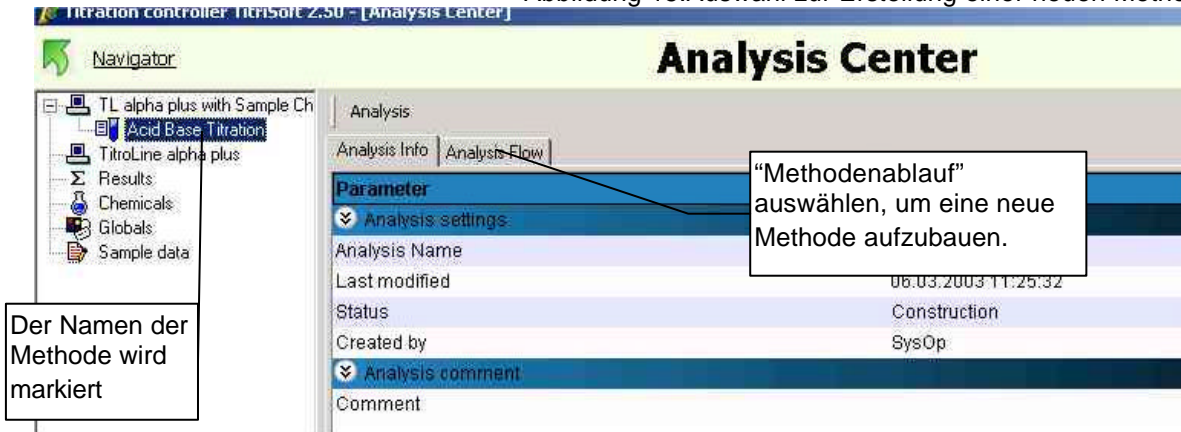


Abbildung 16: Allgemeine Informationen zur Methode, bevor der Ablauf definiert ist.

Eine Methode wird aus sogenannten “Bausteinen” zusammengesetzt. Diese Bausteine können aus dem Menü im „Methodenablauf“ ausgewählt werden. Es gibt drei Menüpunkte:

- Edit (Funktionen wie, editieren, löschen, einfügen)
- Baustein (Funktionen wie Titrationsbaustein, Berechnung, Dosieren, Messwert, If-Anweisung)
- Utils (Funktionen wie Wartezeit, Rührer ein oder aus, Kurve zurücksetzen)

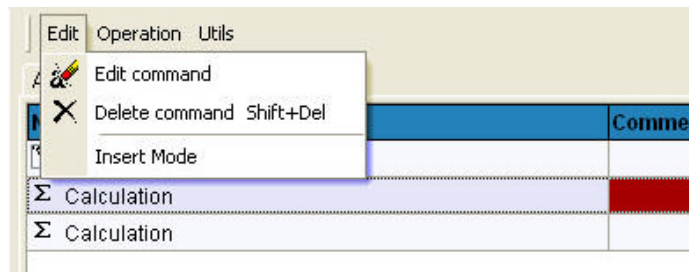


Abbildung 17: Das Edit Menü im Methodenablauf

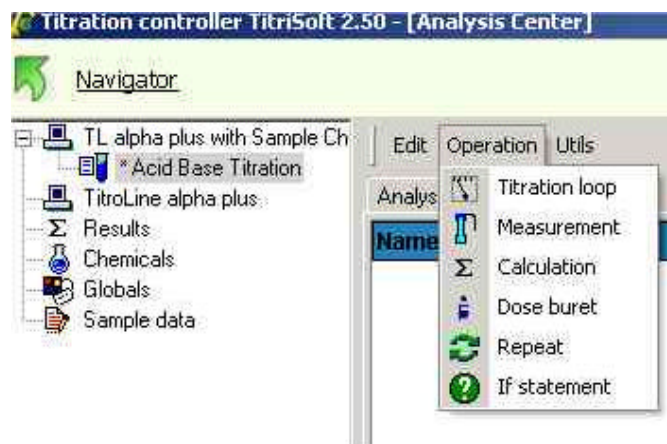


Abbildung 18: Das Baustein Menü im Methodenablauf

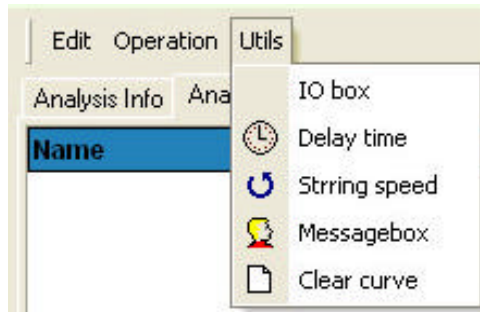


Abbildung 19: Das Utils Menü für Hildfunktionen im Methodenablauf

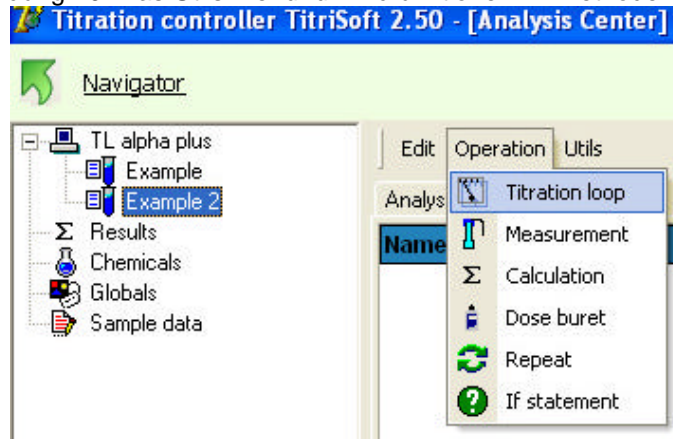


Abbildung 20: Der erste Schritt im Methodenablauf ist ein Titrationsbaustein

Wenn man den Überblick über die Titrationsmethode auf der rechten Seite des Bildschirms sieht, enthält dieser noch keine Informationen über Reagenzien, Büretten, Titrationstyp oder Berechnungen. Dies wird im Methodenablauf konfiguriert. Der erste Schritt ist ist der Titrationsbaustein. Dieser enthält die Titrationsparameter. Diese sind:

- Titrator (Adresse und Typ, Messeingang)
- Reagenz (Aus Liste auswählen oder Eintippen)
- Bürette (Adresse und Typ)
- Typ der Ttitration (Dynamisch, linear,...)
- Messeinheit (pH, mV,...)
- Ende Kriterien (EQ, ml, pH,...)
- Titrationsgeschwindigkeit (schnell, genau, individuell)
- Einstellung der Schrittweite (Starker Sprung, flach, individuell)

Jeder Parameter kann aus einer Liste ausgewählt werden, die erscheint, wenn das leere Feld mit der Maus markiert wird..

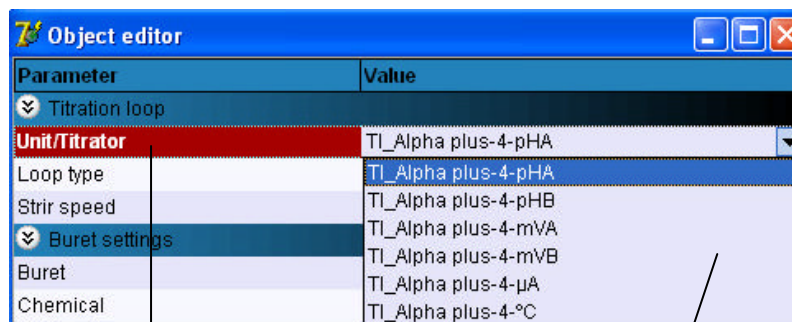


Abbildung 21: Auswahl aus einer Liste, nachdem das Feld markiert wurde

Markierte Zeile, nachdem die Zeile angeklickt wurde

Alle unterschiedlichen Möglichkeiten einen Sensor an einen TL alpha plus anzuschließen: pH A oder B, mV A oder B, µA und Temperatur.

- Kleinstes Dosiervolumen für einen Titrierschritt in ml
- Größtes Dosiervolumen für einen Titrierschritt in ml
- Curve Shape: Dieser Parameter kann von der Applikation von Schott Geräte für eine bestimmte Applikation erfragt werden.
- Curve shift Dieser Parameter kann von der Applikation von Schott Geräte für eine bestimmte Applikation erfragt werden.
- EQ Empfindlichkeit in mV/ml or pH/ml als endekriterium einer Titration. Der Wert kann aus der ersten Ableitung einer Titration (Maximum) in der Datenbank erhalten werden.

Die Parameter der **“End Punkt Titration”** unterscheiden sich. Der Endpunkt wird eine definierte Zeit lang überprüft. Während dieser Zeit fügt der Titrator Titrierreagenz zu, sobald der Messwert den Endpunkt unterschreitet. Es wird dynamisch bis zu einem Wert titriert, der um einen delta Messwert vom Endpunktes entfernt liegt. Danach wird mit delta ml Werten bis zum Endpunkt weitertitriert. Diese delta ml Werte definieren die Genauigkeit, mit der ein Endpunkt antitriert wird.

Parameter	Value
Titration loop	
Unit/Titrator	TI_Alpha plus-1-pHA
Loop type	End point
Strir speed	6
Buret settings	
Buret	TI_Alpha plus-1
Chemical	NaOH 0.1 mol/l
Fill buret	Loop start & ready
Loop settings	
Use end value	<input checked="" type="checkbox"/>
End Value (Unit)	10,5
End Volume	20
End delay	10
Linear step	0,01
Delta value	0,2
Direction	Up
Titration speed	Custom
Custom drift speed settings	
Meas. interval (s)	1
dUnit/dt	2
Min. time (s)	2
Max. time (s)	15

Abbildung 24: Parameter für die Endpunkt-Titration

Die Einstellungen für die Endpunkt-Titration sind:

- Endpunkt in pH oder mV
- Endekriterium Volumen in ml (damit das Titrationsgefäß nicht überläuft)
- Endpunkt Abschaltzeit (in Sekunden, sobald der Endpunkt unterschritten ist, wird weitertitriert und die Abschaltzeit beginnt neu)
- Delta pH oder mV (ein Fenster, in dem linear titriert wird)
- Lineare Schrittweite in ml (die Schrittgröße in ml in der Nähe des Endpunktes)
- Die Titrationsrichtung
- Titrationsgeschwindigkeit (die Kriterien sind die gleichen, wie für die dynamische Titration)

Die **“Lineare Titration”** ist wie die dynamische Titration aufgebaut. Der Unterschied ist die Titration mit gleich großen Schritten.

