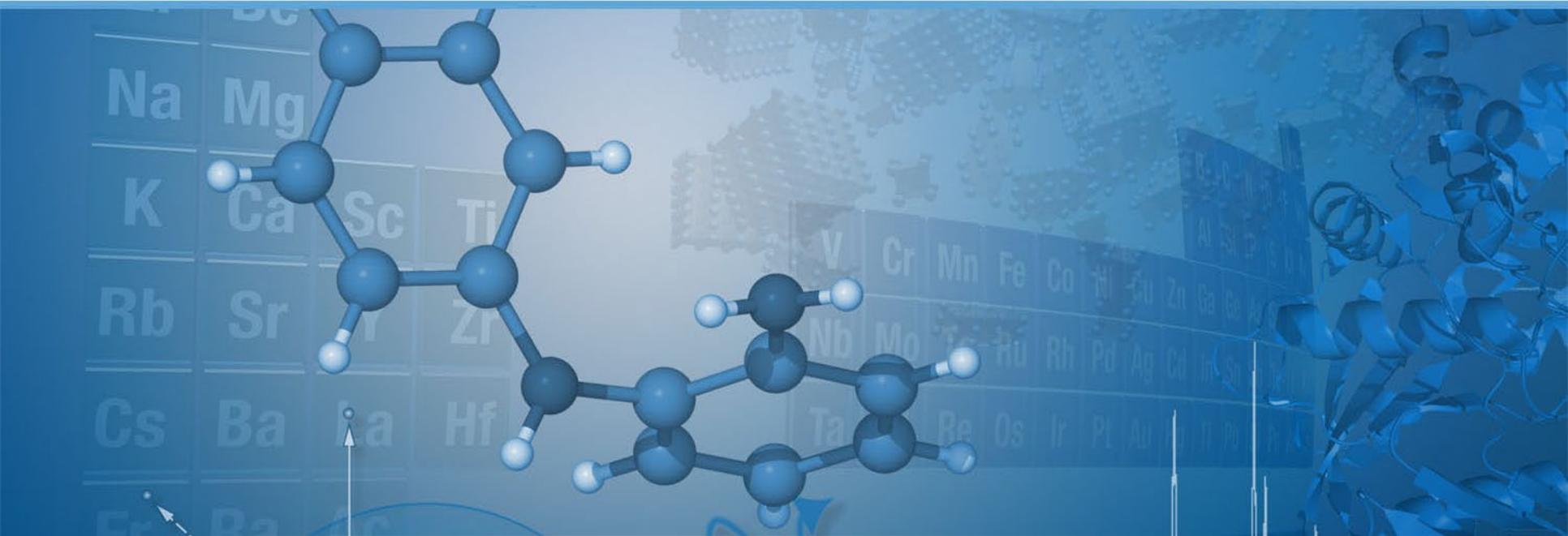




# RFA-Software in neuem Gewand - SPECTRA.ELEMENTS

*S2 PUMA, S2 POLAR & S6 JAGUAR*



# Herzlich willkommen!

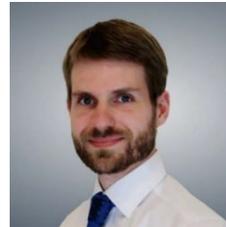
## RFA-Software in neuem Gewand - SPECTRA.ELEMENTS



1. SPECTRA.ELEMENTS  
Philosophie
2. SPECTRA.ELEMENTS  
Neue Funktionen
3. Rundgang durch die Software
  - WIZARD  
Erstellen von Kalibrierungen
  - LOADER  
Starten von Messungen
  - RESULTS MANAGER  
Spezifikationen
  - XRF EVALUATION  
Auswerten von Messergebnissen



*Dr. Jan Stelling*  
Global Application Coordinator  
Elemental Analysis  
Karlsruhe/Wunstorf, Deutschland



