

Das Unmögliche ermöglichen: Kombinieren von semi-quantitativer Analytik und Kalibrierungen mit dem S8 TIGER

Dr. Jan Stelling
Global Application Coordinator Elemental Analysis
Bruker AXS GmbH

Bruker AXS Anwendertreffen XRF/XRD
Bremen – 19. bis 22. September 2022

Kombinieren von QUANT-EXPRESS mit Quantitativen Methoden

01

Motivation & Szenarien

02

Glassand – QUANT-EXPRESS Linien zu
Quantitativen Methoden hinzufügen

03

Glassand – Kalibrierte Linien zu QUANT-
EXPRESS hinzufügen

04

Zusammenfassung

01 – Motivation & Szenarien

Kombinieren von QUANT-EXPRESS mit Quantitativen Methoden – Warum?

1. *Eine quantitative Methode benötigt die Messung von zusätzlichen Elementen*
 - Zusätzliche Elemente nicht Teil der Standard-Zertifikate bzw. nicht bekannt
 - Elemente können als individuelle standardlose Linien aus QUANT-EXPRESS hinzugefügt werden



01 – Motivation & Szenarien

Kombinieren von QUANT-EXPRESS mit Quantitativen Methoden – Warum?

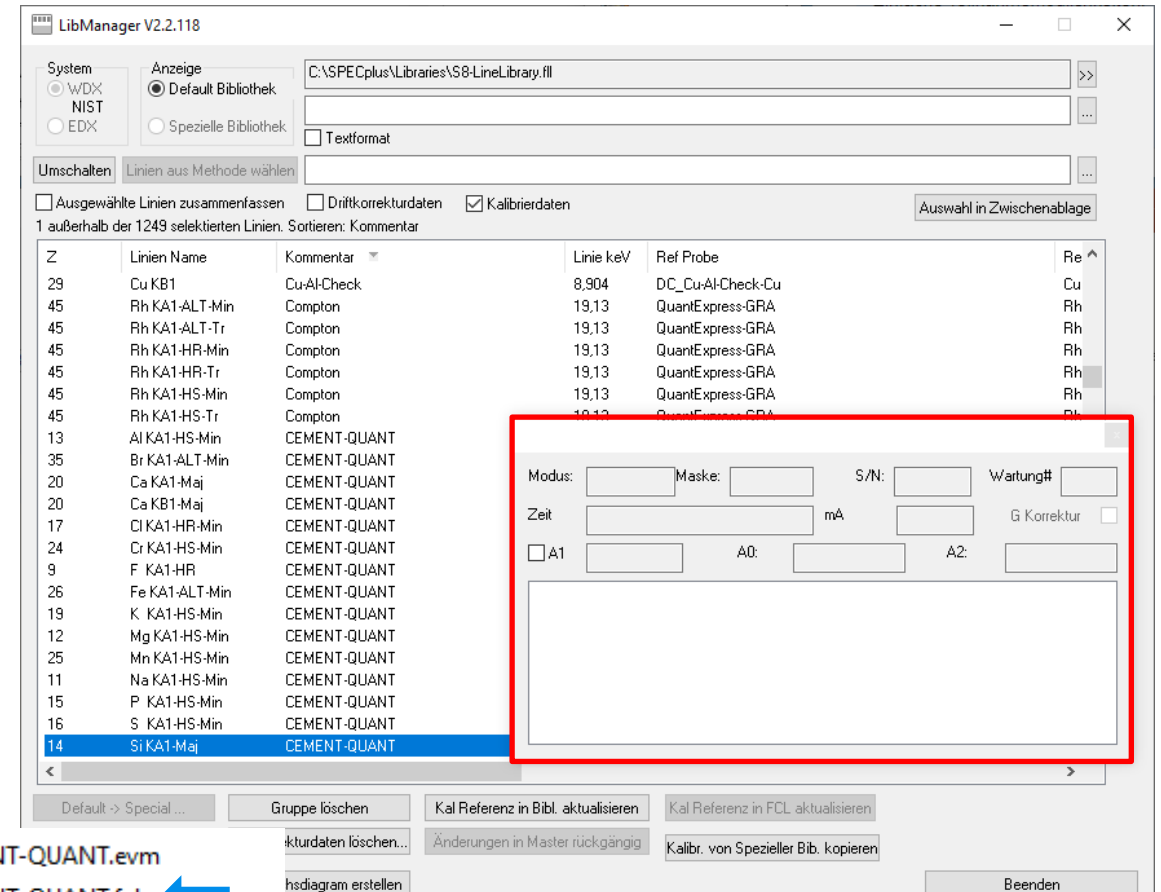
2. *Bessere Genauigkeit bestimmter Elemente in QUANT-EXPRESS benötigt*

- Universeller Fingerabdruck der Probe durch 2Theta-Scan benötigt
- Kalibrierte Linien der gewünschten Elemente können in QUANT-EXPRESS hinzugefügt werden



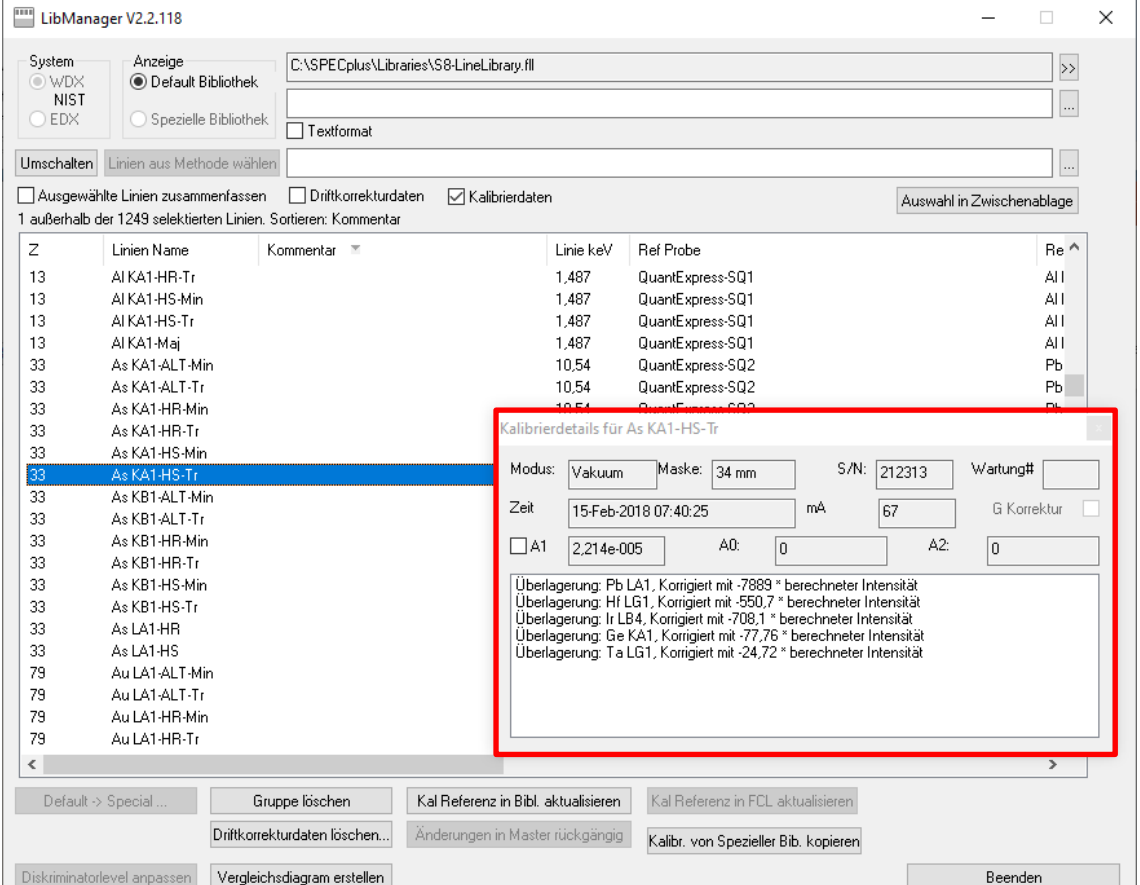
01 – Motivation & Szenarien

- QUANT-EXPRESS und quantitative Methoden teilen in Spectra^{plus} sich die gleiche Linienbibliothek
 - Nahtlose Integration in beide Richtungen möglich
- Der Unterschied zwischen Linien dedizierter Kalibrierungen und QUANT-EXPRESS ist die Speicherung der Kalibrierparameter letzterer in die Linienbibliothek
- Es ist möglich, diese Linien in anderen Methoden zu verwenden, ohne neue Kalibrierungen zu erstellen
- In dedizierten Kalibrierungen werden die Details (Sensitivität/Steigung, Matrixkorrektur, Überlagerungen) in die zugehörige fcl-Datei der Methode gespeichert