Es gibt eine Reihe von Applikationen und Titrationen, die auch heute noch linear titriert werden: TAN, TBN und andere. Typisch ist die linear Titration bei flachen und unruhigen Kurven.

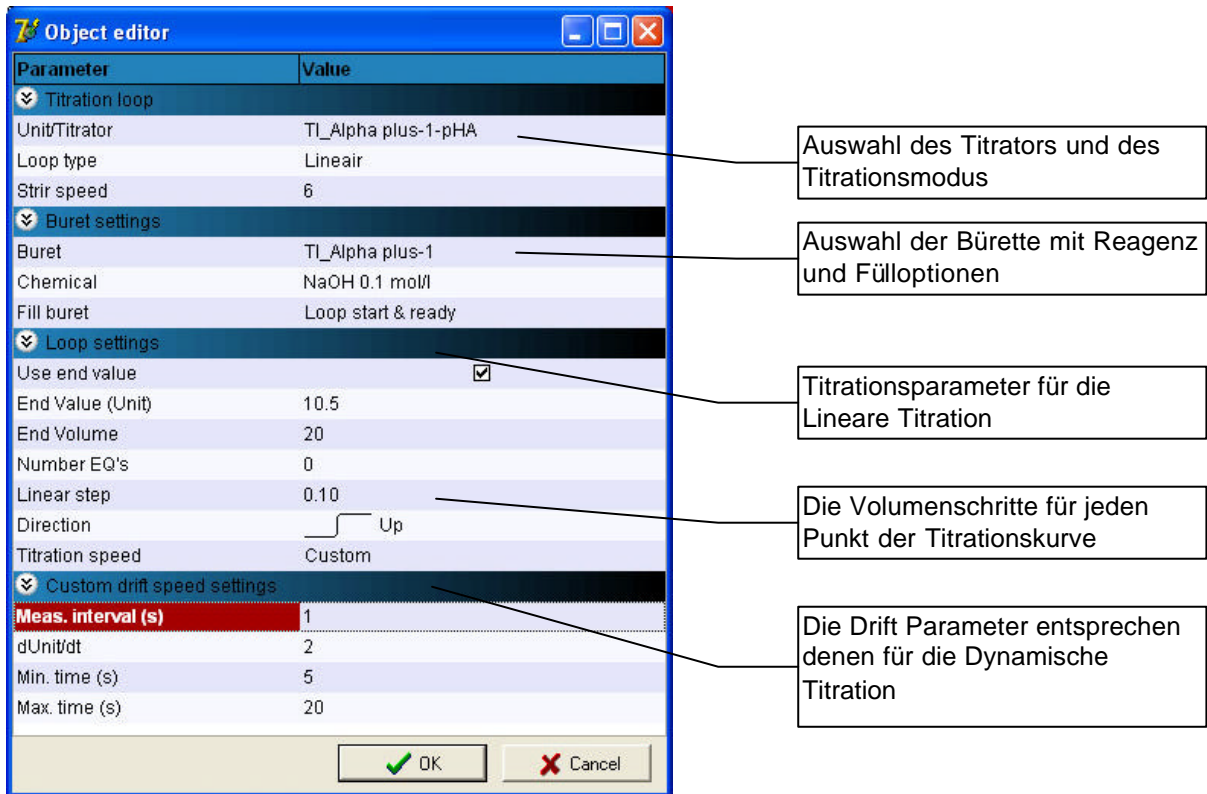


Abbildung 24: Parameter für eine Lineare Titration

Eine Titration kann auch andere Bausteine enthalten (Dosierungen, If-Anweisungen,...). für die meisten Anwendungen sind sie jedoch nicht erforderlich. Es folgt im nächsten Schritt die Berechnung. Ohne Berechnung können keine Ergebnisse dokumentiert werden. Die Berechnung wird nach der Titration eingefügt. Im folgenden werden noch die anderen Bausteine erläutert.

Die Titration ist eine Aufeinanderfolge von "Messungen" und Dosierschritten. Diese können auch einzeln eingesetzt werden.

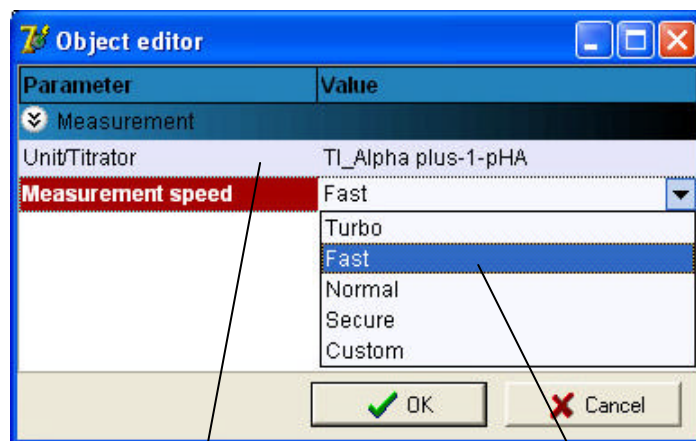


Abbildung 25: Messung

Auswahl des Titrators, an dem die Elektrode angeschlossen ist

Die Driftkontrolle der Messung. Entspricht der dynamischen Titration.

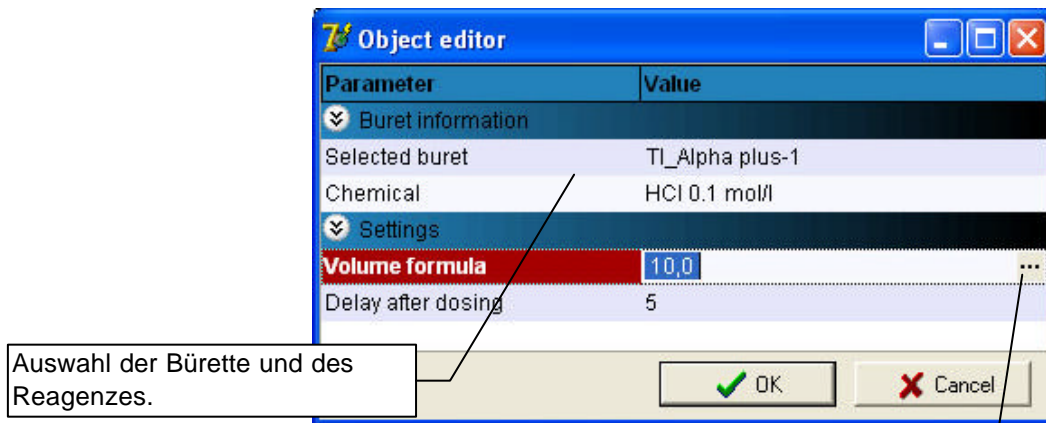


Abbildung 26: Dosierparameter

Die **„Dosierfunktion“** hat eine besondere Eigenschaft. Das Dosiervolumen ist keine Zahl, sondern eine Variable, die im Formeleditor als Formel eingegeben werden kann. Dazu wird die Zeile Dosierformel angeklickt und der Formeleditor gestartet indem auf die drei Punkte mit der Maus geklickt wird. Jetzt kann einfach ein Zahlenwert eingetragen werden oder auch eine komplexe Formel mit allen Variablen des Formeleditors erstellt werden. Es kann zum Beispiel die Einwaage oder auch Probenvariablen verwendet werden.

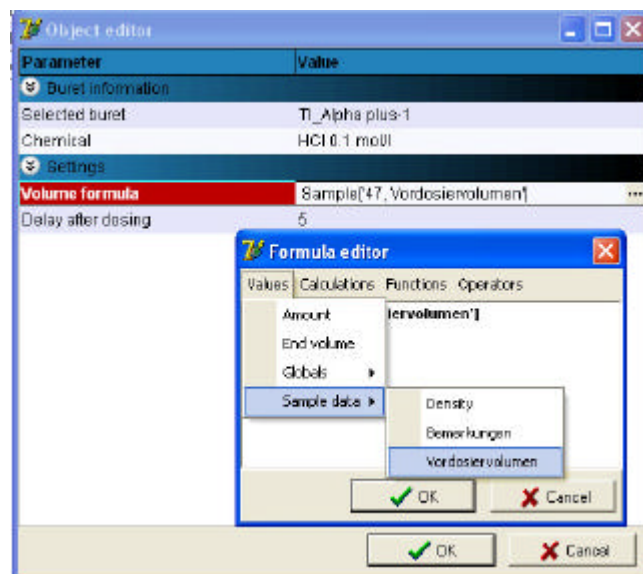


Abbildung 27: Im Formeleditor wird ein Dosiervolumen eingetragen.

Die Abbildung 27 zeigt ein Beispiel, bei dem ein variables Volumen dosiert werden soll. Im Methoden Center wird eine Probenvariable mit Namen „Vordosiervolumen“ definiert. Diese Variable kann jetzt an dieser Stelle im Formeleditor ausgewählt werden. Die selbe Variable kann auch in einer Arbeitsliste im Titrations Center für jede Probe verwendet und ein Zahlenwert eingetragen werden.

In den meisten Fällen wird allerdings der Formeleditor nur verwendet werden, um einen Zahlenwert einzutragen.

Eine Funktion für besondere Anwendungen sind die **„Repeat-“** und **„If-Anweisung“**.

Die Repeat-Anweisung ermöglicht in einer Schleife verschiedene Methoden-Elemente eine bestimmte Anzahl zu wiederholen. Dies kann zum Beispiel genutzt werden, um Dosierschritte mit Messwerten und Berechnungen kombiniert mehrmals ablaufen zu lassen.

Genauso wie das Dosiervolumen eine Variable ist, wird auch für die Anzahl der Wiederholungen im Formeleditor eine Variable eingesetzt werden oder auch ein Zahlenwert eingetragen werden.

