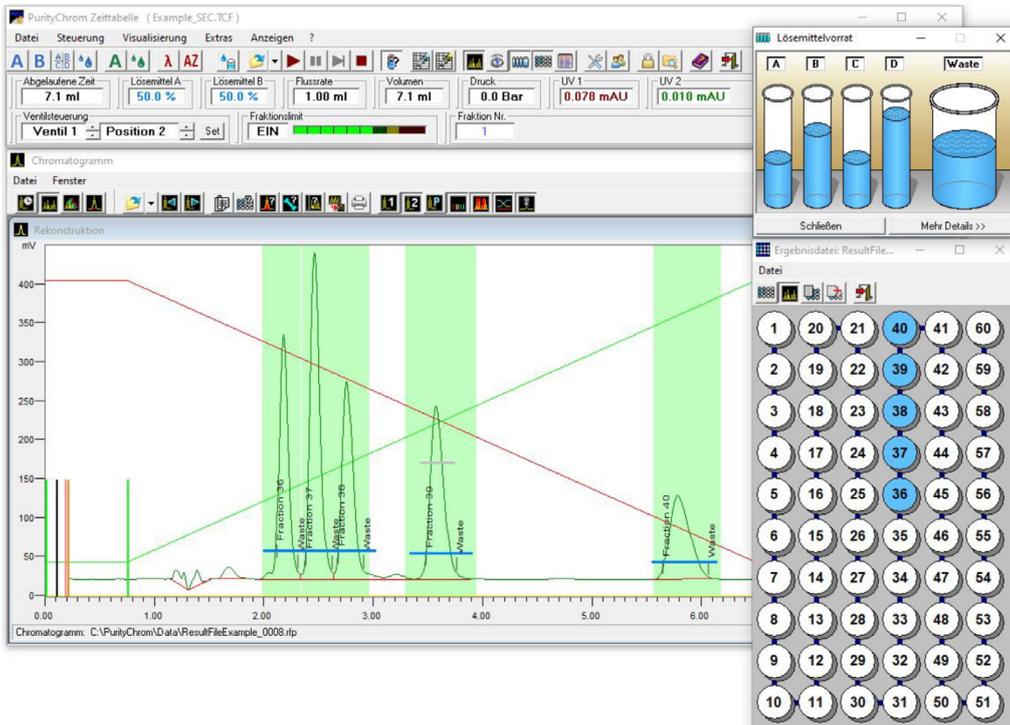


PurityChrom®

Version 5.9.1xx
Software Anleitung





Hinweis: Lesen Sie zu Ihrer eigenen Sicherheit die Betriebsanleitung und beachten Sie die Warn- und Sicherheitshinweise auf dem Gerät und in der Betriebsanleitung. Bewahren Sie die Betriebsanleitung zum späteren Nachschlagen auf.



Hinweis: Wenn Sie eine Version dieser Betriebsanleitung in einer weiteren Sprache wünschen, senden Sie ihr Anliegen und die entsprechende Dokumenten-Nummer per E-Mail oder Fax an KNAUER.

**Technische
Kundenbetreuung:**

Haben Sie Fragen zur Installation oder zur Bedienung Ihres Gerätes oder Ihrer Software?

Ansprechpartner in Deutschland, Österreich und der Schweiz:

Telefon: +49 30 809727-111 (9-17h MEZ)

Fax : +49 30 8015010

Email: support@knauer.net

Ansprechpartner weltweit:

Bitte kontaktieren Sie Ihren lokalen KNAUER Partner:

www.knauer.net/de/Support/Handler-weltweit

Herausgeber:

KNAUER Wissenschaftliche Geräte GmbH

Hegauer Weg 38

14163 Berlin

Telefon: +49 30 809727-0

Fax: +49 30 8015010

Internet: www.knauer.net

E-Mail: info@knauer.net

Versionsinformation:

Dokument Nummer: V2650

Versionsnummer: 5.0

Datum der Veröffentlichung: 04.02.2021

Originalausgabe

Technische Änderungen vorbehalten.

Die aktuellste Version der Betriebsanleitung finden Sie auf unserer Homepage: www.knauer.net/bibliothek.



Nachhaltigkeit:

Die gedruckten Versionen unserer Betriebsanleitungen werden nach Standards des Blauen Engels gedruckt (www.blauer-engel.de/uz195).

Copyright:

Dieses Dokument enthält vertrauliche Informationen und darf ohne schriftliches Einverständnis von KNAUER Wissenschaftliche Geräte GmbH nicht vervielfältigt werden.

© KNAUER Wissenschaftliche Geräte GmbH 2021

Alle Rechte vorbehalten.

Inhaltsverzeichnis

1. Informationen zum Produkt	1
1.1 Vorgesehene Verwendung	1
1.2 Unterstützte Instrumente	2
2. Installation	3
2.1 PC-Anforderungen	3
2.2 Auswahl der Sprache	3
2.3 Installation und Benutzung unter Windows	3
2.4 Energiesparende Funktionen	4
3. Hauptfenster	5
3.1 Allgemein	5
3.2 Funktionstasten	6
3.3 Anzeigen	10
4. Programm-Einstellungen (Setup)	12
4.1 Kommunikation	12
4.2 Voreinstellungen	13
4.3 Fraktionsbegrenzer (Limiter)	14
4.4 Beschriftung	16
4.5 Beschreibungen	17
4.6 Benutzerdefinierter Kanal	18
4.7 Totzeit/Totvolumen	19
4.8 Ventileinschränkungen	20
4.9 Alarmausgänge	20
4.10 Programmfarben	21
5. Benutzerverwaltung	22
5.1 Allgemein	22
5.2 Arbeiten ohne Benutzerverwaltung	22
5.3 So aktivieren Sie die Benutzerverwaltung	22
5.4 Hinzufügen eines Benutzers	23
5.5 Zurücksetzen eines Passworts	24
5.6 Gescheiterte Versuche zurücksetzen	24
5.7 Anmeldung für Benutzer	25