01 – Motivation & Szenarien

- Für QUANT-EXPRESS wurde die Kalibrierung auf einem Master-System durchgeführt
- Die Übertragung auf Kunden-Geräte wird durch die Speicherung der Kalibrierparameter in die jeweiligen Linien und die Verwendung von Transfer-Proben ermöglicht
- Kalibrierparameter eigener Methoden können ebenso in die Linienbibliothek gespeichert werden
- PETRO-QUANT nutzt den Ansatz der Bibliothekskalibrierung ebenso



The screenshot shows the LibManager V2.2.118 interface. The main window displays a table of calibration lines with columns for 'Z', 'Linien Name', 'Kommentar', 'Linie keV', 'Ref Probe', and 'Re'. The line '33 As KA1-HS-Tr' is selected. A pop-up window titled 'Kalibrierdetails für As KA1-HS-Tr' is open, showing calibration parameters and a list of overlayers.

Z	Linien Name	Kommentar	Linie keV	Ref Probe	Re
13	Al KA1-HR-Tr		1,487	QuantExpress-SQ1	Al I
13	Al KA1-HS-Min		1,487	QuantExpress-SQ1	Al I
13	Al KA1-HS-Tr		1,487	QuantExpress-SQ1	Al I
13	Al KA1-Maj		1,487	QuantExpress-SQ1	Al I
33	As KA1-ALT-Min		10,54	QuantExpress-SQ2	Pb
33	As KA1-ALT-Tr		10,54	QuantExpress-SQ2	Pb
33	As KA1-HR-Min		10,54	QuantExpress-SQ2	Pb
33	As KA1-HR-Tr		10,54	QuantExpress-SQ2	Pb
33	As KA1-HS-Min		10,54	QuantExpress-SQ2	Pb
33	As KA1-HS-Tr		10,54	QuantExpress-SQ2	Pb
33	As KB1-ALT-Min				
33	As KB1-ALT-Tr				
33	As KB1-HR-Min				
33	As KB1-HR-Tr				
33	As KB1-HS-Min				
33	As KB1-HS-Tr				
33	As LA1-HR				
33	As LA1-HS				
79	Au LA1-ALT-Min				
79	Au LA1-ALT-Tr				
79	Au LA1-HR-Min				
79	Au LA1-HR-Tr				

Kalibrierdetails für As KA1-HS-Tr

Modus: Vakuum Maske: 34 mm S/N: 212313 Wartung#

Zeit: 15-Feb-2018 07:40:25 mA: 67 G Korrektur

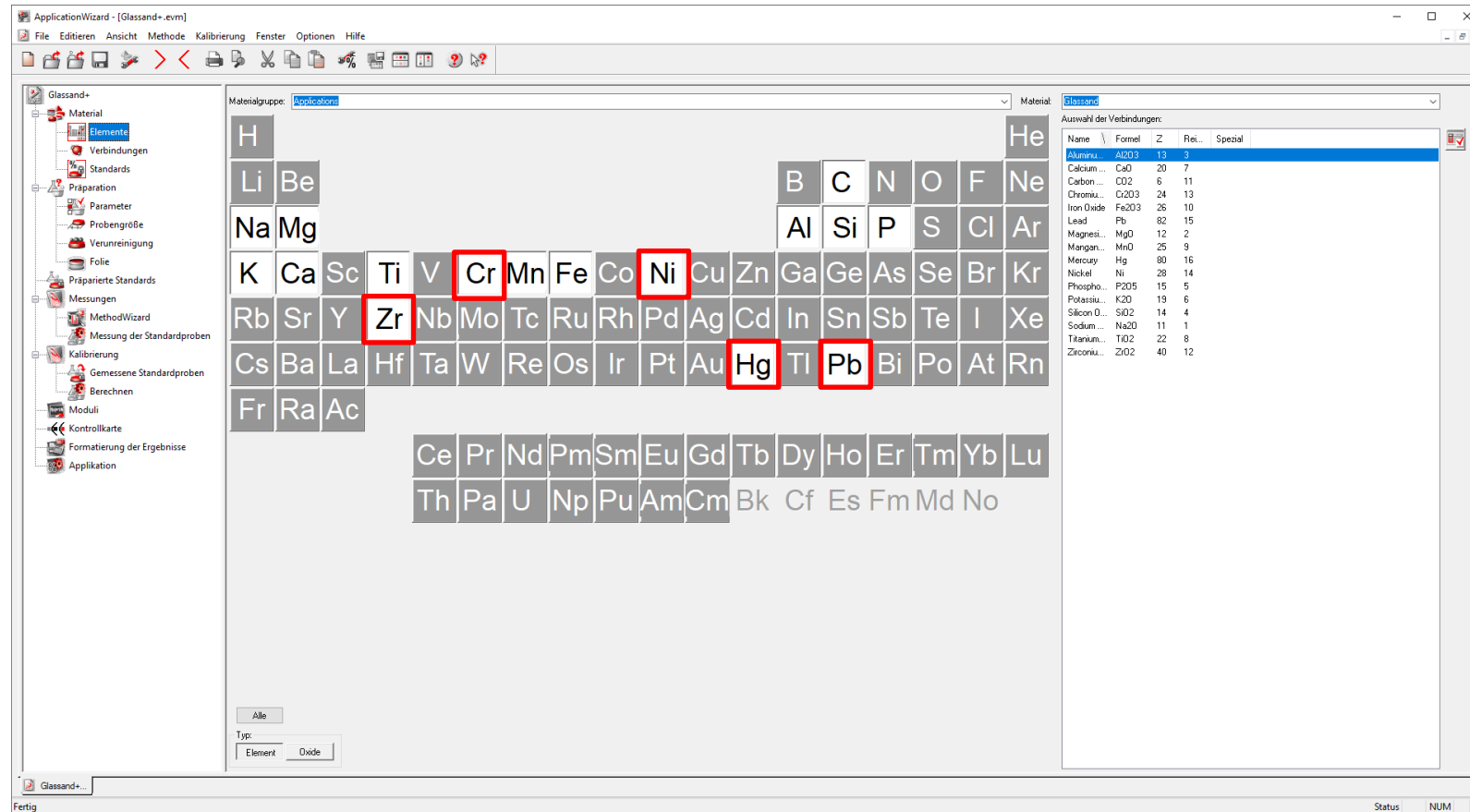
A1: 2,214e-005 A0: 0 A2: 0

Überlagerung: Pb LA1, Korrigiert mit -7889 * berechneter Intensität
 Überlagerung: Hf LG1, Korrigiert mit -550,7 * berechneter Intensität
 Überlagerung: Ir LB4, Korrigiert mit -708,1 * berechneter Intensität
 Überlagerung: Ge KA1, Korrigiert mit -77,76 * berechneter Intensität
 Überlagerung: Ta LG1, Korrigiert mit -24,72 * berechneter Intensität

QUANT-EXPRESS Linien zu Quantitativen Methoden hinzufügen

02 – QUANT-EXPRESS Linien zu Quantitativen Methoden hinzufügen

Elemente hinzufügen



Materialgruppe: Applications Material: Glasand

Auswahl der Verbindungen:

Name	Formel	Z	Ret...	Spezial
Alumina...	Al2O3	13	3	
Calcium ...	CaO	20	7	
Carbon ...	CO2	6	11	
Chromia...	Cr2O3	24	13	
Iron Oxide	Fe2O3	26	10	
Lead	Pb	82	15	
Magnesi...	MgO	12	2	
Mangan...	MnO	25	9	
Mercur	Hg	80	16	
Nickel	Ni	28	14	
Phospho...	P2O5	15	5	
Potassi...	K2O	19	6	
Silicon O...	SiO2	14	4	
Sodium...	Na2O	11	1	
Titanium...	TiO2	22	8	
Zirconiu...	ZrO2	40	12	

- Zusätzliche Elemente im *Application Wizard* hinzufügen
- In diesem Beispiel: Cr, Ni, Zr, Hg und Pb

02 – QUANT-EXPRESS Linien zu Quantitativen Methoden hinzufügen

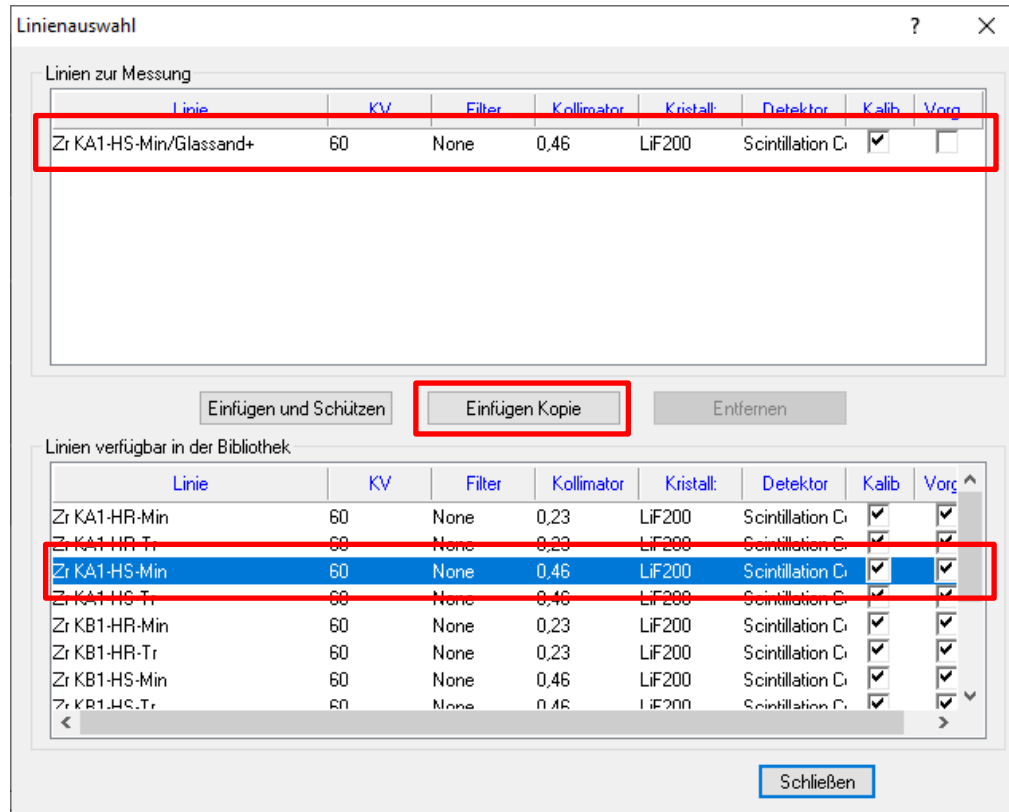
Scheinprobe hinzufügen

The screenshot shows the 'Glassand+' application window. The 'Material group' is set to 'Applications' and the 'Material' is 'Glassand'. A 'Limits' field shows '95,0' and '105,0' with a '%' sign. Below this, there is a 'Display' section with tabs for 'Compounds' and 'Elements'. A table of standards is displayed, with the 'QE DummyStandard' row highlighted in red. To the right of the table, there is an input field for a 'New standard' name, also highlighted in red.

	Sum(%)	Na2O(%)	MgO(%)	Al2O3(%)	SiO2(%)	P2O5(%)	K2O(%)	CaO(%)	TiO2(%)	MnO(%)	Fe2O3(%)	CO2(%)	ZrO2(%)	Cr2O3(%)	Ni(%)	Pb(%)	Hg(%)
FLX-QUARTZ 01	100,02	0,0057	0,0038	0,068	99,73	T	0,0108	0,0160	0,0243	0,0003	0,0229	0,1400	T	T	T	T	T
FLX-QUARTZ 02	99,84	0,0400	0,2000	8,890	83,34	0,1240	0,6500	0,1600	0,2200	0,0150	1,3400	4,8600	T	T	T	T	T
FLX-QUARTZ 03	99,80	0,0610	0,0820	3,520	90,36	0,2220	0,6500	0,3000	0,2640	0,0200	3,2200	1,1000	T	T	T	T	T
FLX-QUARTZ 04	99,96	0,0760	0,0260	1,100	98,32	0,0069	0,1500	0,0380	0,0230	0,0013	0,0760	0,1400	T	T	T	T	T
FLX-QUARTZ 05	99,84	0,4700	0,0250	3,200	94,41	0,0070	1,2600	0,0940	0,0190	0,0011	0,0880	0,2700	T	T	T	T	T
FLX-QUARTZ 06	99,87	1,0900	0,1600	5,480	89,59	0,0140	2,0700	0,3400	0,1020	0,0100	0,4800	0,5300	T	T	T	T	T
FLX-QUARTZ 07	99,72	0,0270	0,0710	0,800	95,06	T	0,1500	2,8300	0,4500	T	0,3300	T	T	T	T	T	T
FLX-QUARTZ 08	100,00	0,1010	0,0007	2,447	95,92	0,2000	0,0750	0,2370	0,0400	T	0,1111	0,2710	T	T	T	T	T
QE DummyStandard	100,00	T	T	T	100,00	T	T	T	T	T	T	T	T	T	T	T	T

- Einen neuen Dummy-Standard hinzufügen
- Keine Konzentrationsangabe notwendig

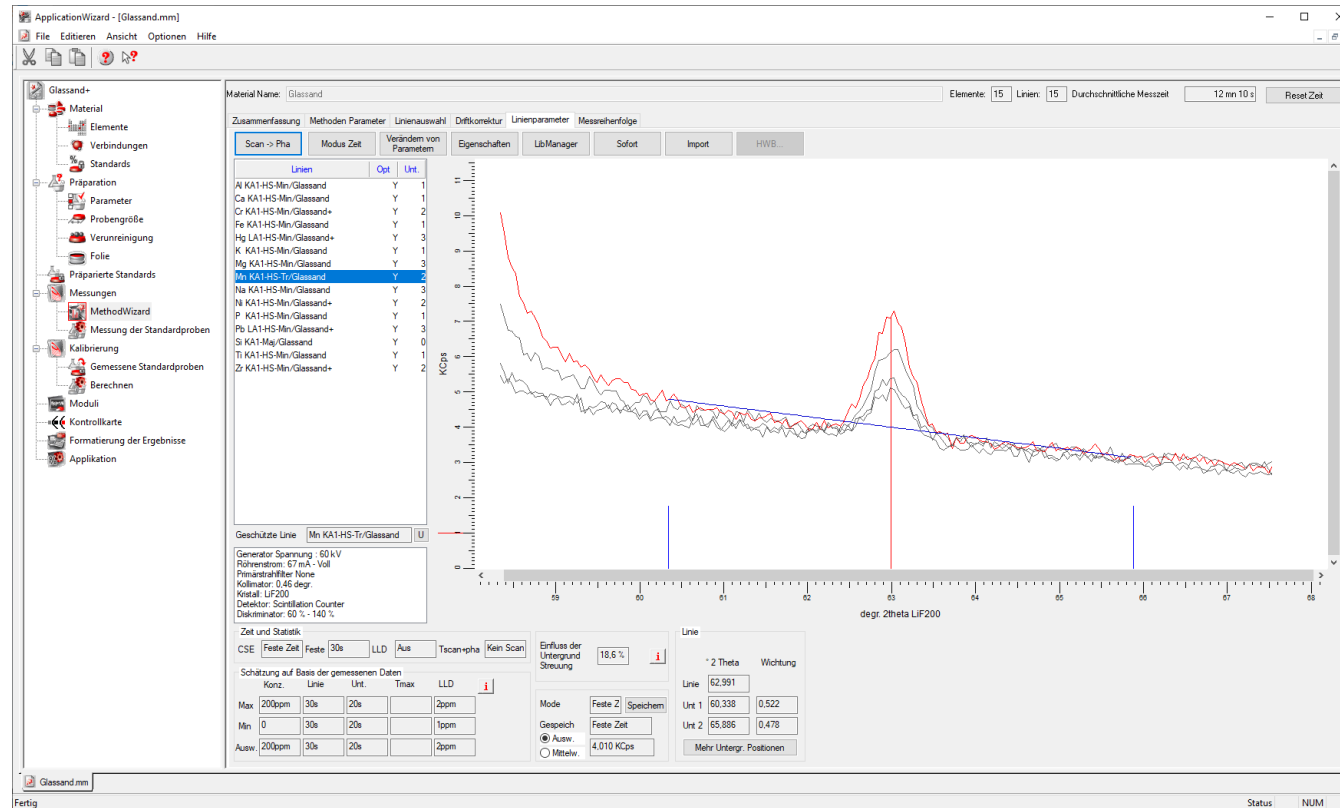
02 – QUANT-EXPRESS Linien zu Quantitativen Methoden hinzufügen Standardlose Linien der Methode hinzufügen