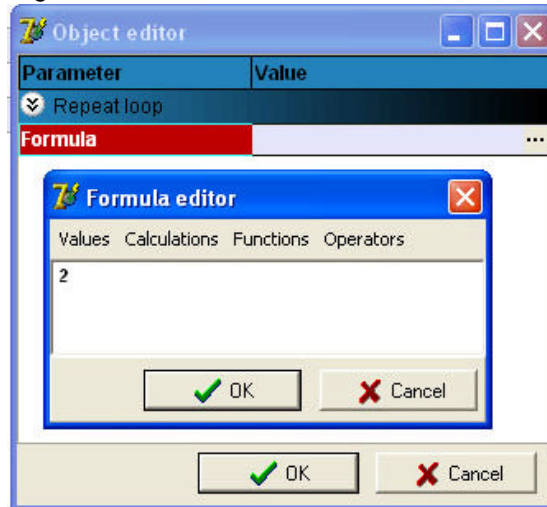


Abbildung 28: Repeat Anweisung

Die If-Anweisung ist ähnlich aufgebaut. Die Methode innerhalb der if-Anweisung wird gestartet, wenn das Kriterium wahr ist. Das Kriterium kann ein berechneter wert oder eine Variable sein. So wäre z.B. ein Messwert möglich. Als Beispiel können unterschiedliche Titrations mit unterschiedlichen Reagenzien starten in Abhängigkeit von einem Startmesswert. Im Else-Zweig der Anweisung kann dann die entsprechende Methode mit anderen Reagenzien starten.

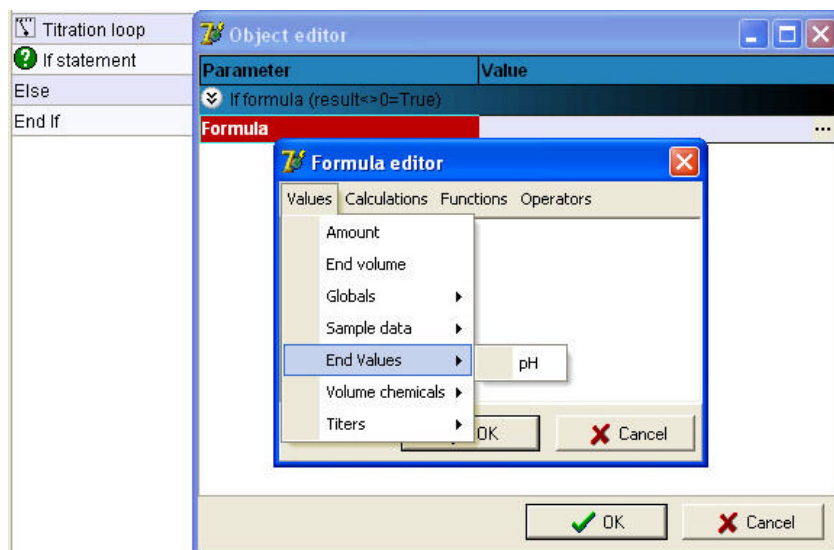


Abbildung 29: If-Anweisung

Abbildung 29 zeigt die If-Anweisung, bei der eine Titration bei einem bestimmten pH-Wert starten soll..

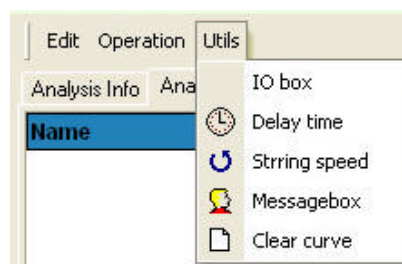


Abbildung 30: Hilfsfunktionen

Eine Reihe von Hilfsfunktionen ermöglichen Automatisierungen oder erleichtern die Anwendungen. Es stehen zur Verfügung:

- I/O Ports zu schalten
- Wartezeit
- Rührgeschwindigkeit
- Nachricht auf den Bildschirm
- Titrationskurve zurücksetzen

Die **“I/O Schalter”** werden hauptsächlich für Spülen oder ähnliche Aufgaben verwendet. Folgende Geräte verfügen über einen I/O-Port:

- T 200
- T 110
- TW alpha
- TW 280

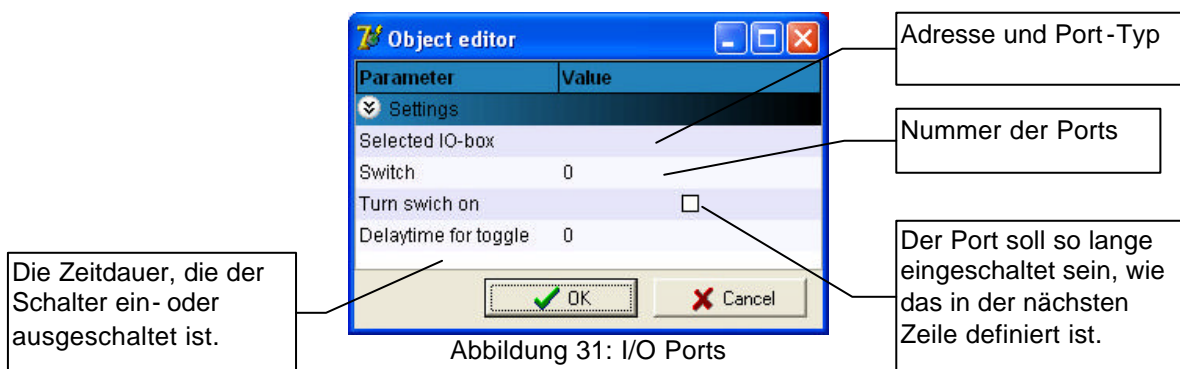
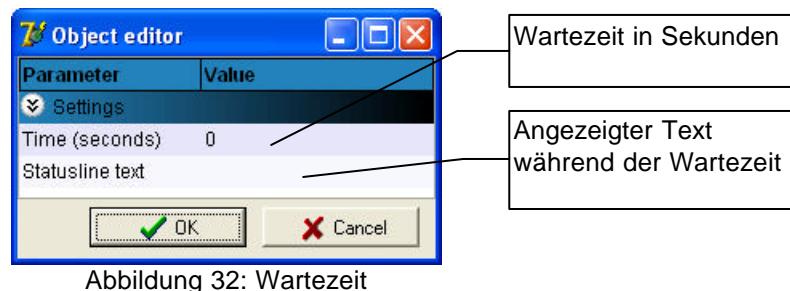


Abbildung 31 zeigt die Parameter zum Schalten eines I/O-Ports. Als Beispiel sollen die Parameter zum Spülen mit einer Pumpe am I/O Port des Probenwechslers genannt werden:

- Ausgewählter IO port: TW 280 Adresse 03
- Schalter: 0
- Schalter ein: ein
- Wartezeit Schalter ein: 5

Die **“Wartezeit”** kann für Rühr- oder Wartezeiten eingesetzt werden. Die Einstellungen sind in Abbildung 32 zu sehen.



Die **“Rührgeschwindigkeit”** wird verwendet um die Rührgeschwindigkeit während der Titration oder einer Messung festzulegen. So ist es möglich, den Rührer während einer Messung auszuschalten und für eine Titration mit höherer Geschwindigkeit laufen zu lassen.

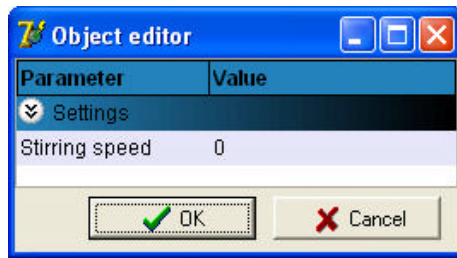


Abbildung 33: Rührgeschwindigkeit

Die Rührgeschwindigkeit kann in Stufen von 0 bis eingestellt werden. Am Probenwechsler muss darauf geachtet werden, dass die Rührgeschwindigkeit mit dem Poti an der rechten Seite auf die richtige Maximaldrehzahl eingestellt ist. Die Einstellung hängt von der Größe des Becherglases ab und von der Füllhöhe.

Die **“Bildschirmnachricht”** dient der Information des Anwenders während eines Titrationsablaufes. Die Nachricht bleibt auf dem Bildschirm, so lange bis sie vom Anwender quittiert wird. Ein Beispiel ist eine manuelle Zugabe eines Reagenzes während eines Titrationsablaufes. Der Anwender gibt ein Reagenz zu und drückt eine Taste, wenn er damit fertig ist

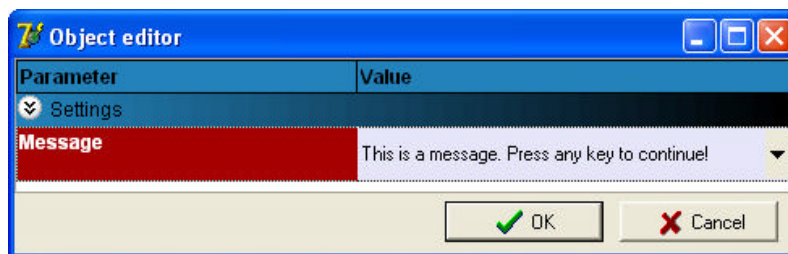


Abbildung 34: Bildschirmnachricht

Der **“Kurvenreset”** ist die letzte Hilfsfunktion. Er wird verwendet, um das Titrationsvolumen und die Titrationsgrafik zurückzusetzen. Als Voreinstellung werden alle dosierten und titrierten Volumina addiert und in einer Titrationskurve dargestellt. Dies ist bei einigen Anwendungen wichtig und dient der Übersicht. In vielen Applikationen wird jedoch vordosiert, dann ein Kurvenreset durchgeführt und anschließend die Titration mit einem Titrationsvolumen von 0 ml wieder begonnen.

Im Formeleditor sind alle dosierten und titrierten Volumina in Variablen gespeichert und stehen für Berechnungen zur Verfügung.

Für einige Anwendungen wurde der **“Formel Editor”** schon eingesetzt um Werte einzugeben (z.B. Dosiervolumina). Die Hauptfunktion ist jedoch die Berechnung der Titrationsergebnisse.

Die folgende Abbildung zeigt die Dokumentation eines Äquivalenzpunktes und die Beispielberechnung eines Chloridgehaltes einer Probe in%.