5.8	Gesperrtes Konto	26
5.9	Drucken der Benutzerverwaltung	26
5.10	Funktionsschaltflächen im Audit-Trail-Fenster	26
6.	Erstellen von Zeittabellen	27
6.1	Allgemein	27
6.2	Erstellen einer Zeittabelle	28
6.2.1	Speicherung von allgemeinen Informationen	30
6.2.2	Erstellung einer Checkliste	31
6.2.3	Variablen in Zeittabellen	32
6.2.4	Optionen	33
6.2.5	Optionen für den Ausdruck	34
6.2.6	Einstellungen für Diodenarray-Detektoren (DAD)	35
6.2.7	Funktionen der Zeittabelle	35
6.3	Verwendung der AZURA®-Pumpe P 6.1L (Version mit Hochdruckgradient)	39
6.4	Fraktionierung mit einem Fraktionssammler	39
6.5	Fraktionieren mit einem Multipositionsventil	40
6.6	Programmieren von Schwellwerten	42
6.7	Schwellwert Programmierung mit logischen Verknüpfungen	44
6.8	Programmierung der Spitzenabtastung	46
6.9	Grafischer Editor für eine Zeittabelle	48
7.	Erstellen von Sequenztabellen	51
7.1	Allgemein	51
7.2	Erstellen einer Sequenztabelle	51
7.3	Ausführung einer Sequenztabelle	53
8.	Erstellen von Probengebertabellen	54
8.1	Allgemein	54
8.2	Erstellen einer Probengebertabelle	57
8.3	Gestapelte Injektion (Stacked Injection)	59
8.4	Erstellen einer Probenbezeichnungstabelle	61
9.	Visualisierung der Ablauftabelle	63
10.	Datenaufzeichnung (Analyse)	64
10.1	Allgemein	64
10.2	Funktionstasten	65
10.3	Statusleiste	67

10.4	Datenkanal-Einstellungen	67
11.	Darstellung von Chromatogrammen (Rekonstruktion)	70
11.1	Allgemein	70
11.2	Funktionstasten	71
12.	Vergleich von Chromatogrammen	74
12.1	Allgemein	74
12.2	Funktionstasten	75
13.	Reintegration von Chromatogrammen	76
13.1	Allgemein	76
13.2	Funktionstasten	77
14.	System-Visualisierung	80
14.1	Allgemein	80
14.2	Funktionen zur Systemvisualisierung	81
14.3	Erstellen einer Systemvisualisierung	81
15.	Anzeige des Lösungsmittelvorrats	84
15.1	Allgemein	84
15.2	Visualisierung von Lösungsmitteln	84
15.3	Einstellungen für die Anzeige der Lösungsmittelzufuhr	85
16.	Abfallverwaltung	86
16.1	Allgemein	86
16.2	Anzeigen	86
16.3	Wie man die Abfallverwaltung nutzt	86
17.	Rack-Anzeige des Fraktionssammlers (Fraktionsrack)	88
17.1	Allgemein	88
17.2	Funktionen des Fraktionsrack-Fensters	89
17.3	Fraktionstabelle	90
17.4	Einrichtung des Fraktionsracks	90
18.	RID 2.1L Einrichtung	94
19.	Steuerung von Massenspektrometern	96
19.1	Allgemein	96
19.2	Steuerung des 4000 MiD / MIDAS-Spektrometers	96
19.2.1	Funktionstasten	97

19.2.2	Anzeigen	98
	Status-Anzeigen	98
19.2.3	4000 MiD / MIDAS Einrichtung	98
	Midas-Einrichtung	98
	Einrichtung des Spektrometers	99
	Massenspektrometer-Parameter in der Zeittabelle	100
20.	Steuerung von Heizgeräten	101
20.1	CT 2.1	101
20.2	Memmert UN 55-Ofen	101
21.	Event-Box	102
21.1	Manuelle Steuerung der Event Box	102
21.1.1	Eventbox-Eingang	102
21.1.2	Eventbox-Ausgang	103
22.	Fehlerbehebung	104
22.1	Fehlermeldung Lampenlebensdauer	104
22.2	Kommunikationsfehler „Interface sends an error“	105
23.	Anhang	107
23.1	Die Einträge in der Datei PurityChrom.ini	107
23.2	PurityChromfile-Typen	121
23.3	Kombination von Autosampler Tray-Typen	122

1. Informationen zum Produkt

1.1 Vorgesehene Verwendung

PurityChrom® ist eine Chromatografie-Daten- und Steuerungssoftware, die speziell für den Bereich der Biochromatografie-Anwendung entwickelt wurde. Durch seine überlegene Flexibilität und den modularen Aufbau kann das Programm an das System jedes Anwenders angepasst werden. PurityChrom hat die zusätzlichen Vorteile einer klar strukturierten Oberfläche und eines benutzerfreundlichen Methodenaufbaus.

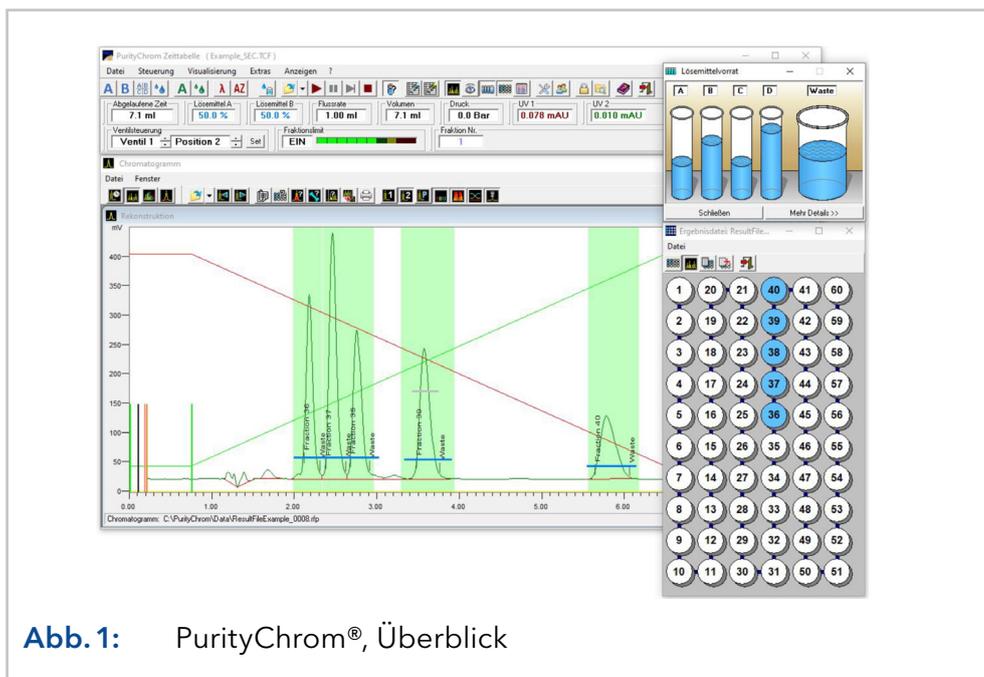


Abb. 1: PurityChrom®, Überblick

Das Programm ermöglicht die isokratische Elution von bis zu vier Lösungsmitteln, Gradientenprogrammierung und Gradientenunterstützung. Schaltventile und Fraktionssammler können durch Zeit, Schwellwerte oder automatische Peak-Probenahme gesteuert werden. Zeittabellen-Steuerdateien können in Zeiteinheiten, Einheiten des Volumens des unterstützten Lösungsmittels oder in Einheiten des Säulenvolumens programmiert werden.