- Beispiel Zr KA1-HS-Min als Basislinie
- Anpassbare Linienparameter ohne Information der Basislinie zu verlieren:
 - Peakposition
 - Untergrund-Messpunkten
 - Röhrenstroms (mA)
 - Messzeit
- Änderungen an Parametern wie Filter, Generatorspannung (kV), PHA, Kollimator, Kristall oder Detektor sind nicht möglich
 - Falls einer dieser Parameter verändert wird oder der Name der Drift-Probe, sind die Kalibrierparameter der Basislinie ungültig

02 – QUANT-EXPRESS Linien zu Quantitativen Methoden hinzufügen

Peak- und Untergrund-Messpunkte anpassen



- Peak- und Untergrund-Messpunkte der neuen Linie anpassen
- QUANT-EXPRESS Linien wurden als 2Theta-Scans erstellt
- Messung als Peak/Untergrund wird die Zählstatistik und die Nachweisgrenze (NWG) verbessern
- Die hinzugefügten Linien verwenden die globale Driftkorrektur der SQx-Pproben
- Verwenden von spezifischer und globaler Driftkorrektur in einer Methode ist möglich

02 – QUANT-EXPRESS Linien zu Quantitativen Methoden hinzufügen

Neuen Standard importieren

Datenverzeichnis: C:\SPECplus\Libraries\Materials\Glassand\Glassand\

Fehlende deaktiv. Ungültige deaktiv. **Mehr Stds importieren** Proben: 9 Ausgewählt: 9

Präparierte Standard	Importiert	Material	Präparation	Datei
<input checked="" type="checkbox"/> FLX-QUARTZ 01		Glassand	Glassand	Existiert
<input checked="" type="checkbox"/> FLX-QUARTZ 02		Glassand	Glassand	Existiert
<input checked="" type="checkbox"/> FLX-QUARTZ 03		Glassand	Glassand	Existiert
<input checked="" type="checkbox"/> FLX-QUARTZ 04		Glassand	Glassand	Existiert
<input checked="" type="checkbox"/> FLX-QUARTZ 05		Glassand	Glassand	Existiert
<input checked="" type="checkbox"/> FLX-QUARTZ 06		Glassand	Glassand	Existiert
<input checked="" type="checkbox"/> FLX-QUARTZ 07		Glassand	Glassand	Existiert
<input checked="" type="checkbox"/> FLX-QUARTZ 08		Glassand	Glassand	Existiert
<input checked="" type="checkbox"/> QE_DummyStan...	Importiert	Glassand	Glassand	Existiert

Zu importierende Standardproben:

Material: Glassand
Präparation: Glassand

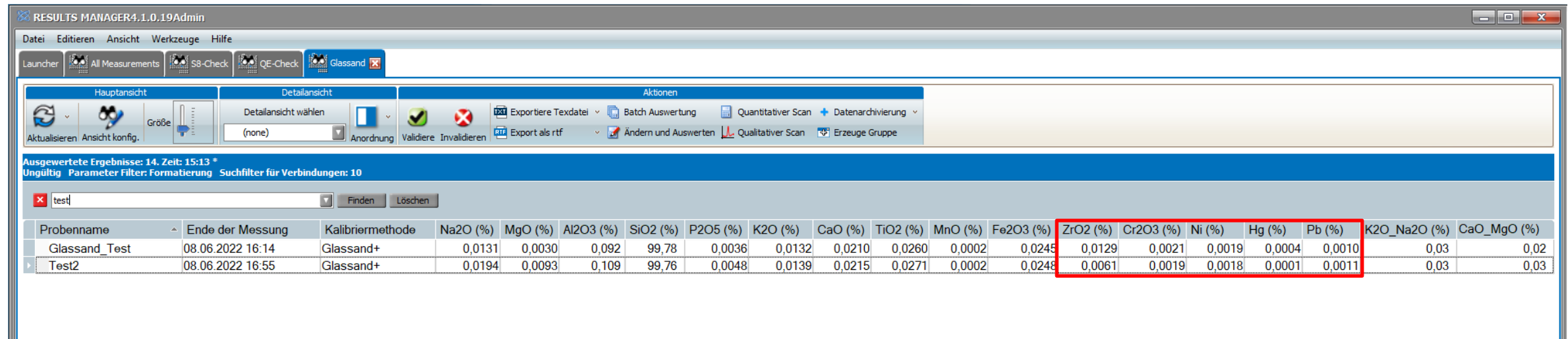
Std.	Material	Präparation	Präp. Standard	Material Masse (g)	Additiv Masse (g)	Durchmesser (cm)	Masse (g)
FLX-QUARTZ 01	Glassand	FLX-QUARTZ 01	6,0000	6,0000	4,000	12,0000	
FLX-QUARTZ 02	Glassand	FLX-QUARTZ 02	6,0000	6,0000	4,000	12,0000	
FLX-QUARTZ 03	Glassand	FLX-QUARTZ 03	6,0000	6,0000	4,000	12,0000	
FLX-QUARTZ 04	Glassand	FLX-QUARTZ 04	6,0000	6,0000	4,000	12,0000	
FLX-QUARTZ 05	Glassand	FLX-QUARTZ 05	6,0000	6,0000	4,000	12,0000	
FLX-QUARTZ 06	Glassand	FLX-QUARTZ 06	6,0000	6,0000	4,000	12,0000	
FLX-QUARTZ 07	Glassand	FLX-QUARTZ 07	6,0000	6,0000	4,000	12,0000	
QE_DummyStandard	Glassand	QE_DummyStandard	6,0000	6,0000	4,000	12,0000	

- Nach Messung des neuen Standards, kann dieser in die Kalibrierung importiert werden

02 – QUANT-EXPRESS Linien zu Quantitativen Methoden hinzufügen

Neue angepasste Ergebnisanzeige

- Nach Anpassen und Speichern des Ergebnisformats sollten die Ergebnisse im Results Manager, Eval2, Loader und TouchControl nach der nächsten Messung entsprechend angezeigt werden
 - Stellen Sie sicher, dass das entsprechende Auswertemodell (evm) korrekt mit dem richtigen Ergebnisformat verbunden ist



RESULTS MANAGER4.1.0.19Admin

Datei Editieren Ansicht Werkzeuge Hilfe

Launcher All Measurements S8-Check QE-Check Glassand

Hauptansicht Detailsansicht Aktionen

Aktualisieren Ansicht konfigur. Größe

Detailsansicht wählen (none) Anordnung Validiere Invalidieren

Exportiere Textdatei Batch Auswertung Quantitativer Scan Datenarchivierung

Export als rtf Ändern und Auswerten Qualitativer Scan Erzeuge Gruppe

Ausgewertete Ergebnisse: 14. Zeit: 15:13 *
Ungültig Parameter Filter: Formatierung Suchfilter für Verbindungen: 10