*Dr. Adrian Fiege*  
Produktmanager RFA  
Karlsruhe, Deutschland



*Dr. Kai Behrens*  
Leiter Produktmanagement RFA  
Karlsruhe, Deutschland

# SPECTRA.ELEMENTS

## Versionshistorie



| Version | Bemerkungen   |
|---------|---|
| 1.0     | Erste Version für das S2 PUMA (EDRFA-Spektrometer)  |
| 2.0     | Plugin zur Evaluierung & SMART-QUANT FP (standardlose Analytik für das S2 PUMA)   |
| 2.1     | Features für petrochemische Applikationen: <ul style="list-style-type: none"><li>- Blanks, Duplikate, Sekundärmatrix</li></ul>  |
| 2.2     | CFR21 PART11 (Optional)   |
| 3.0     | Erste Version für das S6 JAGUAR (WDRFA-Spektrometer): <ul style="list-style-type: none"><li>- WDRFA-Funktionalität, SMART-QUANT WD (standardlose Analytik für das S6 JAGUAR)</li></ul>  |
| 3.1     | All-in-One Software für S2 PUMA, S2 POLAR & S6 JAGUAR: <ul style="list-style-type: none"><li>- Ein Installer für alle Geräte</li><li>- Verbesserungen &amp; neue Funktionen: Graphische Tools, Scheduler, Interne Standards, Post Processing, individuelle Einstellungen zur Driftkorrektur</li></ul> |