Der gesamte Lauf wird in einem Visualisierungsdiagramm des Systems, das individuell formatiert werden kann, und in einer Zeittabelle dargestellt, die jederzeit den aktuellen Stand anzeigt.

Die Anzeigeeinstellungen und Funktionsschaltflächen im Hauptfenster können vom Benutzer personalisiert werden.

Die Bildschirmtasten ermöglichen die manuelle Steuerung der Pumpen, des Detektors und der Ventile.

Die Systemvisualisierung und der grafische Zeitsteuerungseditor ermöglichen die grafische Darstellung und einfache Handhabung der komplexen Ablaufprozesse. Darüber hinaus kann jedes Gerät, das im strömungstechnischen Schema angezeigt wird, manuell angesteuert werden, so dass Sie die Möglichkeit haben, Ihre Bedingungen während des Laufs spontan zu optimieren und zu verändern bzw. anzupassen.

Zusätzlich gibt es auch die Möglichkeit, die Methode während des Laufs zu pausieren, da die *HOLD* Funktion Ihnen die vollständige Kontrolle über Ihren Chromatografieprozess ermöglicht.

Die Lösungsmittelvisualisierung berechnet den Lösungsmittelverbrauch für den aktuellen Lauf und verhindert, dass Ihre Säule trocken läuft, während das Abfallmanagement den Verlust Ihrer Probe verhindert.

Die Ergebnisdaten eines Laufs umfassen alle aufgenommenen Chromatogramme mit Integrationsergebnissen, die Zeitkontrolltabellen, die Probengebertabelle, ein Protokoll des gesamten Laufs und eine Fraktionstabelle mit Verknüpfungen zum Fraktionsrack und den entsprechenden Chromatogrammen. Auf diese Weise ermöglicht PurityChrom dem Benutzer die Wiederherstellung aller relevanten Informationen, die zur Reproduktion des Laufs benötigt werden, allein aus den Ergebnisdaten.

1.2 Unterstützte Instrumente

Einen Überblick über die von PurityChrom unterstützten Instrumente finden Sie in der folgenden Liste: www.knauer.net/softwarecontrol

2. Installation

2.1 PC-Anforderungen

Anforderungen	
Betriebssysteme	Windows XP, Windows Vista, Windows 7, Windows 8, Windows 10 Als Betriebssystemsprachen werden nur Englisch und Deutsch getestet und unterstützt.
CPU/Speicher	Pentium III oder höher mit mindestens 1 GHz, mindestens 512 MB RAM (Windows XP) und 2 GB (Windows Vista und höher)
Netzwerk	Die zweite Netzwerkkarte ist für die Netzwerkintegration erforderlich.
Grafiken	Bildschirm mit minimaler Auflösung 1024 x 768
Anschlüsse und Steckplätze	USB für Lizenz-Dongle COM, USB oder LAN je nach angeschlossenen Geräten

2.2 Auswahl der Sprache

PurityChrom ist auf Englisch und Deutsch erhältlich. Einige Fehlermeldungen und Benachrichtigungen können unabhängig von der Sprachauswahl in Englisch angezeigt werden.

2.3 Installation und Benutzung unter Windows

Die Installation von PurityChrom in Verzeichnissen unter C:\Windows\ Programmdateien (oder C:\Windows\Programm) wird NICHT empfohlen, da der Schreibzugriff in diesen Verzeichnissen durch die Windows-Benutzerverwaltung eingeschränkt sein kann. Bitte verwenden Sie Installationspfade wie C:\PurityChrom oder D:\PurityChrom.

Während der Installation von PurityChrom sind Administratorrechte erforderlich, und die Einstellungen der Windows-Benutzerkontensteuerung sollten auf „Niemals benachrichtigen“ gesetzt werden, um die Benutzerkontensteuerung zu deaktivieren. Sie kann nach der Installation wieder aktiviert werden.

Der Benutzer benötigt Schreib- und Leseberechtigung für die Registrierung und die Ordner C:\Windows, C:\Puritychrom.

PurityChrom muss von den Microsoft Security Essentials ausgeschlossen werden. Außerdem sollten der Windows Defender und die Antiviren-Software deaktiviert werden.

Wenn Sie Windows 8 oder 10 verwenden, wird empfohlen, das Installations-Setup als Administrator auszuführen. Danach öffnen Sie den PurityChrom-Programmordner C:\PurityChrom\, klicken mit der rechten

Maustaste auf „PurityChrom.exe“ und wählen „Als Administrator ausführen“. Öffnen Sie einmal das „Communication Log“-Fenster und die „System Visualisierung“. Schließen Sie nun die Software.“

Falls Sie eine ältere Windows-Version nutzen, gehen Sie zu C:\PurityChrom und klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Datei PurityChrom.exe, um die Eigenschaften zu öffnen. Gehen Sie zu „Kompatibilität“ und markieren Sie „Dieses Programm im Kompatibilitätsmodus ausführen für“ und wählen Sie „Windows Vista (Service Pack 2)“. Aktivieren Sie danach „Dieses Programm als Administrator ausführen“. Klicken Sie auf „Übernehmen“ und „Ok“, dann schließen Sie das Fenster.

2.4 Energiesparende Funktionen

Das automatische Umschalten in den Energiesparmodus oder Ruhezustand muss deaktiviert werden, d.h. die Einstellungen für „Hardware ausschalten“, „Computer ausschalten“ oder „System Standby“ müssen in den Energieoptionen der Bedienfelder auf „Nie“ gesetzt werden.

3. Hauptfenster



Abb. 2: Hauptfenster

3.1 Allgemein

Das Hauptfenster besteht aus einer Symbolleiste mit Funktionsschaltflächen sowie einer Anzeigeleiste, in der die aktuellen Systemdaten angezeigt werden. Die Anordnung der Funktionsknöpfe und Anzeigen kann vom Benutzer personalisiert werden. Die Größe und Position des Fensters kann ebenfalls geändert werden und wird beim Beenden des Programms gespeichert.