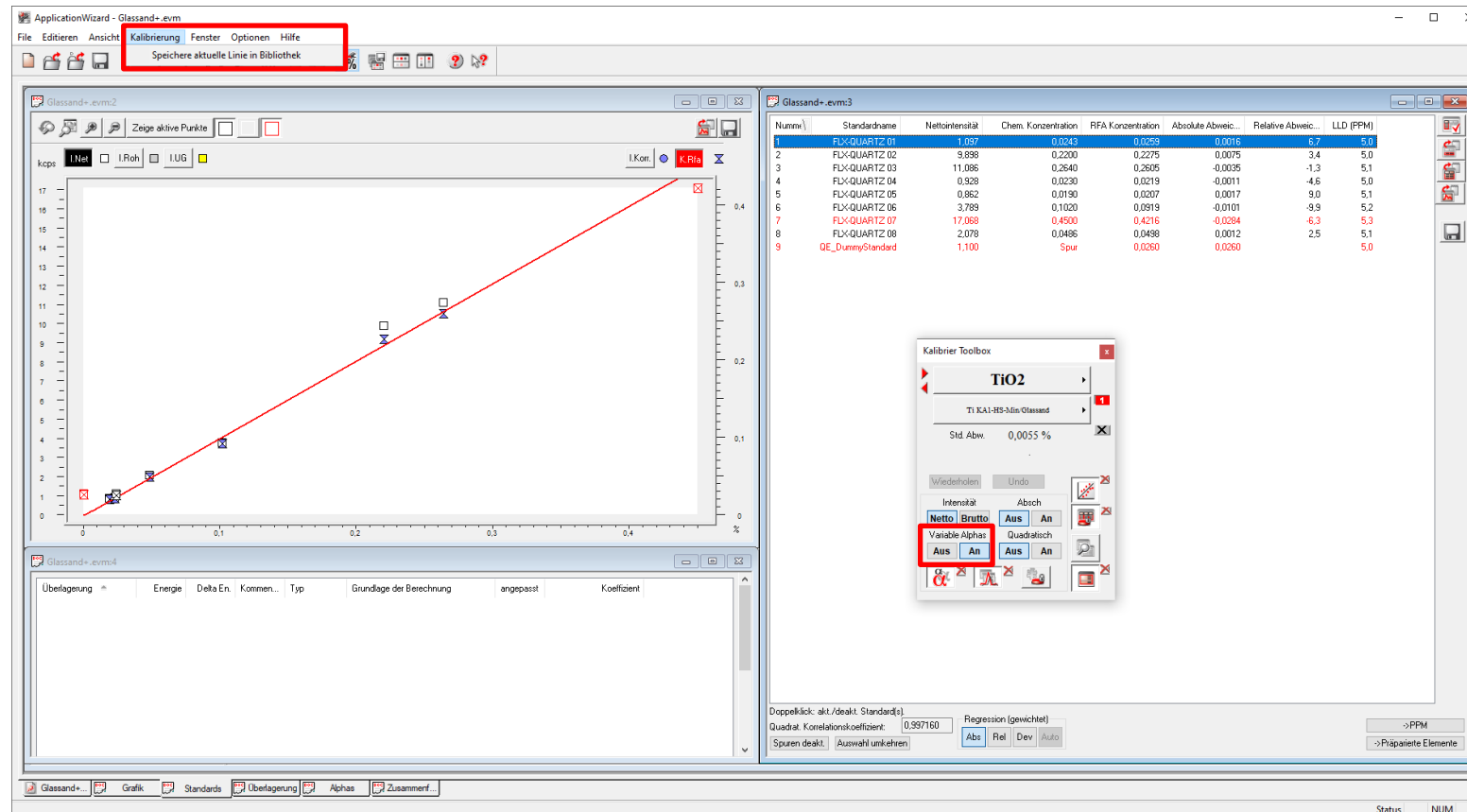
test Finden Löschen

Probenname	Ende der Messung	Kalibriermethode	Na2O (%)	MgO (%)	Al2O3 (%)	SiO2 (%)	P2O5 (%)	K2O (%)	CaO (%)	TiO2 (%)	MnO (%)	Fe2O3 (%)	ZrO2 (%)	Cr2O3 (%)	Ni (%)	Hg (%)	Pb (%)	K2O_Na2O (%)	CaO_MgO (%)
Glassand_Test	08.06.2022 16:14	Glassand+	0,0131	0,0030	0,092	99,78	0,0036	0,0132	0,0210	0,0260	0,0002	0,0245	0,0129	0,0021	0,0019	0,0004	0,0010	0,03	0,02
Test2	08.06.2022 16:55	Glassand+	0,0194	0,0093	0,109	99,76	0,0048	0,0139	0,0215	0,0271	0,0002	0,0248	0,0061	0,0019	0,0018	0,0001	0,0011	0,03	0,03

Kalibrierte Linien zu QUANT-EXPRESS hinzufügen

03 – Kalibrierte Linien zu QUANT-EXPRESS hinzufügen

Voraussetzungen



The screenshot shows the Bruker software interface with three windows. The top window, 'ApplicationWizard - Glassand+.evm', has a red box around the 'Kalibrierung' menu and a sub-menu item 'Speichere aktuelle Linie in Bibliothek'. The middle window, 'Glassand+.evm2', displays a calibration plot with a red line and data points. The bottom window, 'Glassand+.evm3', shows a data table with columns: Nummer, Standardname, Nettointensität, Chem. Konzentration, RFA Konzentration, Absolute Abweich..., Relative Abweich..., and LLD (PPM).

Nummer	Standardname	Nettointensität	Chem. Konzentration	RFA Konzentration	Absolute Abweich...	Relative Abweich...	LLD (PPM)
1	FLX-QUARTZ 01	1.097	0.0243	0.0299	0.0016	6.7	5.0
2	FLX-QUARTZ 02	9.898	0.2200	0.2275	0.0075	3.4	5.0
3	FLX-QUARTZ 03	11.086	0.2640	0.2605	-0.0035	-1.3	5.1
4	FLX-QUARTZ 04	0.928	0.0230	0.0219	-0.0011	-4.6	5.0
5	FLX-QUARTZ 05	0.862	0.0190	0.0207	0.0017	9.0	5.1
6	FLX-QUARTZ 06	3.789	0.1020	0.0919	-0.0101	-9.9	5.2
7	FLX-QUARTZ 07	17.968	0.4900	0.4216	-0.0684	-6.3	5.3
8	FLX-QUARTZ 08	2.078	0.0486	0.0498	0.0012	2.5	5.1
9	QE_DummyStandard	1.100	Spur	0.0260	0.0260		5.0

The 'Kalibrier Toolbox' window is also visible, showing 'TiO2' as the element and 'Ti KAl-MS-Mix/Glassand' as the method. The 'Std. Abw.' is 0,0055 %. The 'Netto' and 'Brutto' buttons are highlighted with a red box.