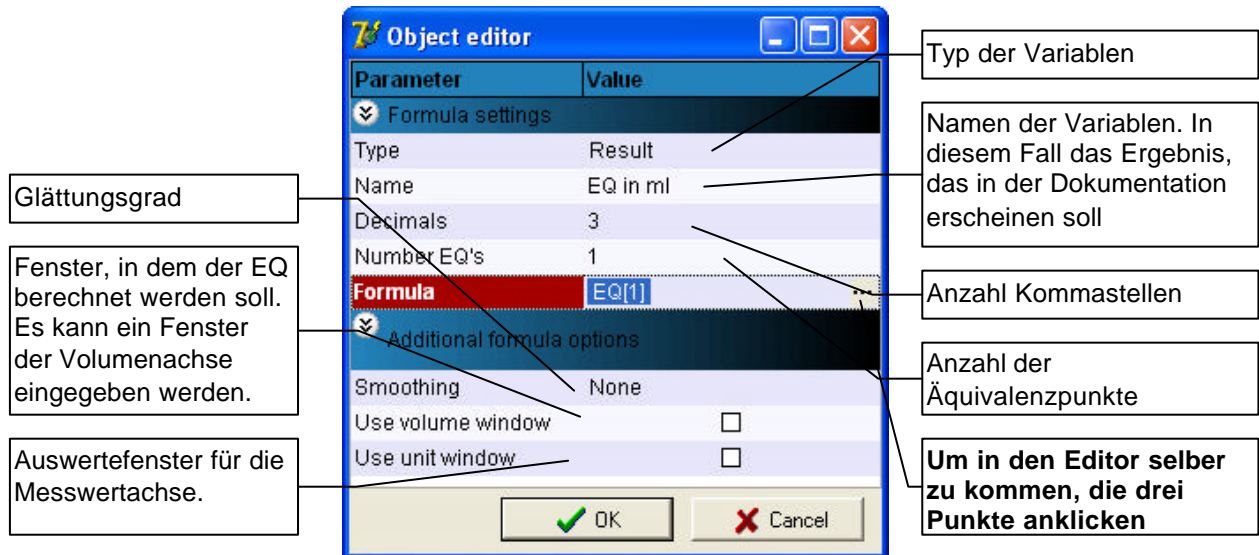


Abbildung 35: Formeleditor. Beispielberechnung für einen EQ

Die Funktionen und Variablen stehen alle im Formeleditor selber zur Verfügung. Sie werden im Folgenden beschrieben.

Der Menüpunkt „Werte“ zeigt alle Variablen, die an dieser Stelle zur Verfügung stehen. Die Variablen hängen von der Struktur der Methode ab. Wenn nur dosiert werden soll, stehen weniger Variablen zur Verfügung als bei einer Titration mit mehreren Reagenzien und Ergebnissen.

Die Variablen sind:

- Probenmenge (Einwaage oder Probenvolumen, wird im Titrationscenter eingegeben)
- Endvolumen (die Gesamtmenge an Reagenz)
- Globale Speicher (zum Beispiel definierte Blindwerte)
- Probenwerte (Eingabevariablen aus dem Titrations Center)
- Endwerte (der letzte Messwert einer Titrationskurve, auch der Messwert nach einer Messung pH oder mV)
- Reagenzvolumen (das Reagenzvolumen nach der Titration von jedem Reagenz, das verwendet wurde)
- Titer (der Titer der verwendeten Reagenzien)
- Bereits berechnete Ergebnisse (Ergebnisse in dieser Methode, Ergebnisse andere Methoden müssen in Globalen Speichern zwischengespeichert werden)

Sobald ein Ergebnis berechnet wurde stehen zusätzlich zwei weitere Variablen zur Verfügung:

- Mittelwert (der Mittelwert wird automatisch von allen Proben in einer Probenliste mit gleichen Probenbezeichnungen ermittelt)
- Standardabweichung (Anwendung wie bei Mittelwert, es wird üblicherweise die Standardabweichung eines Mittelwertes berechnet)

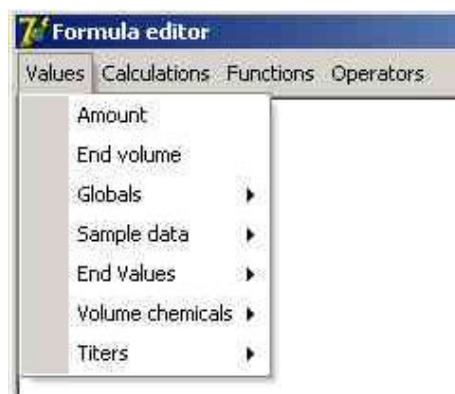


Abbildung 36: Variablen im Formeleditor

Der Äquivalentpunkt kann auf verschiedene Arten erhalten werden. Üblicherweise und voreingestellt ist die Ermittlung als Maximum der ersten Ableitung der Titrationskurve. Der EQ wird zwischen den Titrationspunkten interpoliert. Voraussetzung ist eine S-förmige Titrationskurve. Dies ist meist bei Leitfähigkeitstitrationen oder fotometrischen Titrationen nicht erfüllt.

Leitfähigkeitstitrationen werden über den Schnittpunkt von zwei Geraden erhalten, die sich im EQ schneiden. Deshalb ist es erforderlich, deutlich überzutitrieren. Unruhige Kurven lassen sich schwer auswerten, da die beiden Linien nur schwer zugeordnet werden können. Der Menüpunkt für diese Auswertung heißt „LF“.

Die fotometrische Titration wird ähnlich ausgewertet. Die Titrationskurve wird in drei Geraden zerlegt, der erste Teil ist parallel zur x-Achse, der letzte Teil ebenfalls. Der zweite Teil verbindet die beiden Geraden. TitriSoft kann den ersten oder zweiten Schnittpunkt dieser Geraden berechnen. Es wird der Schnittpunkt ermittelt, der den richtigen Gehalt liefert. Es besteht eine Abhängigkeit von der Bildung oder Zersetzung der Komplexe. Es muss in jeden Fall übertitriert werden, um auch für den letzten Teil genügend Datenpunkte zu haben.

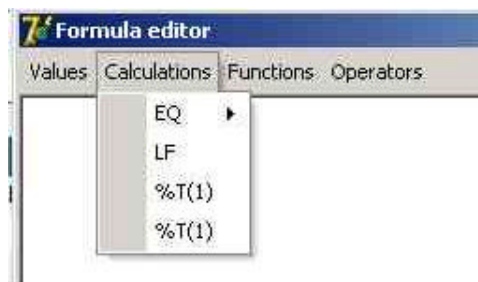


Abbildung 37: EQ-Berechnungen

Die Funktionen sind für einen Formeleditor typisch. Es können mehrere Klammerebenen verwendet werden (getestet wurden drei, es sind mehr möglich). Für besondere Berechnungen können Wurzel (Sqrt) und logarithmische Funktionen verwendet werden (Ln und Exp), z.B. für ISE-Auswertungen. Eine besondere Funktion ist die X at Y Funktion, bei der ein Verbrauch bei einem definierten Messwert berechnet werden kann.

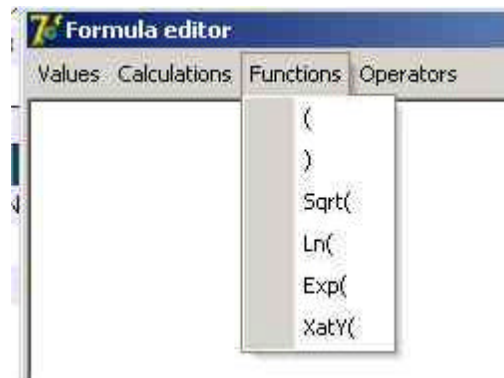


Abbildung 38: Besondere Berechnungsfunktionen

Die üblichen Operatoren können eingesetzt werden unter "Operatoren". Es stehen +, -, * und / zur Verfügung. Einige logische Operatoren sind für den Einsatz in der If-Anweisung gedacht.

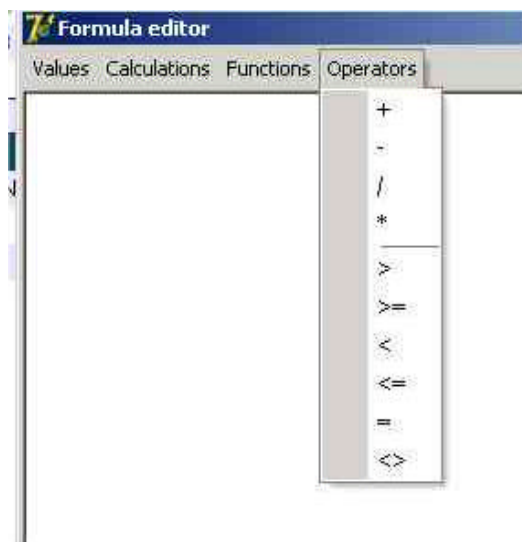


Abbildung 39: Operatoren im Formeleditor

Eine Beispielberechnung soll die Verwendung des Formeleditor demonstrieren. Es soll der Chloridgehalt einer Salzsäure durch Titration mit Natronlauge in % berechnet werden:

- Es wird ein Namen eingetragen: Z.B.. "% Chlorid in HCl".
- Der Typ der Variablen ist "Ergebnis"
- Anzahl der Stellen nach dem Komma ist 2
- Anzahl der EQs ist 1
- Im Formeleditor selbst wird ausgewählt "Berechnungen", „EQ“, EQ[1]
- Operator "*"
- Es wird der "Titer" unter "Werte" ausgewählt
- Operator "*"
- Der Berechnungsfaktor wird eingetippt, „35,45“.
- Operator "/"
- Unter "Werte" wird "Probenmenge" angeklickt

Abbildung 40 zeigt das Ergebnis:



Abbildung 40: Beispielformel für % Chloride einer HCl Lösung.

Eine Methode muss nach der Fertigstellung mit einem Klick auf das Diskettensymbol oben rechts im Methoden Center gespeichert werden! Ein kleiner Stern vor dem Methodennamen erinnert daran.