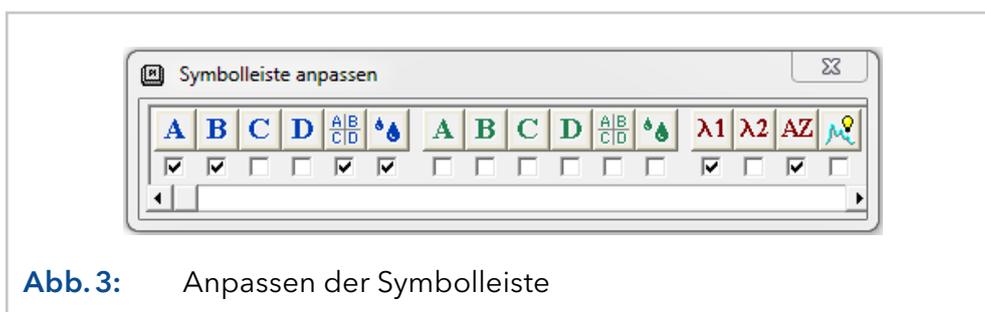


Abb. 3: Anpassen der Symbolleiste

Um Änderungen an der Symbolleiste vorzunehmen, doppelklicken Sie auf eine leere Stelle in der Symbolleiste. Die *SYMBOLLEISTE ANPASSEN* wird geöffnet, wo Sie Schaltflächen hinzufügen und entfernen können. Um eine Schaltfläche auszublenden, deaktivieren Sie das Kontrollkästchen darunter. Die Einstellungen werden gespeichert, wenn Sie das Programm beenden.

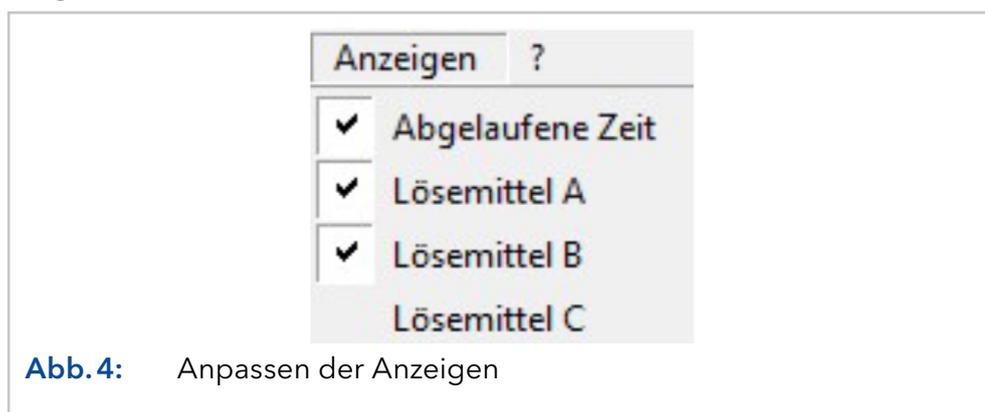


Abb. 4: Anpassen der Anzeigen

Um Anzeigen hinzuzufügen oder zu entfernen, wählen Sie die entsprechende Anzeige aus dem Menü *ANZEIGEN*. Die ausgewählten Anzeigen werden im Menü mit einem Häkchen versehen. Um die Anzeigefarbe zu ändern, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf eine Anzeige und wählen Sie die Menüoption *ANZEIGEFARBE BEARBEITEN*. Im nun erscheinenden Farbdiallog können Sie eine neue Farbe wählen.

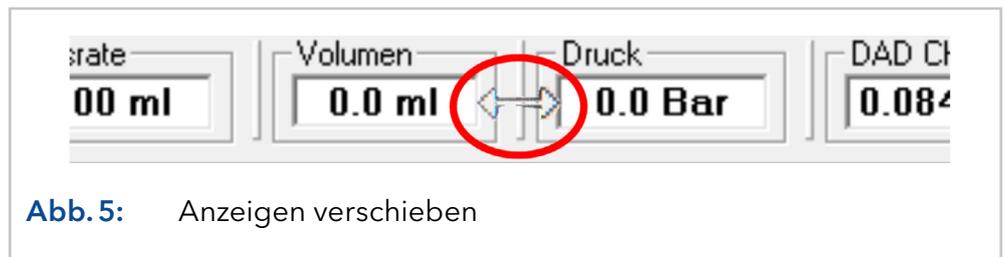


Abb. 5: Anzeigen verschieben

Um Anzeigen zu verschieben, klicken Sie auf die vertikale Linie vor der Anzeige und ziehen Sie sie an ihre neue Position. Wenn Sie eine Anzeige nach unten und aus dem Fenster herausziehen, erscheint eine neue Anzeigeleiste. Die Anordnung der Symbolleiste und der Anzeigenleiste wird beim Verlassen des Programms gespeichert und erscheint beim nächsten Öffnen des Programms wieder auf diese Weise.

3.2 Funktionstasten

Taste	Funktion
	<i>100% LÖSEMITTEL A HAUPTPUMPE</i> startet das Hauptpumpensystem mit 100% Eluent A und der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>100% LÖSEMITTEL B HAUPTPUMPE</i> startet das Hauptpumpensystem mit 100% Eluent B und der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>100% LÖSEMITTEL C HAUPTPUMPE</i> startet das Hauptpumpensystem mit 100% Eluent C und der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>100% LÖSEMITTEL D HAUPTPUMPE</i> startet das Hauptpumpensystem mit 100% Eluent D und der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>LÖSEMITTELZUSAMMENSETZUNG HAUPTPUMPE</i> startet das Hauptpumpensystem mit der im Fenster Lösemittelzusammensetzung angezeigten Lösemittelzusammensetzung und der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>FLUSSRATE HAUPTPUMPE</i> öffnet ein Fenster zur Anzeige der Flussrate. Eine Änderung der Flussrate startet die Pumpen nicht, aber sie wird sofort wirksam, wenn die Pumpen laufen.
	<i>100% LÖSEMITTEL A NEBENPUMPE</i> startet das Nebensystem mit 100% Eluent A und der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>100% LÖSEMITTEL B NEBENPUMPE</i> startet das Nebensystem mit 100% Eluent B und der aktuell eingestellten Flussrate.