Diese Funktion setzt voraus, dass die kalibrierte Linie

1. Variable Alphas verwendet (Matrixkorrektur)
2. In die Linienbibliothek gespeichert wird
3. Zu einer QUANT-EXPRESS Messmethode hinzugefügt wird
4. Zu einem QUANT-EXPRESS Auswertemodell hinzugefügt wird

- Muss für jede Linie erfolgen, die mit QUANT-EXPRESS verwendet werden soll

03 – Kalibrierte Linien zu QUANT-EXPRESS hinzufügen

Voraussetzungen

LibManager V2.2.118

System: WDX, NIST, EDX
Anzeige: Default Bibliothek, Spezielle Bibliothek
C:\SPECplus\Libraries\SS-LineLibrary.lfl

Umschalten: Linien aus Methode wählen
 Ausgewählte Linien zusammenfassen
 Dritt.korrekturdaten
 Kalibrierdaten

Z	Linien Name	Kommentar	Linie keV	Ref Probe	Ref Linie	Kalib.	Röhre KV	Röhre mA	Filter	Kollimator	Kristall	2Th.Peak	2Th.Unt	Detektor	D.T.	LLD	ULD	Schütze
25	Mn KA1-HS-Tr	Glassand	5,899	QuantExpress-SQ1	Mn KA1-HS-Tr	C.D	60	Max	None	0,46	LF200	62,931*	60,338: ...	Sci	0	60	140	S
11	Na KA1-HS-Min	Glassand	1,041	QuantExpress-SQ2	Na KA1-HS-Min	C.D	30	Max	None	0,46	XS-95	24,920*	22,273: ...	Gas	0	50	150	S
15	P KA1-HS-Min	Glassand	2,014	QuantExpress-SQ2	P KA1-HS-Min	C.D	30	Max	None	0,46	PET	89,398*	92,341	Gas	0	50	150	S
14	Si KA1-Maj	Glassand	1,74	QuantExpress-SQ3	Si KA1-Maj	C.D	30	Max	None	0,23	PET	108,975*		Gas	0	35	300	S
22	Ti KA1-HS-Min	Glassand	4,511	QuantExpress-SQ1	Ti KA1-HS-Min	C.D	50	Max	None	0,46	LF200	86,167*	89,051	Gas	0	50	150	S

Kalibrierdetails für Ti KA1-HS-Min/Glassand

Modus: Vakuum Masker: 34 mm S/Nr.: 216684 Wartung#:

Zeit: 08-Jun-2022 14:08:32 mA: 81 G Korrektur:

A1: 0,0001463 A0: 0 A2: 0

Beenden

- Sie können überprüfen, ob die Linien korrekt in die Linienbibliothek abgespeichert wurden:
- Die Fenster sollte Datum/Zeit, Sensitivität usw. der Kalibrierung zeigen

03 – Kalibrierte Linien zu QUANT-EXPRESS hinzufügen

Kalibrierte Linie einer QUANT-EXPRESS Messmethode hinzufügen

MethodWizard - [Glassand-Vac34mm.mm]

Material Name: Elemente: 18 Linien: 21 Durchschnittliche Messzeit: 9 mn 50 s

Zusammenfassung Methoden Parameter **Linienauswahl** Driftkorrektur Linienparameter Messreihenfolge

Linienauswahl

Linien zur Messung

Linie	KV	Filter	Kollimator	Kristall	Detektor	Kalb	Vorg...
Ti Kα1-HR-Tr/QE	50	None	0.23	LIF200	Flow Counter	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

Einfügen und Schützen Einfügen Kopie Entfernen

Linien verfügbar in der Bibliothek

Linie	KV	Filter	Kollimator	Kristall	Detektor	Kalb	Vorg...
Ti Kα1-HR-Min	50	None	0.23	LIF200	Flow Counter	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Ti Kα1-HR-Min/QE	50	None	0.23	LIF200	Flow Counter	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Ti Kα1-HR-Tr	50	None	0.23	LIF200	Flow Counter	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Ti Kα1-HS-Min	50	None	0.46	LIF200	Flow Counter	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Ti Kα1-HS-Min/Glassand	50	None	0.46	LIF200	Flow Counter	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Ti Kα1-HS-Min/QE	50	None	0.46	LIF200	Flow Counter	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Ti Kα1-HS-Tr	50	None	0.46	LIF200	Flow Counter	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Ti Kα1-HS-Tr/QE	50	None	0.46	LIF200	Flow Counter	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

Schließen

Compton Linie(n) Rayleigh Linie(n)

Fertig 14:47

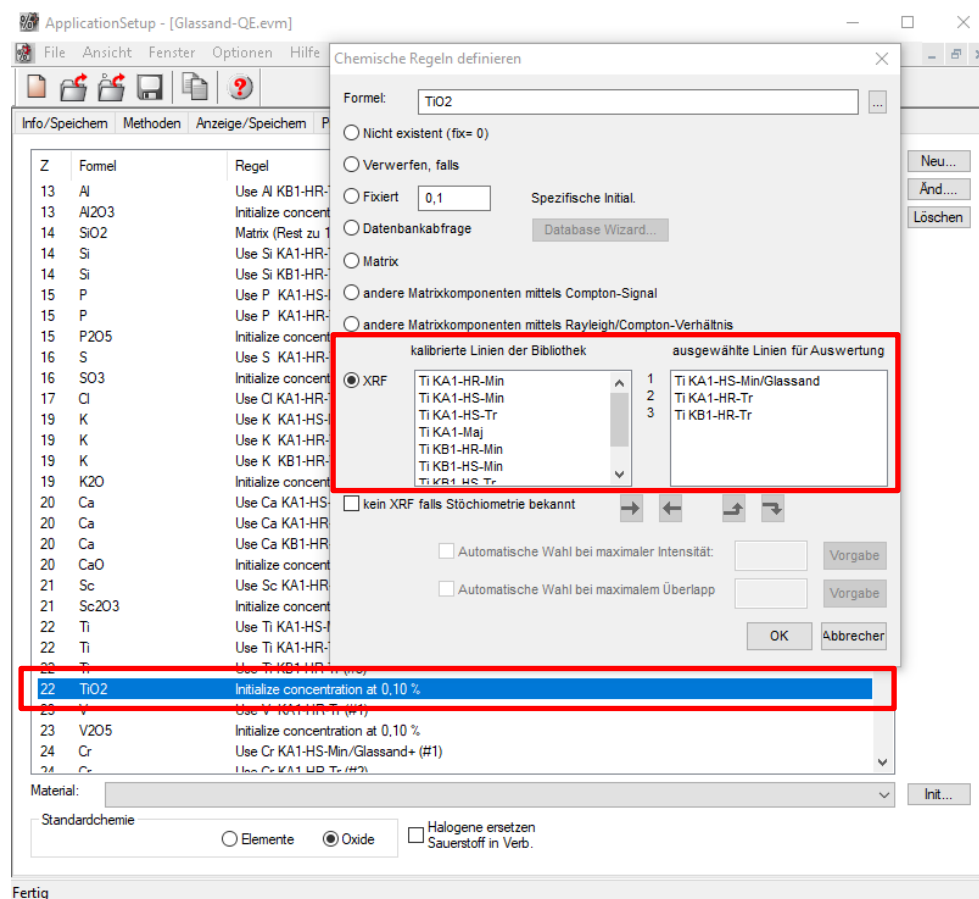
- QUANT-EXPRESS Messmethode kann erweitert werden
- Zusätzliche Linien müssen hinzugefügt werden

03 – Kalibrierte Linien zu QUANT-EXPRESS hinzufügen

Kalibrierte Linie einer QUANT-EXPRESS Messmethode hinzufügen

- QUANT-EXPRESS Messmethode kann erweitert werden
- Zusätzliche Linien müssen hinzugefügt werden