**2015**



**2018**

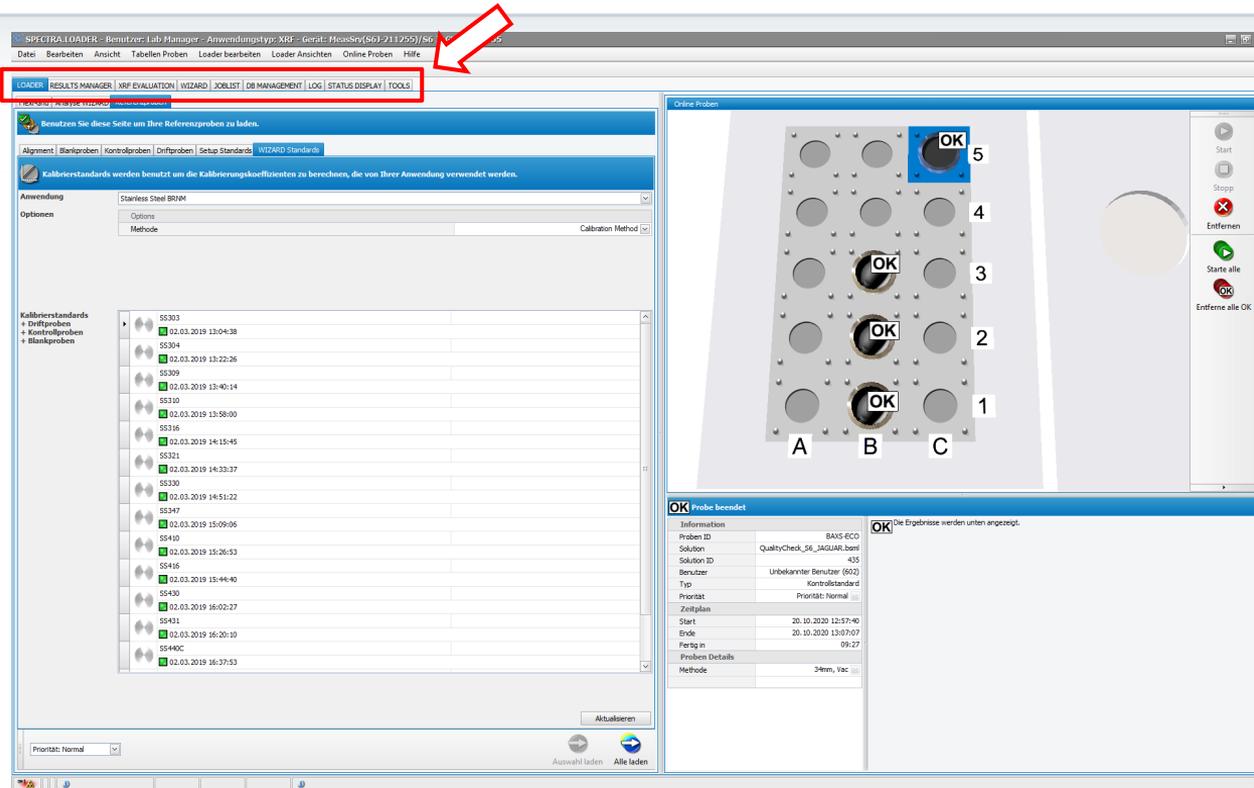


**2020**



# ***Philosophie***

# SPECTRA.ELEMENTS Philosophie



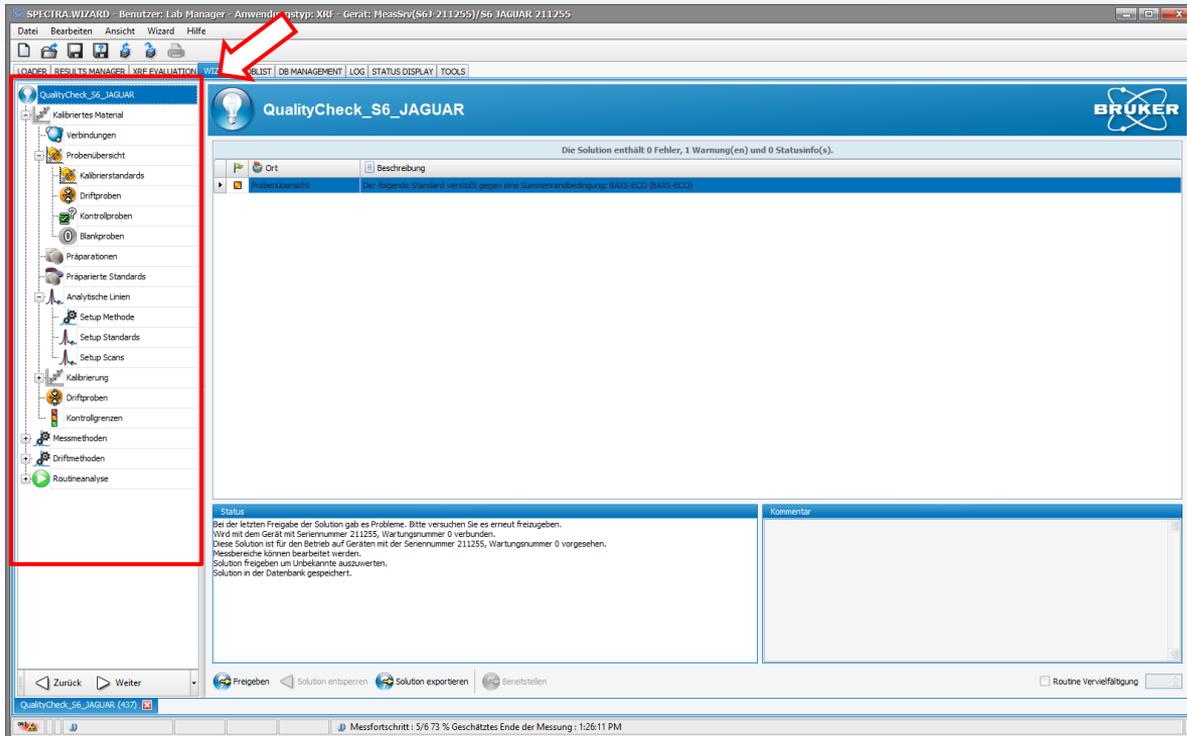
## SPECTRA.ELEMENTS:

- Ein Fenster
- Alle Programmteile als Reiter bzw. Tabs organisiert
- Individuell anpassbar

## *Spectra*plus/edx:

- Zentraler Launcher
- Viele Programme

# SPECTRA.ELEMENTS Philosophie



- Bewährte Baumstruktur bei der Erstellung von Methoden
- Verbesserung der Funktionalität des Application Wizard aus *Spectra<sup>plus</sup>*