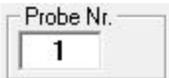
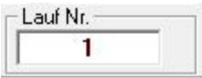
Taste	Funktion
	<i>100% LÖSEMITTEL C NEBENPUMPE</i> startet das Nebenspumpensystem mit 100% Eluent C und der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>100% LÖSEMITTEL D NEBENPUMPE</i> startet das Nebenspumpensystem mit 100% Eluent D und der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>LÖSEMITTELZUSAMMENSETZUNG NEBENPUMPE</i> startet das Nebenspumpensystem mit der im Fenster Lösemittelzusammensetzung angezeigten Lösemittelzusammensetzung und der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>FLUSSRATE NEBENPUMPE</i> öffnet ein Fenster zur Anzeige der Flussrate. Eine Änderung der Flussrate startet die Pumpen nicht, aber sie wird sofort wirksam, wenn die Pumpen laufen.
	<i>WELLENLÄNGE</i> öffnet ein Fenster, in dem Sie die Wellenlänge Ihres kontrollierten UV-Detektors eingeben können, die UV-Lampe kann ein-/ausgeschaltet und der Detektor kalibriert/validiert werden. Mit einem DAD können Sie die Wellenlänge nicht hier, sondern in der Zeittabelle (s. Kapitel 6.2.6 auf Seite 35) oder in der Chromatogrammansicht (Analysefenster) wählen.
	<i>AUTOZERO</i> (Nullabgleich) bringt einen seriell gesteuerten Detektor auf Null zurück Hinweis: Wenn am UV-Detektor (DAD /MWD) ein Leck festgestellt wird, kümmern Sie sich bitte um das Leck und setzen Sie den Fehler durch Drücken von Autozero zurück.
	<i>REFERENZSPEKTRUM</i> legt das aktuelle DAD-Spektrum als Referenzspektrum fest.
	<i>TEMPERATURSTEUERUNG</i> kann verwendet werden, um die Temperatur eines RID, Eluentenheizers oder Ofens einzustellen.
	<i>FRAKTIONSLIMIT</i> öffnet ein Fenster, in dem Sie das Maximalvolumen einer Fraktion eingeben können.
	<i>ZEITABELLE</i> oder <i>PROBENGEBERTABELLE LADEN</i> öffnet ein Auswahlfenster, in dem Sie eine Zeittabelle oder Probengebertabelle laden können. Im Feld Dateityp dieses Fensters können Sie entweder *.tcf (Zeittabelle) oder *.acf (Probengebertabelle) wählen. Wenn in der Zeittabelle die Option „Pumpen starten bei Laden der Zeittabelle“ gewählt ist, beginnen die Pumpen nach Beendigung des Ladevorgangs mit der Lösungsmittelzusammensetzung und Flussrate, die für den Zeitpunkt 0.00 Minuten programmiert wurden.

Taste	Funktion
	<i>ZEITTABELLE/PROBENGEBERTABELLE STARTEN</i> startet die geladene Zeittabelle oder Autosampler-Kontrolldatei. Wurde die Funktion Zeittabelle/Autosampler-Kontrolldatei halten zuerst ausgeführt, wird der Lauf fortgesetzt.
	<i>ZEITTABELLE ODER PROBENGEBERTABELLE ANHALTEN</i> hält den Zeitablauf einer Zeittabelle oder Probengebortabelle an. Wenn in der Zeittabelle die Option „Pumpen stoppen bei Funktion Hold“ gewählt ist, haben die Pumpen eine Flussrate von 0 ml. Während die Funktion Halten aktiviert ist, kann die Flussrate der Pumpen mit der Funktion Flussrate manuell eingestellt werden. Die Zeittabelle oder die Autosampler-Steuerdatei starten setzt den Lauf zu dem Zeitpunkt fort, an dem er angehalten wurde.
	<i>ZUR NÄCHSTEN ZEILE SPRINGEN</i> springt in der Zeit vorwärts zur nächsten in der Zeittabelle programmierten Zeile. Wenn Sie diese Funktion zum ersten Mal verwenden, müssen Sie sie in einem Dialogfeld bestätigen, aber es ist hier möglich, die Option Nicht mehr nachfragen zu wählen, um dieses Feld in Zukunft nicht mehr zu sehen.
	<i>ALLES STOPPEN</i> stoppt die Pumpen und die Zeittabelle. Es ist nicht möglich, den Lauf an dem Punkt fortzusetzen, an dem er angehalten wurde.
	Mit <i>MANUELLE PROBENBEZEICHNUNG</i> können Sie beim Start einer Zeittabelle eine Probenkennung eingeben. Diese Option ist bei der Ausführung einer Probengebortabelle nicht möglich, da die Probenbezeichnung aus der zugehörigen Probengebortabelle-Datei abgeleitet wird.
	<i>ZEITTABELLEN ERSTELLEN/BEARBEITEN</i> öffnet den Zeittabelleneditor zum Erstellen oder Bearbeiten einer Zeittabelle. Für detaillierte Anweisungen (s. Kapitel 6 auf Seite 27).
	<i>SEQUENZTABELLE ERSTELLEN/BEARBEITEN</i> öffnet und steuert die Sequenztable. Für detaillierte Anweisungen (s. Kapitel 7 auf Seite 51).
	<i>PROBENGEBERTABELLEN ERSTELLEN / BEARBEITEN</i> öffnet den Editor zum Erstellen oder Bearbeiten einer Autosampler-Steuerdatei.
	<i>CHROMATOGRAMM</i> öffnet das Chromatogrammfenster mit den Fenstern Analyse, Rekonstruktion, Vergleich und Integration.
	<i>PEAKERKENNUNG</i> öffnet das Fenster zur Anzeige der automatischen Peak-Abtastung.

Taste	Funktion
	<i>SYSTEM</i> öffnet das Systemvisualisierungsfenster.
	<i>LÖSEMITTELVORRAT</i> öffnet das Fenster mit der Anzeige des Lösemittelvorrats.
	<i>ABFALLVERWALTUNG</i> öffnet das Fenster mit der Anzeige der Abfallwirtschaft.
	<i>FRAKTIONSRACK</i> öffnet das Fenster mit der Visualisierung des Fraktionsracks.
	<i>EVENT BOX</i> öffnet das Fenster mit der Visualisierung und manuellen Steuerung der Event Box.
	<i>ABLAUFTABELLE</i> öffnet das Fenster mit den Visualisierungen der Zeittabelle und der Probengebertabelle in Tabellenform.
	<i>EINSTELLUNGEN</i> öffnet das Setup-Fenster, in dem Kommunikationseinstellungen, Geräteparameter und Gerätebeschreibungen etc. eingestellt werden können.
	<i>BENUTZERVERWALTUNG</i> öffnet das Fenster der Benutzerverwaltung.
	Die <i>PROGRAMMSPERRE</i> ermöglicht es Ihnen, das Programm zu sperren. Nach der Aktivierung erscheint auf der Taskleiste ein Fenster zur Deaktivierung der Tastensperre, das das Programm nach Eingabe des Benutzerkennworts entsperrt. Das Anfangskennwort nach der Installation lautet SCPA.
	<i>KOMMUNIKATIONSPROTOKOLL</i> öffnet ein Terminalfenster, das die serielle Kommunikation anzeigt, in dem Sie Eingaben in verknüpften Schnittstellen vornehmen können.
	<i>AKTUELLEN DATENORDNER ÖFFNEN</i> öffnet ein Windows Explorer-Fenster, das den Inhalt des aktuellen Arbeitsordners anzeigt.
	<i>HANDBUCH</i> öffnet die Online-Hilfe des Programms. Für weitere Hilfe verwenden Sie das Handbuch.
	<i>BEENDEN</i> beendet das Programm.