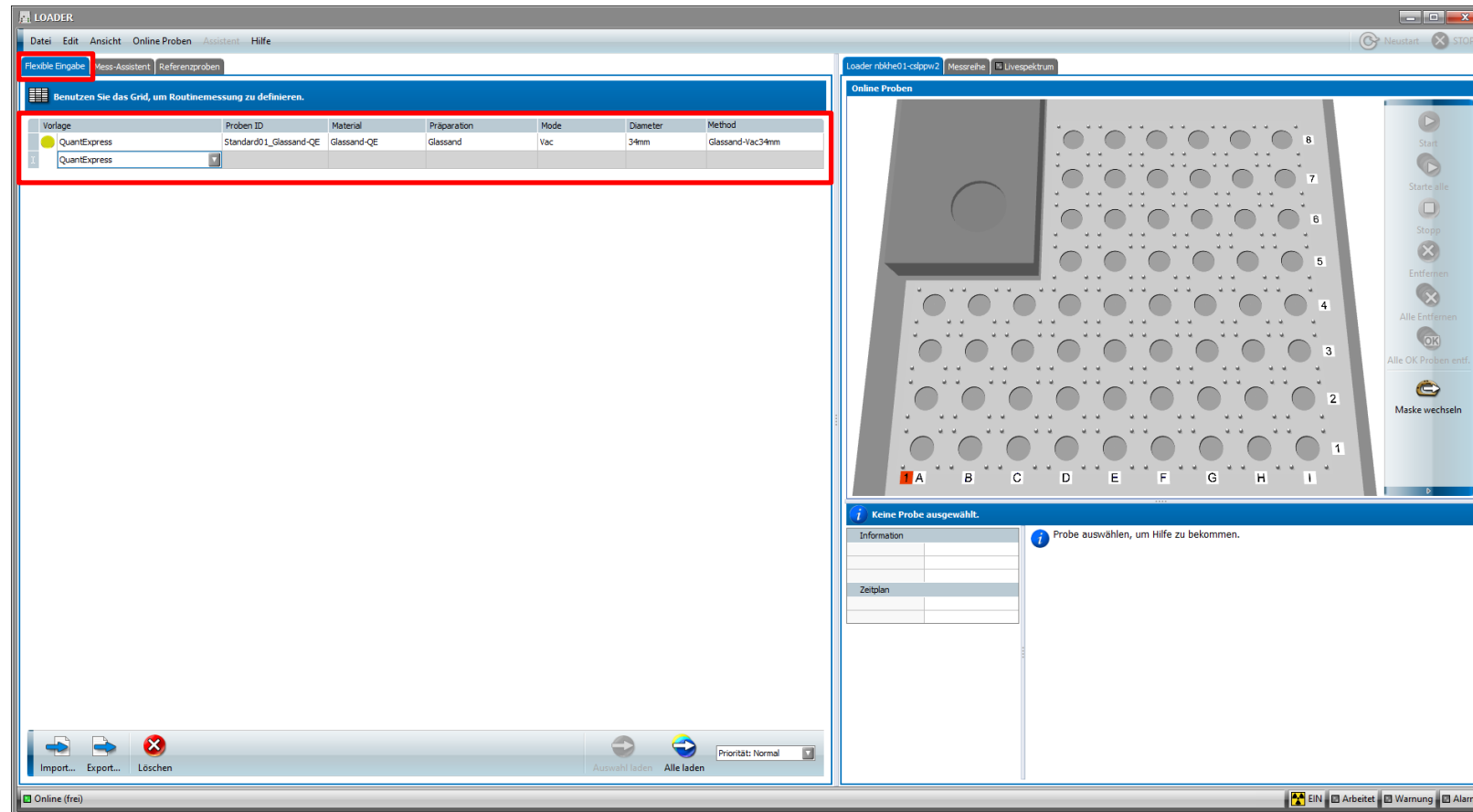
03 – Kalibrierte Linien zu QUANT-EXPRESS hinzufügen QUANT-EXPRESS Auswertemodell anpassen



- Auswertemodell kopieren und im *ApplicationSetup* editieren
- Chemische Regeln erweitern oder anpassen
- Linie zur Auswertung hinzufügen und die Priorität anpassen

03 – Kalibrierte Linien zu QUANT-EXPRESS hinzufügen

Adaptierte QUANT-EXPRESS-Methode über den Loader starten



1. QuantExpress-Eingabeschema wählen
 2. Probendetails einfügen
 3. Adaptierte Messmethode und das neue Auswertemodell auswählen
- Beispiel:
Glassand-QE
Glassand-Vac34mm

03 – Kalibrierte Linien zu QUANT-EXPRESS hinzufügen Spektren & Auswertungen in Eval2 überprüfen

Eval2 - [Quant] - [Standard01_Glassand-QE]