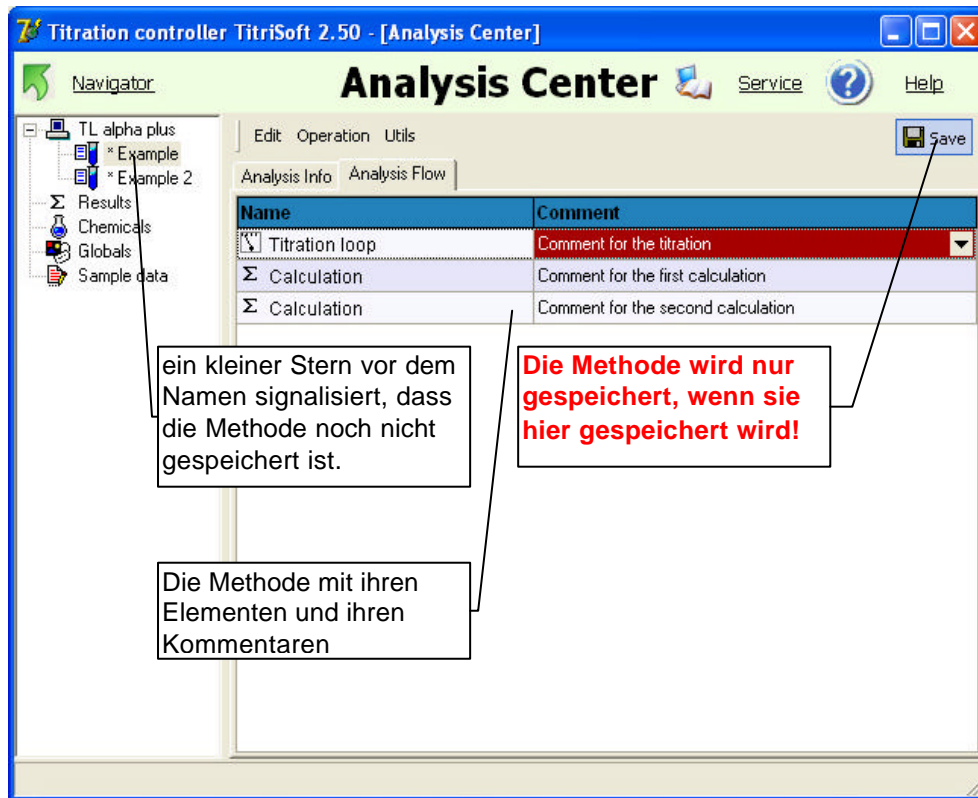


Abbildung 41: Eine Methode vor dem Speichern

Einen Überblick über die Methode sieht man in Abbildung 42.

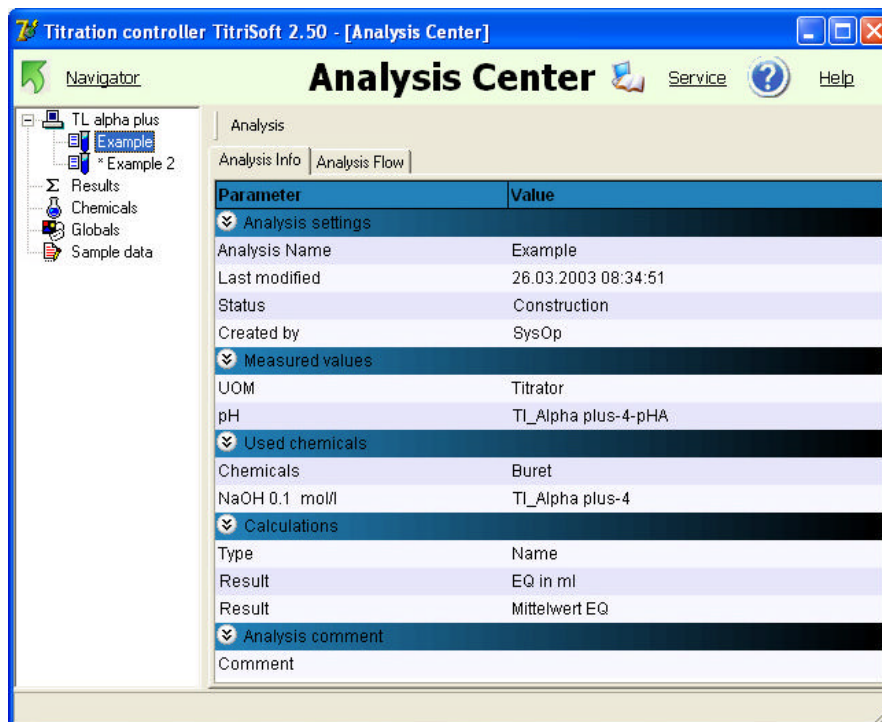


Abbildung 42: Allgemeine Methodeninformationen

Die allgemeinen Informationen enthalten die Hardwareinformationen, Reagenzien und die Ergebnisse, die bei einer Titration errechnet werden. Im Menüpunkt „Methode“ kann eine Methode freigegeben werden und auch gedruckt werden. Nach dem erstellen hat eine Methode den Status „In Bearbeitung“ und kann noch beliebig verändert werden. Es werden in der Datenbank keine Zwischenversionen gespeichert. In dem Augenblick, in dem eine Methode „freigegeben“ wird, wird eine eindeutige weltweite Kennung vergeben, mit der die Methode eindeutig gespeichert wird. Soll diese Methode

verändert werden, so wird automatisch eine neue Methode ohne Namen erstellt mit den gleichen Einstellungen. Diese kann dann verändert werden.

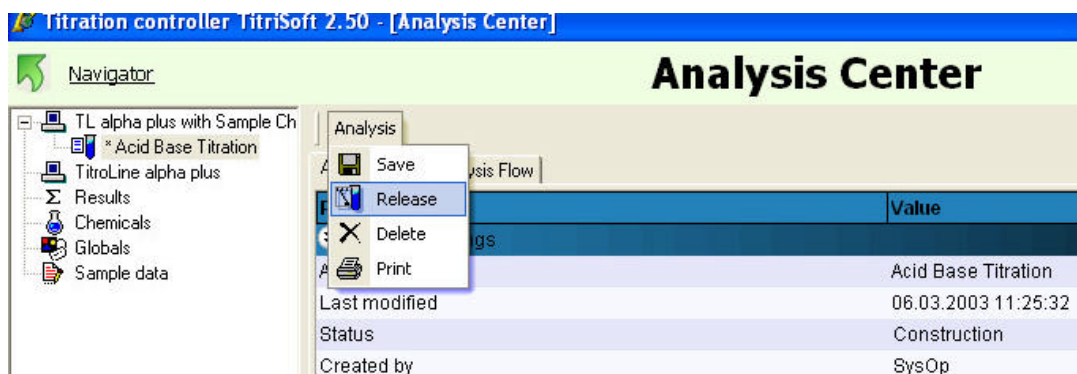


Abbildung 43: Freigabe einer Methode

Eine Methode kann in jedem Status verwendet werden. Parameteränderungen werden erst beim nächsten Start einer Methode aktiv. Eine Ausnahme sind die Endekriterien, die sofort nach Speichern aktiv werden, dann eine laufende Titration auch vorzeitig mit Berechnungen abgebrochen werden kann.

Titration Center

Im Titrations Center wird die Routinearbeit konfiguriert und die Titrationsen gestartet. Das :

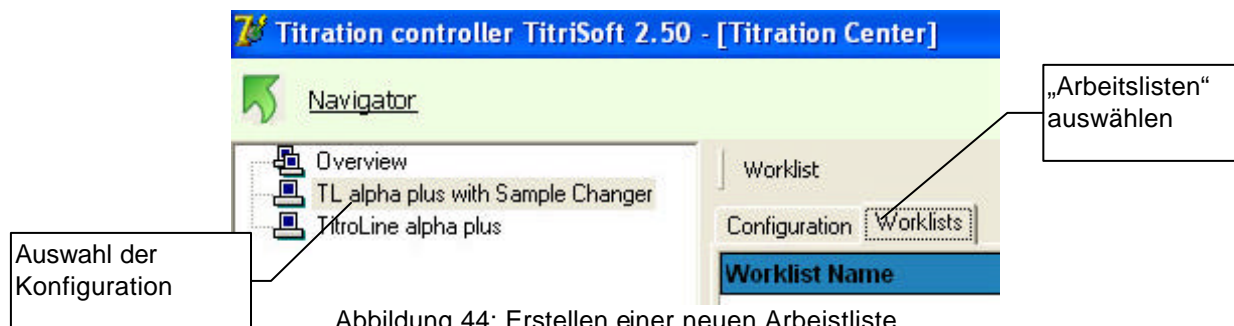
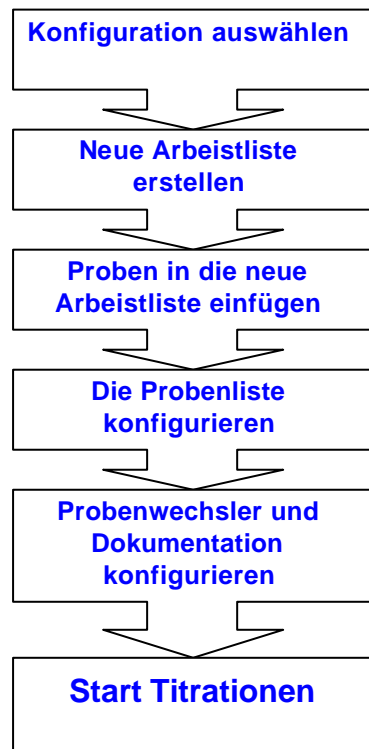