3.3 Anzeigen

Anzeige	Bedeutung
	<p><i>ABGELAUFENE ZEIT/ ABGELAUFENES SÄULENVOLUMEN</i> zeigt die verstrichene Zeit oder das verstrichene Volumen in einer Zeittabelle an. Wenn sich die Zeittabelle auf HALTEN befindet, dann blinkt die Anzeige zwischen der verstrichenen Zeit und <i>ANGEHALTEN</i>. Während der Injektionsphase steht die Anzeige auf <i>INJEKTION</i>. Nach dem Zeittabellenbefehl <i>WARTEN AUF EINGANGSSIGNAL</i> blinkt die Anzeige zwischen der verstrichenen Zeit und <i>WARTE</i>.</p>
	<p><i>LÖSEMITTEL A</i> zeigt den aktuellen Prozentsatz des gepumpten Eluenten A an.</p>
	<p><i>LÖSEMITTEL B</i> zeigt den aktuellen Prozentsatz des gepumpten Eluenten B an.</p>
	<p><i>LÖSEMITTEL C</i> zeigt den aktuellen Prozentsatz des gepumpten Eluenten C an.</p>
	<p><i>LÖSEMITTEL D</i> zeigt den aktuellen Prozentsatz des gepumpten Eluenten D an.</p>
	<p><i>PUMPENSTATUS</i> zeigt den aktuellen Pumpenstatus an. <i>EIN</i> = Pumpe läuft, <i>AUS</i> = Pumpe wurde angehalten.</p>
	<p><i>FLUSSRATE</i> zeigt die aktuelle Flussrate der Pumpe an.</p>
	<p><i>VOLUMEN</i> gibt das seit Beginn des Pumpens durchgepumpte Volumen an. Wenn die Pumpe gestoppt wird, kehrt die Volumenanzeige auf 0 zurück. Je nach gepumptem Volumen wechselt die Anzeigeeinheit automatisch von µl über ml auf l.</p>
	<p><i>FLUSSRATE NEBENPUMPE</i> zeigt die aktuelle Flussrate der Nebenpumpe an.</p>
	<p><i>DRUCK NEBENPUMPE</i> gibt den aktuellen Druck der Nebenpumpe an.</p>
	<p><i>DRUCK</i> gibt den aktuellen Pumpendruck an. Sie können den Anzeigewert im Setup unter <i>VOREINSTELLUNGEN</i> mit Hilfe eines Offsets und eines Faktors ändern.</p>

Anzeige	Bedeutung
	<p><i>FRAKTION NR.</i> zeigt die aktuelle Position des Fraktionssammlers an.</p>
	<p><i>FRAKTIONSLIMIT</i> zeigt den Status des Fraktionsbegrenzers an. <i>OFF</i> = Limiter ist inaktiv, <i>ON</i> = Limiter ist aktiv. Die LED-Bandanzeige zeigt das gepumpte Volumen der aktuellen Fraktion in Schritten von 10% an. Wenn die letzte rote LED aufleuchtet (100%), löst der Limiter einen Schritt im Fraktionssammler aus.</p>
	<p><i>VENTILSTEUERUNG</i> zeigt die aktuelle Position des ausgewählten Ventils an und ist auch eine Möglichkeit, das Ventil manuell zu schalten. Wählen Sie dazu das gewünschte Ventil und die gewünschte Position aus und ändern Sie die Position mit der Taste <i>SET</i>.</p>
	<p><i>PROBE NR.</i> gibt die aktuelle Vialnummer der aktuellen Autosampler-Injektion an.</p>
	<p><i>LAUF NR.</i> zeigt die Nummer des aktuellen Laufs an.</p>
	<p><i>CHANNEL 1 - CHANNEL ...</i> zeigen die Werte des an jedem Analoingang angeschlossenen Gerätes an. Im Analysefenster können Sie unter <i>KANALEINSTELLUNG</i> die Anzeigen für jedes Gerät unter Verwendung eines Versatzes, eines Faktors und einer Dimension ändern.</p>

4. Programm-Einstellungen (Setup)

Der Funktionsknopf oder die Menüoption *EINSTELLUNGEN*  im Hauptfenster öffnet das Fenster mit den Programmeinstellungen. Das Fenster enthält 8 Registerkarten, deren Inhalt nachfolgend beschrieben wird. Alle vorgenommenen Einstellungen zur Konfiguration können Sie im Menü *DATEI* vor dem Schließen des Fensters sichern.