# ***Neue Funktionen in v3.1***

# Scheduler Zeitplanung von Messungen

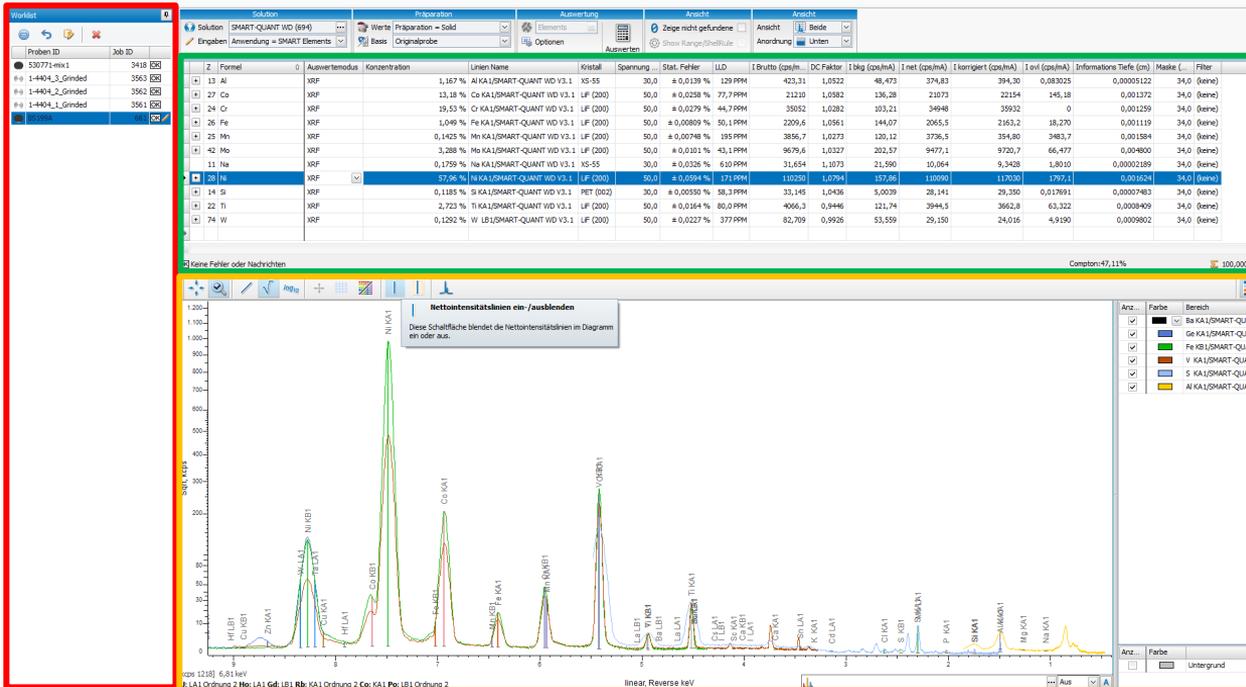


The screenshot displays the Bruker software interface. A 'Set-schedule' dialog box is open, showing options for scheduling measurements. The 'Schedule' option is selected, with a frequency of 'Daily' every '1' Days, starting at '13.02.2020 05:00:00', and a maximum of '10' measurements. The background shows a 'Loader' interface with a grid of measurement positions (1-5) and a 'Scheduled specimen' table.

| Scheduled specimen |                               |
|--------------------|-------------------------------|
| Information        |                               |
| Sample ID          | BAXS ECO                      |
| Solution           | QualityCheck_S6_JAGUAR.bsml   |
| Solution ID        | 435                           |
| View-spec.         | QualityCheck_S6_JAGUAR (29... |
| Type               | Routine measurement           |
| Priority           | Priority: Normal (U)          |
| Schedule           |                               |
| Start              | 24.02.2020 05:01:48           |
| End                | 24.02.2020 05:11:11           |
| Application        |                               |
| Application        | QUALITY-CHECK                 |
| Mask               | 34 mm                         |
| Mode               | Vacuum                        |
| Method             | 34mm, Vac                     |

- Implementiert in den *Loader*
- Vergleichbar zu *Spectra<sup>plus</sup>* ab v3

# Evaluation Graphische Tools & Probenliste



- Auswertung von Proben übersichtlicher
- **Tabellenansicht** der Ergebnisse anpassbar
- Wahlweise ist die **Probenliste** immer sichtbar
- **Graphische Tools** zur Spektrenansicht flexibler
- Benutzerfreundlicher Export

# Driftkorrektur Einstellungen & Nachverfolgung



**Einstellungen**

Farben des Periodensystems | **Drift Einstellungen** | Konfigurationsdateien

**Driftkontrolle**

Kontrolle durchführen     Schwellenwert (%)

Der Drift Schwellenwert wird verwendet, um große Schwankungen in der Driftkorrektur zu verhindern. Große Diskrepanzen können durch die Messung einer falschen Probe oder durch die Messung der Drift verursacht werden, wenn das Gerät nicht bereit ist.

**Druckänderungskompensation**

Anti Kontamination  
 Eco Helium  
 Helium (Atmosphärendruck)  
 Helium (druckreduziert)  
 Luft  
 Niedriges Vakuum  
 Stickstoff (Atmosphärendruck)  
 Stickstoff (druckreduziert)  
 Vakuum  
 Vakuum unterstützter Stickstoff  
 Vakuum unterstütztes Helium

Korrektur zur Stabilisierung der Auswertungsergebnisse für atmosphärische Modi, die durch den Umgebungsluftdruck beeinflusst werden. Die Aktivierung dieser Option kann zu einer Inkompatibilität mit früheren Driftmessungen führen.