Abbildung 44: Erstellen einer neuen Arbeitliste

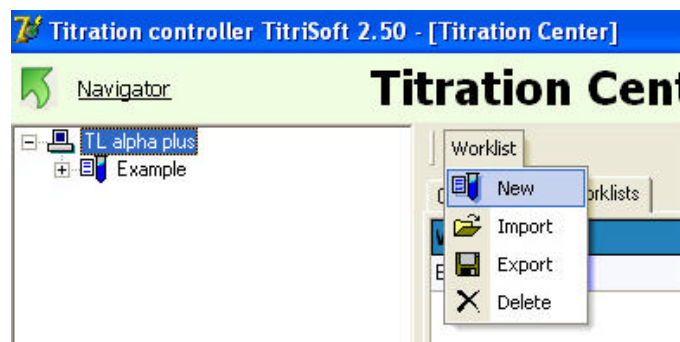
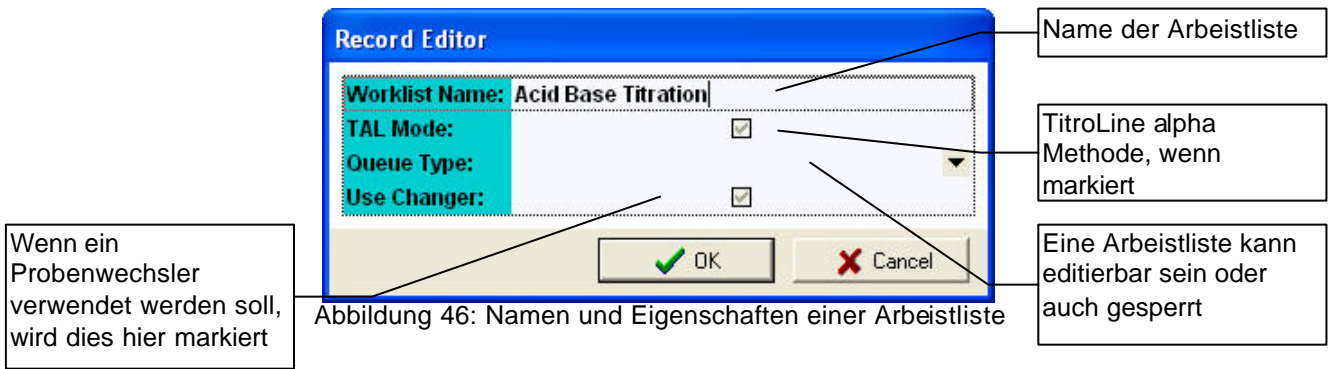


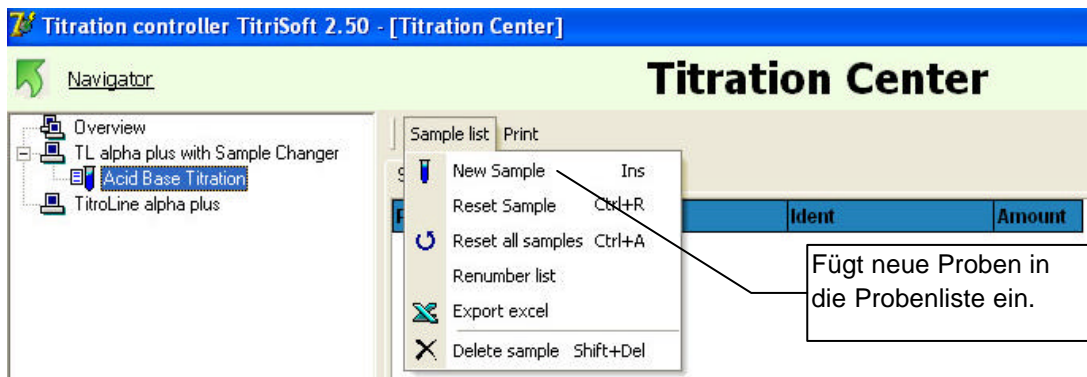
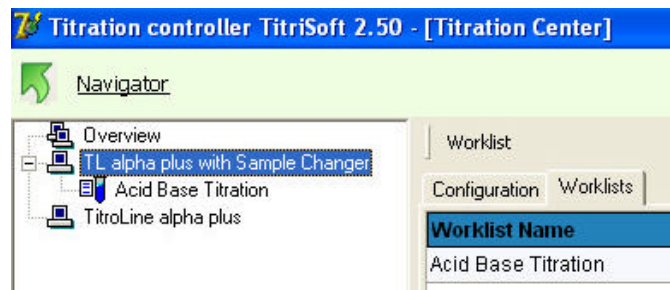
Abbildung 45: Neue Arbeitlistiet

Eine **„Arbeitsliste“** kann auch exportiert und importiert werden. Löschen ist nur für den Systemadministrator mit besonderem Passwort möglich.



Nachdem eine Arbeitsliste definiert wurde, muss sie konfiguriert werden. Die "Probenliste" ist eine Tabelle, in der alle Proben, die zur Bearbeitung anstehen, aufgelistet wurden. Diese Liste enthält die Nummer der Probe im Probenwechsler, die Methode, Probenkennzeichnung, Probenmenge und weitere Eigenschaften, die mit der Berechnung oder Probe zusammenhängen.

Nachdem eine Probenliste definiert wurde, erscheint ihr Name auf der linken Explorerseite.



Eine Probe kann eingefügt werden, indem im Menü "Probenliste" der Menüpunkt "Neue Probe" gewählt wird oder indem die "Einfüg"-Taste gedrückt wird..

Position	Status	Analysis	Ident	Amount	Verbrauch
1	Planned	Acid Base Titration		0	
2	Planned	Acid Base Titration		0	
3	Planned	Acid Base Titration		0	
4	Planned	Acid Base Titration		0	
5	Planned	Acid Base Titration		0	
6	Planned			0	

Abbildung 49: Eine Probenliste mit der Auswahl der zugeordneten Methode

Nach Einfügen der geforderten Anzahl von Proben, werden die zugehörigen Methoden in der Spalte „Methode“ ausgewählt. Alle in dieser Arbeitsliste verfügbaren Methoden werden in der Listbox angezeigt und können mit der Maus ausgewählt werden.

Es müssen nicht alle Proben die gleiche Methode haben. Die Auswahl ist völlig frei. Die erforderlichen Probeneingaben und Ergebnisse, die angezeigt werden sollen, werden im nächsten Schritt konfiguriert.

Property	System	Title	In Sample list	In Report
Position	System	Position	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Status	System	Status	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Analysis	System	Analysis	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Identification	System	Ident	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Amount	System	Amount	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Verbrauch in ml	Result	Verbrauch in ml	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

Abbildung 50: Konfiguration der Eigenschaften der Proben- und Arbeitsliste

Alle Variablen einer selektierten Methode erscheinen unter der Registerkarte „Eigenschaften“. Hier sind sie aufgelistet:

- Name der Eigenschaft
- Typ der Variablen
- Name in der Probenliste. Er kann verändert werden, z.B. gekürzt werden.
- In drei Spalten können diese Eigenschaften für die Bildschirmanzeige, den Ausdruck und den Export festgelegt werden.

Es können auch sogenannte Probenvariable hinzugefügt werden. Dies geschieht unter dem Menüpunkt „Eigenschaften“ und „Probenvariable hinzufügen“.

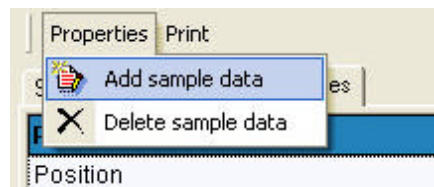


Abbildung 51: Probenvariable hinzufügen

Abbildung 52: Definition einer Probenvariablen

Property	System	Title	In Sample list	In Report
Position	System	Position	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Status	System	Status	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Analysis	System	Analysis	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Identification	System	Ident	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Amount	System	Amount	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Verbrauch in ml	Result	Verbrauch in ml	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Vordosiervolumen	Sample data	Vordosieren	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

Abbildung 53: Die neue Probenvariable erscheint in der Probenliste

Im nächsten Schritt werden die Dokumentation und die Arbeit mit dem Probenwechsler definiert:

Abbildung 54: Einstellungen für Probenwechsler und Dokumentation

Die Konfiguration einer Arbeitsliste umfasst:

- Grenzen für die Probenmenge (Proben außerhalb der Spezifikation erscheinen gelb markiert in der Probenliste)
- Einstellungen für den Ausdruck
- Einstellungen für den Probenwechsler

Der Ausdruck kann in drei verschiedenen Formen konfiguriert werden:

- Tabellenform(sieht wie die Beispielliste auf der Bildschirmabbildung aus)
- Listen Form (enthält eine kleine Abbildung einer Titrationskurve und alle Ergebnisse, es passen etwa drei bis vier Proben auf eine Seite)
- Einzel (enthält alle Ergebnisse und eine große Grafik)

Funktion des Probenwechslers	Mögliche Einstellungen
Anzahl der Positionen	Teller für 12, 16, 24 Proben sind verfügbar
Leere Positionen überspringen	Fährt mit der folgenden Probe fort, wenn kein Becherglas detektiert wird
Mit der ersten Position fortfahren	Wenn alle Proben fertig sind, soll mit der ersten Probe fortgefahren werden
Spülen	Die Optionen sind: Kein Spülen, die letzten drei Positionen verwenden, Spülgerät TP verwenden
Spülzeit	Spülzeit in Sekunden
Kopfsenkung in % Spülen	100% bedeutet Absenkung bis ganz unten. Die Prozentzahl hängt von der Höhe der Bechergläser und den verwendeten Elektroden und Titrierspitzen ab.
Aktion am Ende der Probenliste	Am Ende einer Probenliste kann der Probenwechsler den Kopf oben behalten oder in eine Warteposition fahren. die Warteposition kann die erste oder letzte Position des Probentellers sein.
Kopfsenkung in % bei Titration	100% bedeutet Absenkung bis ganz unten. Die Prozentzahl hängt von der Höhe der Bechergläser und den verwendeten Elektroden und Titrierspitzen ab.

Sample list Print

Sample list Settings Properties

Position	Status	Analysis	Ident	Amount	Verbrauch in ml	Vordosieren
1	Planned	Acid Base Titration	Sample 1	1,234		10
2	Planned	Acid Base Titration	Sample 2	1,345		10
3	Planned	Acid Base Titration	Sample 3	1,456		10
4	Planned	Acid Base Titration	Sample 4	1,678		10
5	Planned	Acid Base Titration	Sample 5	1,901		10
6	Planned	Acid Base Titration	Sample 6	2,234		10

Abbildung 55: Eine Probenliste ist fertig zur Titration

Der Start der Titrations erfolgt durch "Klicken" auf das grüne Start-Symbol oben rechts auf dem Bildschirm. Alle Proben mit dem Status „geplant“ werden titriert. Nach dem Start ändert sich der Status auf „aktiv“, nach der Titration auf „fertig“ oder „abgebrochen“.