4.1 Kommunikation

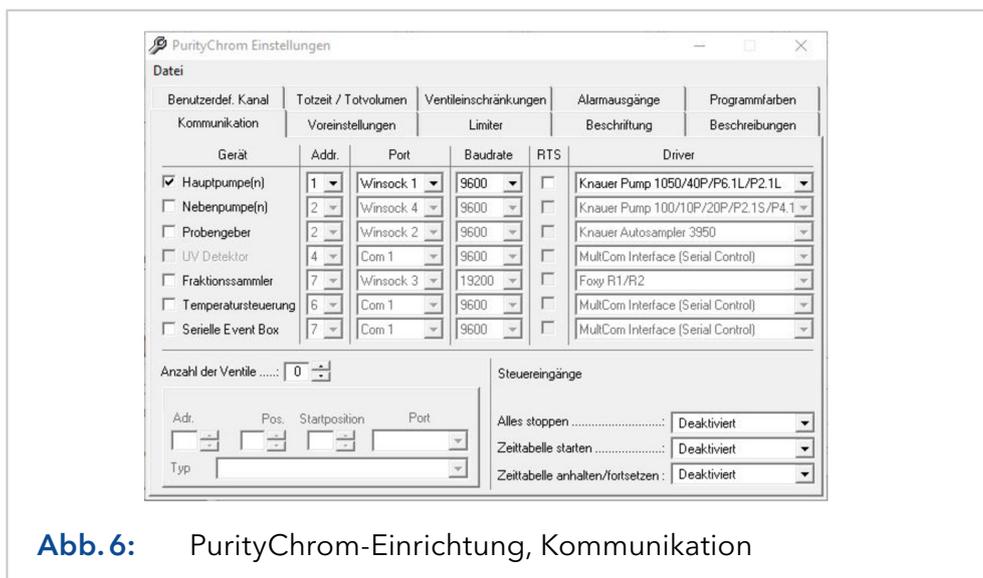


Abb. 6: PurityChrom-Einrichtung, Kommunikation

Die Registerkarte Kommunikation wird zur Konfiguration der seriellen und LAN-Steuerschnittstellen und Ventile Ihres Systems verwendet. Die Basislizenz umfasst eine maximale Anzahl von acht Geräten, die über LAN (Local Area Network) oder RS-232 verbunden sind, und keine automatische Einspeisung. Jedes Modul in einem Assistenten zählt als ein Gerät. Die Voll-Lizenz hat keine Beschränkungen in der maximalen Anzahl von Geräten und ein Autosampler ist enthalten.

ADDR.: Unter *ADRESSE* können Sie die serielle oder LAN-Adresse einstellen, die für die MultiCom-Schnittstellen mit Hilfe des runden Codierschalters eingestellt wird.



Hinweis: Ändern Sie die Adresse nicht.

PORT: Unter *PORT* können Sie den seriellen Port oder Winsock-Port wählen, an den jede Schnittstelle angeschlossen ist.

DRIVER: Unter *DRIVER* können Sie den Treiber für Ihre angeschlossene Schnittstelle auswählen. Sie dürfen hier nicht Ihren UV-Detektor auswählen, da dieser bei der Installation von PurityChrom automatisch konfiguriert wird. Unten auf der Seite können Sie die Ventile Ihres Systems konfigurieren.

ANZAHL DER VENTILE ermöglicht es Ihnen, die Anzahl der Ventile einzugeben. Jedes Ventil erscheint dann auf einer eigenen Registerkarte, auf der Sie die Serien- oder LAN-Adresse, die Anzahl der Positionen und den Anschluss für dieses Ventil auswählen können.

- Bei Verwendung eines Fraktionssammlers müssen Sie das Ventil des Sammlers separat konfigurieren (Adr.: 1, Pos.: 2, Anschluss: Treiber 5, Typ: Standardventil).
- Bei Verwendung der P 6.1L (Hochdruckgradientenversion) als Hauptpumpe müssen Sie das Lösungsmittelauswahlventil separat konfigurieren, indem Sie zwei Standardventile (Adr.:1 und 2, Pos.: 2, Anschluss: Treiber1) wählen. Das erste Ventil kann zwischen A1 (Pos.: 1) und A2 (Pos.: 2) und das zweite zwischen B1 (Pos.: 1) und B2 (Pos.: 2) umschalten.
- Verwendung der P 6.1L (Version mit Hochdruckgradient) als Nebpumpe: Verwenden Sie die gleichen Einstellungen wie oben (P 6.1L als Hauptpumpe), wählen Sie jedoch Anschluss: Treiber 2.
- Bei Verwendung des RID 2.1L müssen Sie das Spülventil separat konfigurieren (Adr.:1, Pos.: 2, Anschluss: Treiber 3, Typ: Standardventil).

Im Register *BESCHREIBUNGEN* aus dem Setup (s. Kapitel 4.5 auf Seite 17) können Sie zur besseren Übersichtlichkeit diese Ventile und Positionen z.B. in der Lösungsmittelauswahl A und B mit den Positionen A1, A2, B1 und B2 benennen.

Unter *STEUEREINGÄNGE* (im Register *KOMMUNIKATION*) können Sie Eventbox-Eingänge oder Gameport-Eingänge definieren, die einen Lauf stoppen (*ALLES STOPPEN*), einen Lauf starten (*ZEITABELLE STARTEN*) oder einen Lauf vorübergehend unterbrechen und dann wieder aufnehmen (*ZEITABELLE ANHALTEN/FORTSETZEN*). Bei Verwendung eines Triggerkabels müssen Sie den Eventbox-Eingang 1 wählen. Außerdem muss die PurityChrom.ini-Datei [Pumpen → IOcontrol=1] (s. Kapitel 23 auf Seite 107) geändert werden, wenn Sie Ihre Pumpe in Abhängigkeit vom Trigger starten wollen.

4.2 Voreinstellungen

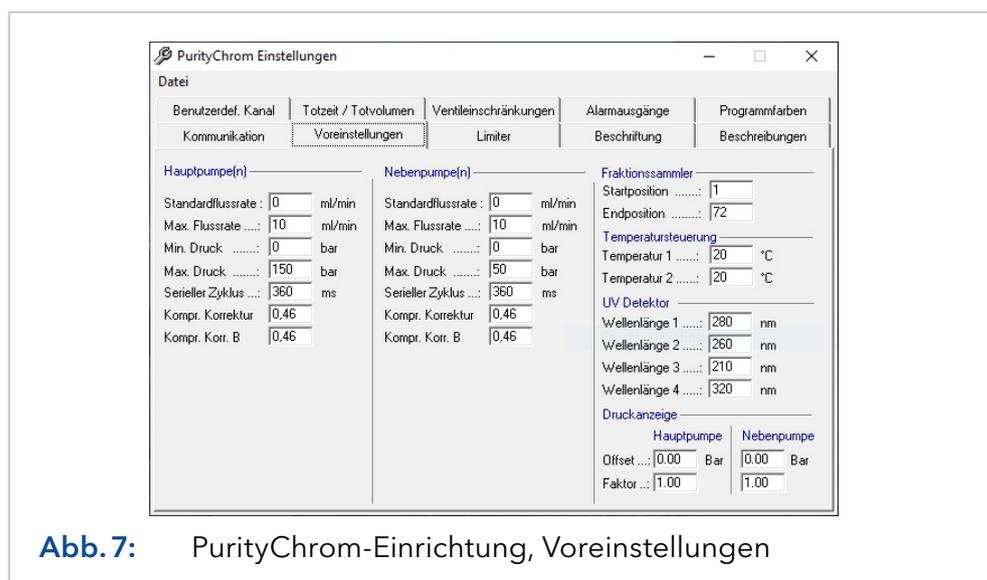


Abb. 7: PurityChrom-Einrichtung, Voreinstellungen

Sie können Standard- und Maximalwerte für die zu steuernden Geräte in der Voreinstellungskonfiguration festlegen. Die folgenden Werte können Sie im *HAUPTPUMPENSYSTEM* und *NEBENPUMPENSYSTEM* eingeben:

- *STANDARDFLUSSRATE* - Flussrate, die beim Start des Programms an die Pumpen übertragen wird.