Werte auf Standard zurücksetzen

Speichern

- Schwellenwert für die Akzeptanz der Driftkorrektur anpassbar
- Nachverfolgung mit Validierungsoptionen

**Driftkorrekturdaten**

Probename:  BAS-ECC    Messzeit: Von 21.08.2018 bis 06.08.2020    Maske (nm): 34    Atmosphäre:  Vakuum,  Helium (druckreduziert)

Linienname:  Co KA1/QualityCh,  Si KA1/QualityCh,  Mg KA1/QualityCh,  Sn KA1/QualityCh,  Mo KA1/QualityCh    Spannung (kV): 50    Filter:  N<sub>0</sub>mm    Energiebereich (keV): 3 to 8

Kristall:  LF (200)    Kollimator (°): 0,66    Detektor:  Speedy

Ziehen Sie eine Spaltenüberschrift in diesen Bereich, um diese zu gruppieren

| Job ID | Messzeit         | Gültig                              | Revision | Bruttointensität (cp...) | Untergrundintensität (c...) | Bereiche-Messung | Nettonintensität (c...)  | Proben... | Linienname | Linien Energi...       | Maske (c...) | Spannun... | Atmosphäre | Kristall | Kollimat... | Filter | Detektor |        |
|--------|------------------|-------------------------------------|----------|--------------------------|-----------------------------|------------------|--------------------------|-----------|------------|------------------------|--------------|------------|------------|----------|-------------|--------|----------|--------|
| 3792   | 06.08.2020 09:29 | <input checked="" type="checkbox"/> | 211255   | 0                        | 3662,9                      | 0,0              | <input type="checkbox"/> | 3662,9    | BAXS-E...  | Ca KA1/QualityCheck... | 3,6923       | 34         | 50         | Vakuum   | LF (...)    | 0,66   | N_D      | Speedy |
| 3791   | 06.08.2020 08:58 | <input checked="" type="checkbox"/> | 211255   | 0                        | 3670,7                      | 0,0              | <input type="checkbox"/> | 3670,7    | BAXS-E...  | Ca KA1/QualityCheck... | 3,6923       | 34         | 50         | Vakuum   | LF (...)    | 0,66   | N_D      | Speedy |
| 3790   | 06.08.2020 08:27 | <input checked="" type="checkbox"/> | 211255   | 0                        | 3666,7                      | 0,0              | <input type="checkbox"/> | 3666,7    | BAXS-E...  | Ca KA1/QualityCheck... | 3,6923       | 34         | 50         | Vakuum   | LF (...)    | 0,66   | N_D      | Speedy |
| 3789   | 06.08.2020 07:57 | <input checked="" type="checkbox"/> | 211255   | 0                        | 3664,3                      | 0,0              | <input type="checkbox"/> | 3664,3    | BAXS-E...  | Ca KA1/QualityCheck... | 3,6923       | 34         | 50         | Vakuum   | LF (...)    | 0,66   | N_D      | Speedy |
| 3788   | 06.08.2020 07:27 | <input checked="" type="checkbox"/> | 211255   | 0                        | 3667,5                      | 0,0              | <input type="checkbox"/> | 3667,5    | BAXS-E...  | Ca KA1/QualityCheck... | 3,6923       | 34         | 50         | Vakuum   | LF (...)    | 0,66   | N_D      | Speedy |
| 3787   | 06.08.2020 06:57 | <input checked="" type="checkbox"/> | 211255   | 0                        | 3665,0                      | 0,0              | <input type="checkbox"/> | 3665,0    | BAXS-E...  | Ca KA1/QualityCheck... | 3,6923       | 34         | 50         | Vakuum   | LF (...)    | 0,66   | N_D      | Speedy |
| 3786   | 06.08.2020 06:26 | <input checked="" type="checkbox"/> | 211255   | 0                        | 3663,3                      | 0,0              | <input type="checkbox"/> | 3663,3    | BAXS-E...  | Ca KA1/QualityCheck... | 3,6923       | 34         | 50         | Vakuum   | LF (...)    | 0,66   | N_D      | Speedy |
| 3785   | 06.08.2020 05:56 | <input checked="" type="checkbox"/> | 211255   | 0                        | 3663,7                      | 0,0              | <input type="checkbox"/> | 3663,7    | BAXS-E...  | Ca KA1/QualityCheck... | 3,6923       | 34         | 50         | Vakuum   | LF (...)    | 0,66   | N_D      | Speedy |
| 3783   | 06.08.2020 04:56 | <input checked="" type="checkbox"/> | 211255   | 0                        | 3664,0                      | 0,0              | <input type="checkbox"/> | 3664,0    | BAXS-E...  | Ca KA1/QualityCheck... | 3,6923       | 34         | 50         | Vakuum   | LF (...)    | 0,66   | N_D      | Speedy |
| 3782   | 06.08.2020 04:25 | <input checked="" type="checkbox"/> | 211255   | 0                        | 3656,9                      | 0,0              | <input type="checkbox"/> | 3656,9    | BAXS-E...  | Ca KA1/QualityCheck... | 3,6923       | 34         | 50         | Vakuum   | LF (...)    | 0,66   | N_D      | Speedy |
| 3781   | 06.08.2020 03:55 | <input checked="" type="checkbox"/> | 211255   | 0                        | 3654,4                      | 0,0              | <input type="checkbox"/> | 3654,4    | BAXS-E...  | Ca KA1/QualityCheck... | 3,6923       | 34         | 50         | Vakuum   | LF (...)    | 0,66   | N_D      | Speedy |
| 3780   | 06.08.2020 03:25 | <input checked="" type="checkbox"/> | 211255   | 0                        | 3655,4                      | 0,0              | <input type="checkbox"/> | 3655,4    | BAXS-E...  | Ca KA1/QualityCheck... | 3,6923       | 34         | 50         | Vakuum   | LF (...)    | 0,66   | N_D      | Speedy |