File Ansicht Quanti Fenster Werkzeuge Hilfe

Aktive Probe: Standard01_Glassand-QE

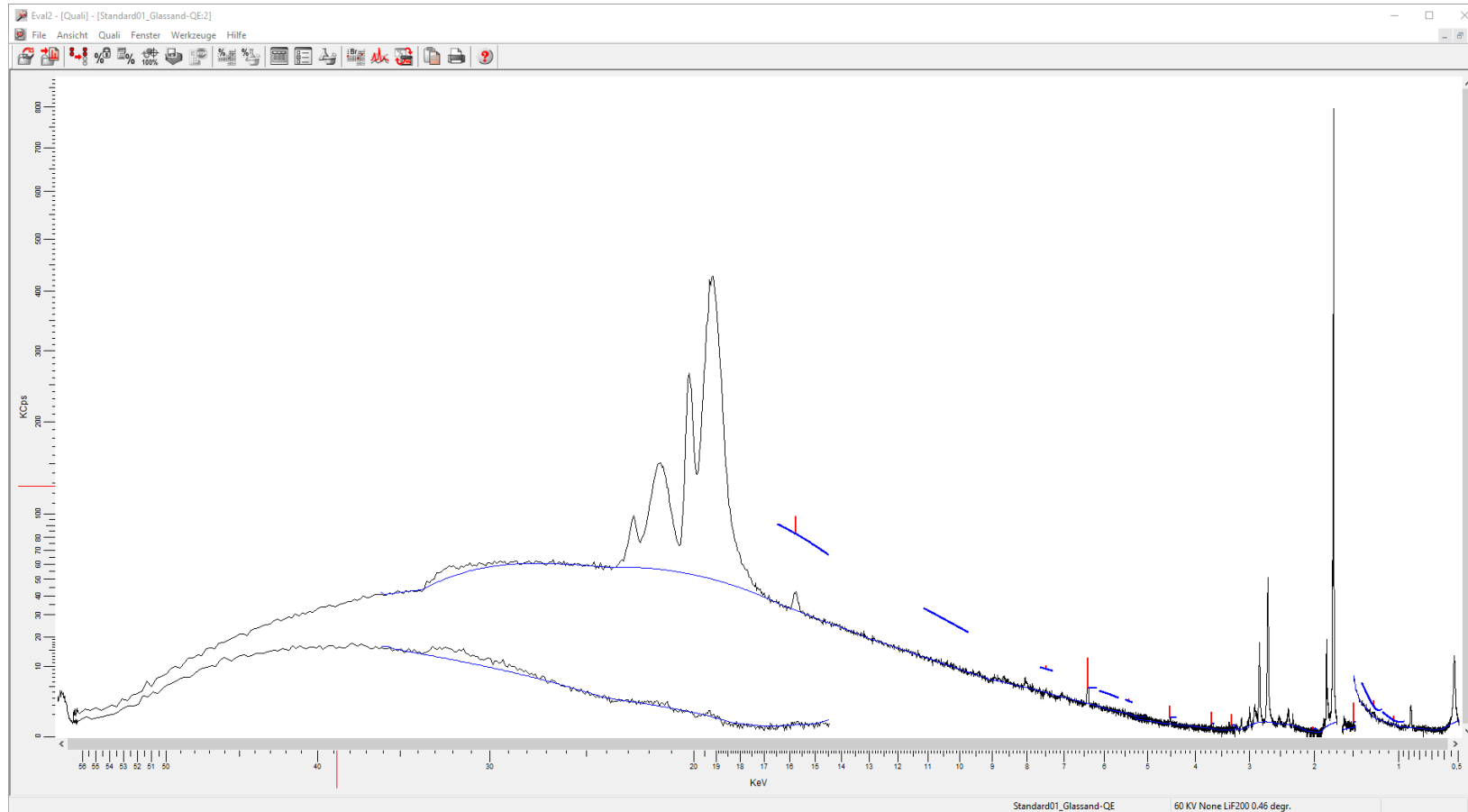
Summe: 100 % Compton 97 %

Formel	Z	Konzent...	Status	Linie 1	Netto Int.	Ber. Kon...	Stat. Fe...	NWG	Sättigun...	Linie 2	Netto Int.	Ber. Kon...	Stat. Fe...	NWG	Sättigun...	Linie 3	Netto Int.	Ber. Kon...	Stat. Fe...	NWG	Sättigun...			
SiO2	14	99,6 %	Matrix	Si KA1-HR-Tr	796,2	95,62	0,201 %	691,3 PPM	20,9 um	Si KB1-HR-Tr/Ox	18,98	115	1,31 %	1,22 %	24,3 um									
Al2O3	13	0,111 %	RFA 1	Al KA1-HS-Min/Glassand	1,932	0,111	0,860 %	14,4 PPM	13,6 um	Al KA1-HR-Tr	0,8599	0,12	7,33 %	284,5 PPM	13,6 um	Al KB1-HR-Tr/Ox	0,1165	1,4	78,2 %	2,03 %	15,3 um			
SO3	16	603 PPM	RFA 1	S KA1-HR-Tr	0,7777	0,080	8,29 %	180,1 PPM	20,8 um															
Cs2O	55	522 PPM	RFA 1	Cs KA1-HR-Tr	5,228	0,052	11,6 %	314,9 PPM	4,7 cm	Cs LA1-HR-Tr	0,02834	0,003	153 %	217,2 PPM	118 um	Cs LB1-HR-Tr	0,04772	0,007	263 %	385,9 PPM	146 um			
TiO2	22	267 PPM	RFA 1	Ti KA1-HS-Min/Glassand	1,126	0,0267	1,46 %	8,1 PPM	136 um	Ti KA1-HR-Tr	0,6437	0,026	10,1 %	98,7 PPM	136 um	Ti KB1-HR-Tr	0,1847	0,047	33,5 %	771,8 PPM	176 um			
Fe2O3	26	246 PPM	RFA 1	Fe KA1-HS-Min/Glassand	7,714	0,02457	0,540 %	3,7 PPM	0,38 mm	Fe KA1-HR-Tr	4,286	0,0273	3,91 %	40,8 PPM	0,38 mm	Fe KB1-HR-Tr	0,7268	0,024	20,9 %	253,7 PPM	0,50 mm			
Na2O	11	223 PPM	RFA 1	Na KA1-HS-Min/Glassand	0,3288	0,0223	3,59 %	19,2 PPM	5,2 um	Na KA1-HR-Tr	0,03142	0,009	359 %	683,2 PPM	5,2 um									
CaO	20	211 PPM	RFA 1	Ca KA1-HS-Min/Glassand	0,8851	0,0211	1,42 %	6,0 PPM	78 um	Ca KA1-HR-Tr	0,4691	0,022	10,5 %	79,2 PPM	78 um	Ca KB1-HR-Tr	0,02872	0,010	335 %	810,9 PPM	98 um			
K2O	19	143 PPM	RFA 1	K KA1-HS-Min/Glassand	0,7206	0,0143	1,55 %	4,0 PPM	58 um	K KA1-HR-Tr	0,4289	0,020	26,3 %	63,0 PPM	58 um	K KB1-HR-Tr	0,04023	0,016	183 %	559,8 PPM	72 um			
MgO	12	112 PPM	RFA 1	Mg KA1-HS-Min/Glassand	0,8058	0,0112	2,62 %	13,8 PPM	8,5 um	Mg KA1-HR-Tr	0,3267	0,036	24,2 %	418,8 PPM	8,5 um									
ZrO2	40	61,5 PPM	RFA 1	Zr KA1-HS-Min/Glassand+	14,97	0,0062	0,900 %	1,2 PPM	5,7 mm	Zr KA1-HR-Tr	9,994	0,0059	4,90 %	14,9 PPM	5,7 mm	Zr KB1-HR-Tr	11,50	0,035	12,2 %	106,3 PPM	8,0 mm			
P2O5	15	54,8 PPM	RFA 1	P KA1-HS-Min/Glassand	0,09067	0,005	6,43 %	8,7 PPM	14,8 um	P KA1-HR-Tr	0,04751	0,006	116 %	144,4 PPM	14,8 um									
Ru	44	50,2 PPM	RFA 1	Ru KA1-HR-Tr	0,4283	0,005	19,5 %	48,4 PPM	10,5 mm	Ru KB1-HR-Tr	0,5501	0,029	54,8 %	329,9 PPM	15,1 mm									
CuO	29	49,6 PPM	RFA 1	Cu KA1-HR-Tr	1,944	0,005	10,0 %	24,1 PPM	0,74 mm	Cu KB1-HR-Tr	0,7806	0,010	26,8 %	141,9 PPM	1,00 mm	Cu LA1-HR	-0,00019	-0,000		0,169 %	3,9 um			
MoO3	42	34,7 PPM	RFA 1	Mo KA1-HR-Tr	5,704	0,003	23,6 %	19,6 PPM	7,8 mm	Mo KB1-HR-Tr	162,4	0,479	1,42 %	94,4 PPM	11,1 mm	Mo LA1-HR-Tr	0,00217	-0,002	4590 %	392,0 PPM	20,5 um			
Cr2O3	24	23,8 PPM	RFA 1	Cr KA1-HS-Min/Glassand+	0,2806	0,0024	5,86 %	3,3 PPM	230 um	Cr KA1-HR-Tr	0,1069	0,002	196 %	61,1 PPM	230 um	Cr KB1-HR-Tr	0,1008	0,007	254 %	396,8 PPM	0,30 mm			
NiO	28	17,0 PPM	RFA 1	Ni KA1-HS-Min/Glassand+	1,023	0,0017	4,32 %	1,6 PPM	0,59 mm	Ni KA1-HR-Tr	0,4614	0,001	89,0 %	22,2 PPM	0,59 mm	Ni KB1-HR-Tr	0,05559	0,001	830 %	136,6 PPM	0,80 mm			
PbO	82	6,80 PPM	RFA 1	Pb LA1-HS-Min/Glassand+	0,3784	0,001	20,0 %	2,7 PPM	1,66 mm	Pb LB1-HR-Tr	0,3626	0,001	94,7 %	38,6 PPM	2,85 mm	Pb LA1-HR-Tr	0,1889	0,000	352 %	36,5 PPM	1,66 mm			
Hg	80	3,14 PPM	RFA 1	Hg LA1-HS-Min/Glassand+	0,1437	0,000	34,1 %	2,6 PPM	1,40 mm	Hg LA1-HR-Tr	0,3125	0,001	78,4 %	42,3 PPM	1,40 mm	Hg LB1-HR-Tr	-0,1952	-0,001		56,9 PPM	2,34 mm			

Fertig Original-Verbindung

- Neue Linien mit Priorität ausgewertet (RFA1/Linie 1)
- Umschalten auf andere Auswertemodelle möglich

03 – Kalibrierte Linien zu QUANT-EXPRESS hinzufügen Spektren & Auswertungen in Eval2 überprüfen



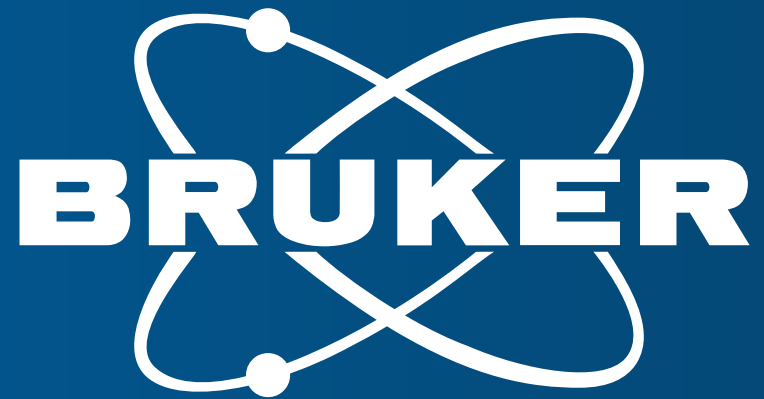
- Neben den erwarteten QUANT-EXPRESS-Scanbereichen, werden auch die Peak/Untergrund-Messungen der hinzugefügten Linien zu sehen sein

04 – Zusammenfassung

- QUANT-EXPRESS erlaubt die nahtlose Integration von quantitativen und semi-quantitative Methoden
- Ermöglicht eine höhere analytische Flexibilität für komplexere Applikationen
- Kalibrierte/quantitative Methoden können informativ mit semi-quantitativen Ergebnissen ergänzt werden
- QUANT-EXPRESS kann für bestimmte Applikationen verbessert werden, während die höchste Flexibilität eines universellen analytischen Fingerabdrucks erhalten bleibt

- Detaillierte Anleitung verfügbar: <https://fileshare-nano.bruker.com/s/CSjxaaJEsgFMa57>





Innovation with Integrity