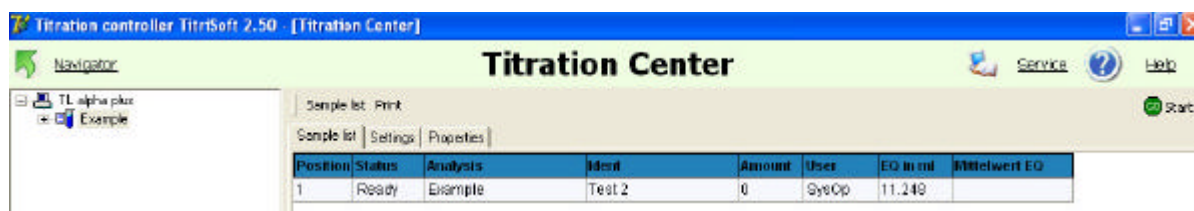


Abbildung 56: Probenliste nach der Titration. Oben rechts der Start-Schalter

Während der Titrations werden die berechneten Ergebnisse in der Probenliste dargestellt. Wenn auf den Namen der Konfiguration geklickt wird, erscheint die „On-Line“ Titrationskurve. wenn mehrere Konfigurationen vorhanden sind, erscheinen so viele Grafiken wie Konfigurationen.

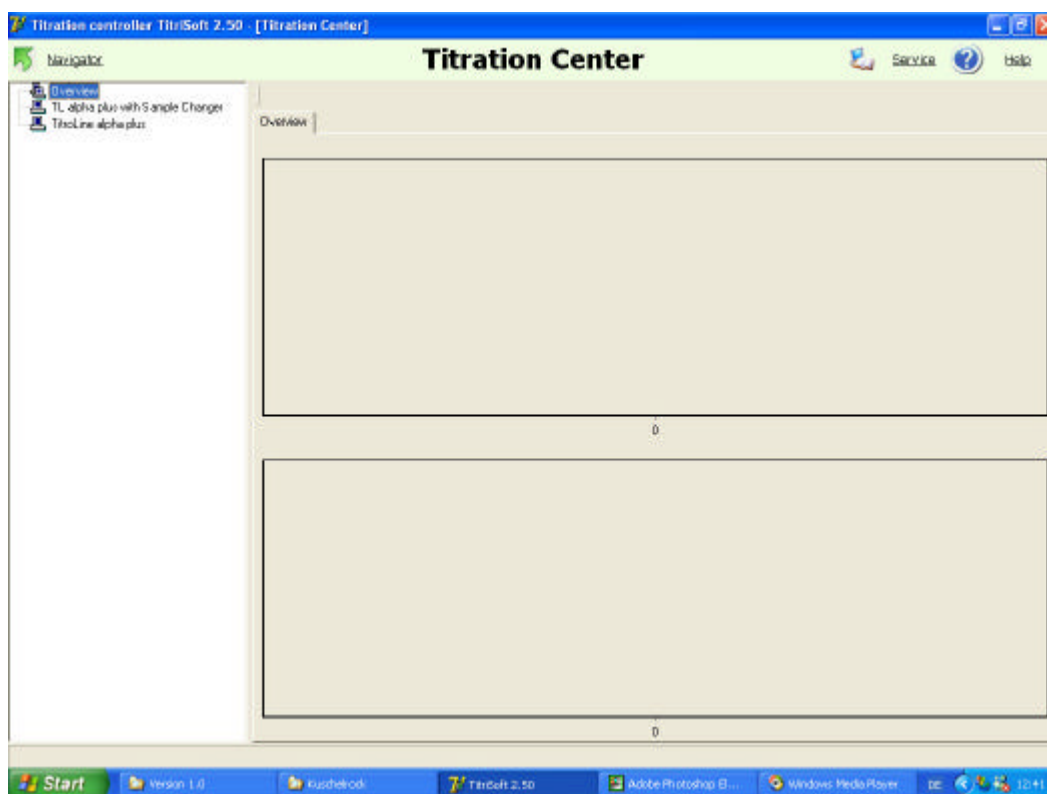


Abbildung 57: Übersichtsgrafik über zwei Konfigurationen

Datenbank

Alle Titrations werden in der **“Datenbank”** gespeichert. Sie können nach unterschiedlichen Kriterien sortiert werden. Die Kriterien sind:

- Name der Methode
- Name der Probe
- Anwender
- Datum

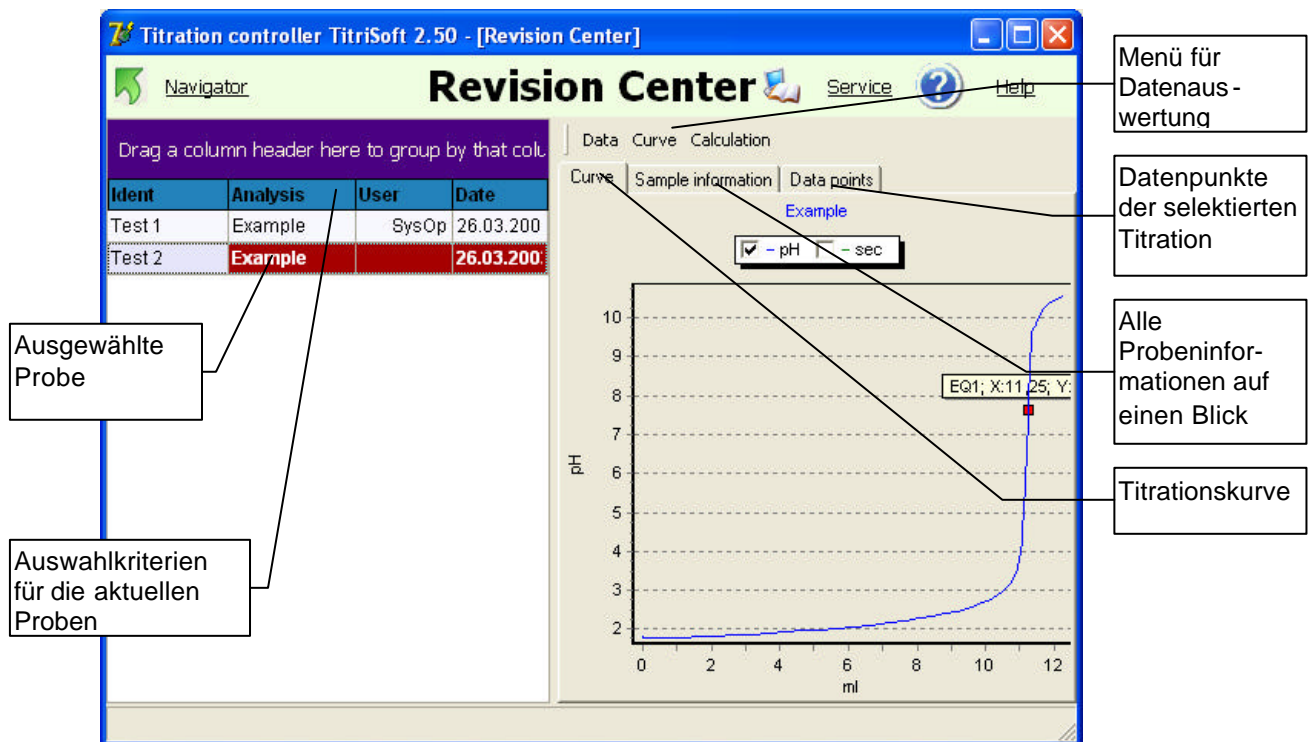


Abbildung 58: Überblick Datenbank

Die Auswahl einer Probe kann einfach nach dem folgenden Ablauf statt:

Auf eins der Felder der Probentabelle mit der (linken) Maus (-taste) klicken und halten. (Probenbezeichnung, Methode, Anwender oder Datum) und nach oben in das Feld schieben, Maustaste loslassen. Alle Proben sind jetzt nach dieser Eigenschaft geordnet.

Parameter	Value
Measurement properties	
Analysis	Example
Measurement date	25.03.2003 14:17:46
Status	Ready
Identification	Test 2
Amount	0
Position	1
User	SysOp
Measurement properties	
Name	Value
NaOH 0.1 mol/l	12,28
EQ in ml	11.248

Abbildung 59: Probeninformationen in der Datenbank

Die Probeninformationen werden unter "Probeninformationen" im Überblick gezeigt, die Datenpunkte der ausgewählten Probe unter „Datenpunkte“. Dabei werden normalerweise Verbrauchswerte, Messwerte, Titrationszeit und 1. Ableitung angezeigt.

Data Curve Calculation			
Curve		Data points	
pH	sec	ml	Der
1,79933	0	0	13,9096
1,805	0	0,01	16,0906
1,79175	1	0,02	18,2717
1,79275	2	0,03	24,5136
1,79	3	0,04	9,99273
1,785	4	0,06	4,49978
1,78825	5	0,1	1,70435
1,78425	7	0,18	0,85942
1,78275	8	0,34	0,18035
1,7875	9	0,66	0,92636
1,79925	11	1,16	1,73211
1,8215	13	1,66	2,10691
1,8355	15	2,16	2,20442
1,8585	16	2,66	2,49993

Abbildung 60: Liste der Datenpunkte

Der Menüpunkt „Daten“ erlaubt den Ausdruck einer einzelnen oder der Liste aller markierten Proben. Ebenso ist der Export als ASCII-Datei oder nach EXCEL möglich. Titrationsen von TitriSoft 2.5 können importiert werden.

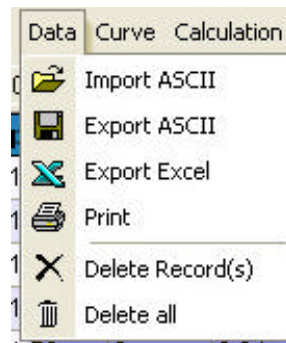


Abbildung 61: Menüpunkt "Daten"

Der Menüpunkt „Kurve“ erlaubt interaktive Untersuchungen der Titrationskurve. Die Funktion „Datenpunkte ein“ zeigt jeden Punkt der Titrationskurve an. Die „Ableitung“ stellt die erste Ableitung dar und gibt Hinweise zur Berechnung der Äquivalenzpunkte. Unter „Zusatz“ findet sich die Berechnung von Leitfähigkeitskurven und fotometrischen Kurven. Unter „EQ´s“ können bis zu fünf Äquivalenzpunkte berechnet und angezeigt werden.