# Post Processing Nachbearbeitung



- Individuelle Aktion nach erfolgreicher Messung/Auswertung
- Im Results Manager für jede Applikation individuell wählbar
- Leichtere Integration in LIMS

The screenshot displays the Bruker software interface for post-processing. On the left, a list of actions is shown, including 'Export CSV File', 'Launch Program', and 'Export Solution'. A 'Configure Temp. C export' dialog box is open, showing file type 'DAT', file name 'Y14', and a path 'C:\ProgramData\Bruker\_ASD\Results\postprocessing'. In the center, a 'Post Processing Monitor / Bruker Service / Xrf' window shows a table of results registered for post-processing. A red arrow points to a 'Started Automatic Post Processing' notification in the system tray.

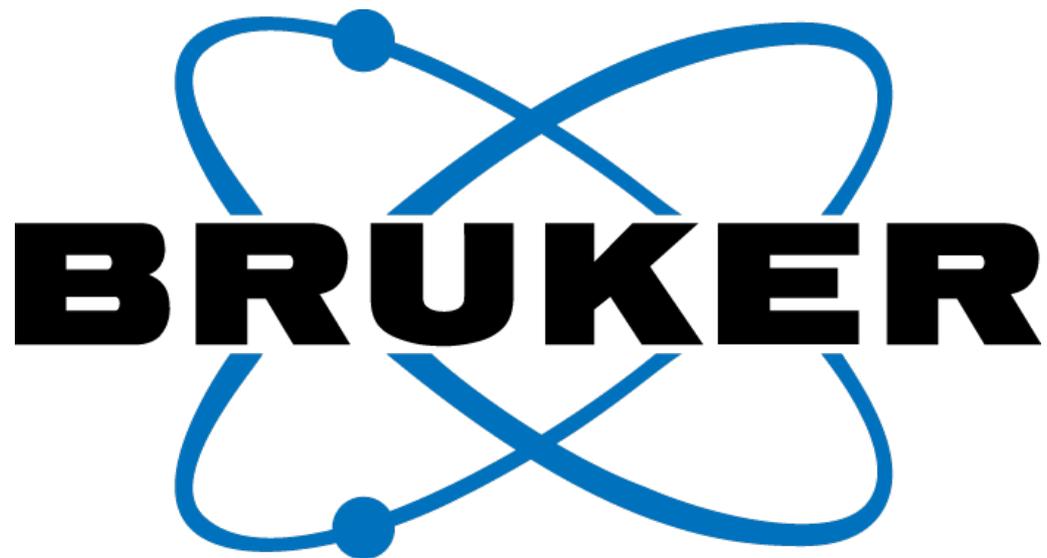
| Time       | Sample  | ID    | Error Message | View Specification |
|------------|---------|-------|---------------|--------------------|
| 04.03.2020 | FLX-K04 | 23... |               | Drift+QC-SMART 209 |

Results waiting to be printed: 1  
Switch to tab to see details about post processing procedure.

Microsoft Print to PDF

Started Automatic Post Processing

• Post Processing Monitor  
fast aktuelle Aktionen  
zusammen



Innovation with Integrity