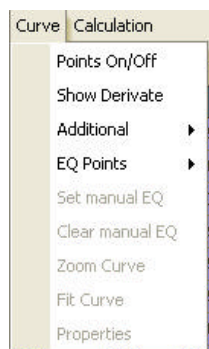


Abbildung 62: Optionen zur Kurvendarstellung

Es ist möglich einen Bereich aus der Grafik zu zoomen, indem mit gedrückter rechter Maustaste der gesuchte Bereich ausgewählt wird.

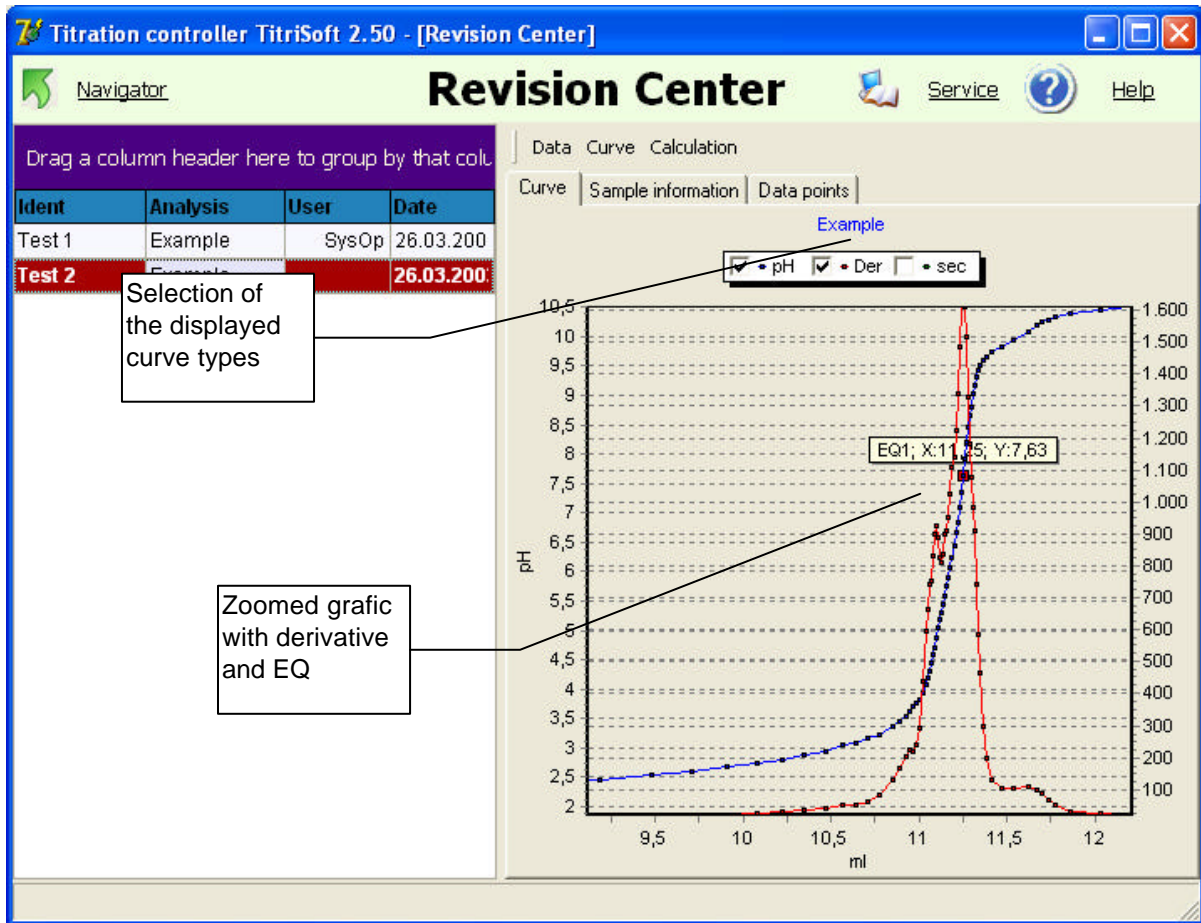


Abbildung 63: Titrationskurve mit erster Ableitung und Zoombereich.

Anwendung von Funktionen des Formeleditors

Mit TitriSoft ist ein weiter Bereich von Berechnungsmöglichkeiten gegeben. Die unterschiedlichen Möglichkeiten können für besondere Berechnungen, Automatisierung oder Einfluss auf Titrationsabläufe verwendet werden.

TitriSoft ermöglicht:

- Probeneinwaage oder – volumen mit der Bezeichnung "Probenmenge".
- Endvolumen einer Titration.
- Enwerte der Messwerte einer Titration oder Messung, auch von mehreren Messeinheiten.
- Gesamtvolumen aller Reagenzien am Ende oder im Laufe einer Titration
- Probenvariable
- Globale Variable
- Titer aller Reagenzien, die in der aktiven Methode verwendet werden.
- Alle berechneten Ergebnisse, die bis zu diesem Punkt im Titrationsablauf berechnet wurden.
- Mittelwert aller Ergebnisse oder Variablen der Methode.
- Standardabweichung aller Variablen der Methode.
- Besondere EQ-Berechnungen für LF- und FotometrieKurven.
- Unbegrenzte Anzahl von Klammern.
- Logarithmus Funktion.
- Quadratwurzelfunktion.
- X bei y Funktion.
- Standard Operatoren.
- Logical operators
- Zugriff auf Kalibrationsdaten der aktuellen Sensoren.

Die Ausgabe der berechneten Ergebnisse erfolgt im ersten Fenster des Formeleditors.

Zahl der EQ's, die im Formeleditor benötigt werden.

Parameter	Value
Formula settings	
Type	Result
Name	Mean Value in ml
Decimals	3
Number EQ's	1
Formula	Avg[2, EQ in ml]

Name des Ergebnisses, kann aus Liste ausgewählt werden oder neu eingegeben werden..

Anzahl Stellen für die Dokumentation

Abbildung 64: General settings of a formula

Die Darstellung der Formel. Sie kann eingegeben oder editiert werden, indem mit der Maus auf die drei Punkte klickt, die erscheinen, wenn die Zeile markiert ist.

Eine Variable kann auf einfache Art eingegeben werden, indem sie an der benötigten Stelle eingetippt wird.

Eine zweite Möglichkeit besteht darin, sie im Explorer vor der Methodenerstellung zu definieren. Dies gilt für:

- Ergebnisse
- Globale Variable
- Probandaten

Die Reagenzien werden mit Namen und Titer definiert. Der Eingabedialog ist ähnlich.

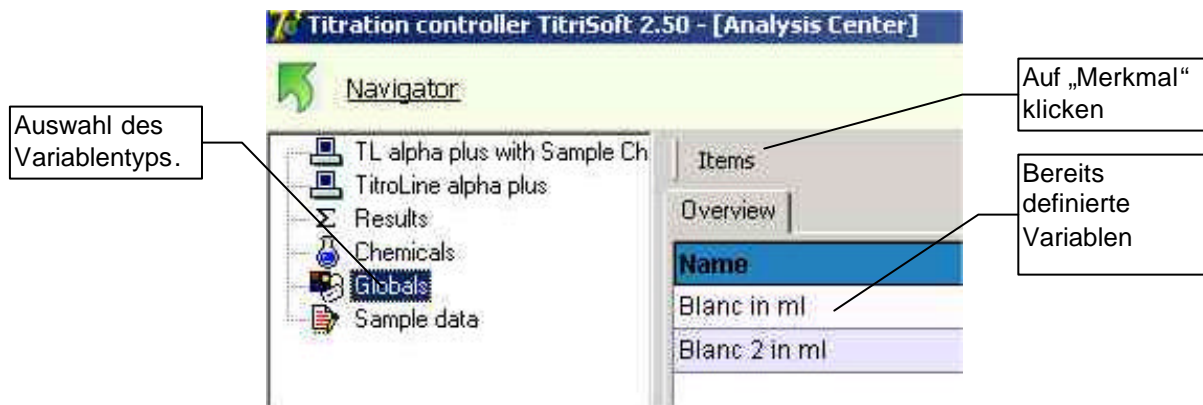


Abbildung 65: Implementation of a new variable

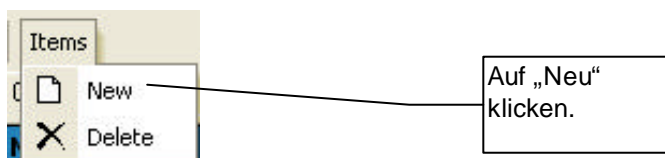


Abbildung 66: Anlegen oder löschen neuer Variablen

Nach dem Anklicken von "Neu" für eine neue Variable, erscheint das Fenster von Abbildung 67. In diesem Fenster kann der Name für die Variable eingegeben werden, ein Vorgabewert, der bei Bedarf überschrieben wird, ein oberer und unterer Grenzwert.

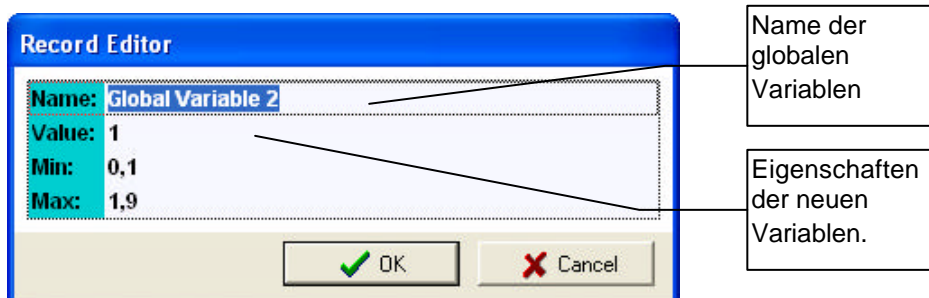


Abbildung 67: Namen und Eigenschaften der neuen Variablen

Nachdem eine Variable erzeugt wurde, kann sie in allen Formeln verwendet werden.

Achtung: Nur auf Variable der aktuellen Methode ist ein Zugriff möglich. So können zum beispiel nur mit Reagenzien gerechnet werden, die in der Methode verwendet werden.!