- *MAX. FLUSSRATE* - Flussrate, die maximal betrieben werden kann.
- *MIN. DRUCK* - Minimaldruck, bei dem die Pumpen stoppen werden.
- *MAX. DRUCK* - Maximaldruck, bei dem die Pumpen stoppen werden.
- Zeitintervall des *SERIELLEN ZYKLUS*, in dem der Status seriell gesteuerter Pumpen abgefragt wird. Diese Einstellung wird durch den Treiber der KNAUER-Pumpen vorgegeben.
Für P 2.1L LPG binär: 1000 ms, alle anderen Pumpen: 360 ms
- *KOMPR. KORREKTUR* - Kompressionsfaktor für verwendete Puffer. Verwenden Sie 0,46 für Wasser und 1,10 für Ethanol.
- *FRAKTIONSSAMMLER STARTPOSITION* gibt die Startposition des Fraktionssammlers beim Programmstart an (für die Startposition muss 0 gewählt werden).
- *TEMPERATURSTEUERUNG* gibt zwei Systemtemperaturen an, die beim Programmstart eingestellt werden (z.B. Säulenofen und Probenheizung).
- *UV-DETEKTOR WELLENLÄNGE 1 - 4* zeigen die Wellenlängen des UV-Detektors beim Start des Programms.

Mit *DRUCKANZEIGE* können Sie die Druckanzeige des Programms mit Hilfe eines Offsets und eines Faktors an die der Pumpen anpassen.

Wenn das Setup geschlossen ist, werden diese Voreinstellungen an die Geräte gesendet. Beispielsweise starten die Pumpen mit der eingestellten *STANDARDFLUSSRATE*. Wir empfehlen daher, die *STANDARDFLUSSRATE* auf 0 ml/min zu setzen.

4.3 Fraktionsbegrenzer (Limiter)

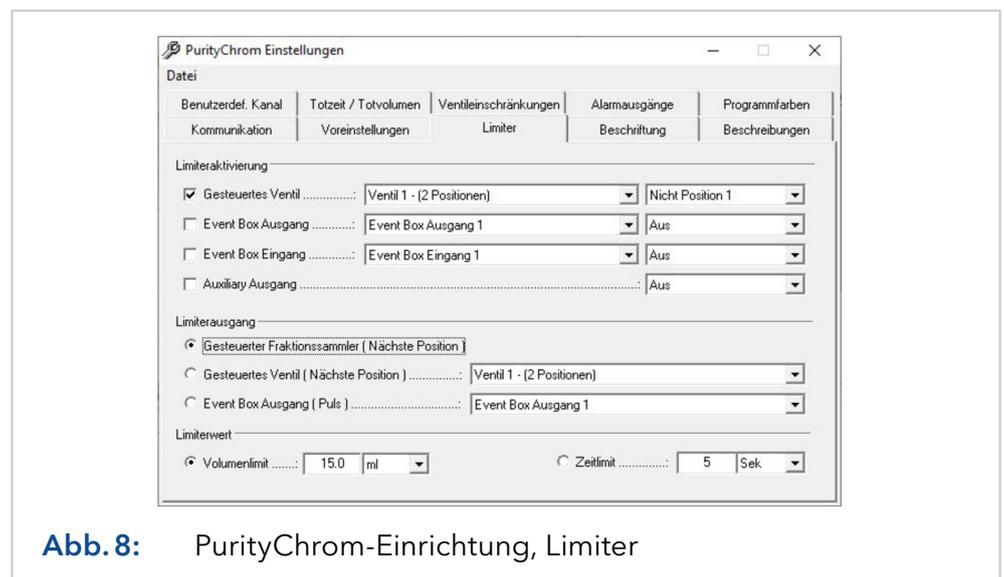


Abb. 8: PurityChrom-Einrichtung, Limiter

Der Fraktionsbegrenzer (Limiter) ist eine Funktion, die das Volumen Ihres Fraktionsfläschchens in Abhängigkeit von der Flussrate berechnet. Im Limiter-Setup kann der Fraktionsbegrenzer konfiguriert werden. Unter *LIMITERAKTIVIERUNG* geben Sie an, wann der Fraktionsbegrenzer aktiv werden soll. In der Regel ist dies der Zeitpunkt des Umschaltens zwischen Abfall und Fraktion. Wenn Sie einen Fraktionssammler verwenden, müssen Sie das im Sammler eingebaute Ventil wählen, das für das Umschalten zwischen Abfall und Fraktion zuständig ist.

- *SERIELL GESTEUERTES VENTIL* sollte aktiviert werden, wenn Sie dafür ein seriell oder LAN-gesteuertes Ventil verwenden. Bei Verwendung eines Multipositionsventils zur Fraktionierung entspricht die erste Position der Position *ABFALL*. Die folgende Position muss der Position *FRAKTION* entsprechen.



Hinweis: Wenn kein Fraktionssammler oder Fraktionsventil verwendet wird, deaktivieren Sie bitte „Gesteuertes Ventil“.

- Der *EVENT BOX AUSGANG* sollte aktiviert werden, wenn Sie dafür einen Event Box Ausgang verwenden. Der folgende Ausgabestatus muss der Status *FRAKTION* sein.
- Der *EVENT BOX EINGANG* sollte aktiviert werden, wenn Sie die Fraktionsposition mit einem Event Box Eingang aufzeichnen. Der folgende Eingangsstatus muss der Status *FRAKTION* sein.
- *DER AUXILIARY-AUSGANG* sollte aktiviert werden, wenn Sie dafür den Auxiliary-Ausgang der Pumpenschnittstelle verwenden. Der folgende Ausgangsstatus muss derjenige für den Status *FRAKTION* sein.

Geben Sie unter *LIMITER-AUSGANG* ein, was der Limiter tun soll, wenn das Fraktionslimit erreicht ist.

Das Gerät, mit dem Sie fraktionieren, sollte hier aktiviert werden.

- *GESTEUERTER FRAKTIONSSAMMLER* sollte aktiviert werden, wenn Sie einen seriellen oder LAN-gesteuerten Fraktionssammler verwenden. Wenn das Fraktionslimit erreicht ist, wird ein *POSITIONSWECHSEL* ausgeführt.
- *GESTEUERTES VENTIL* sollte aktiviert werden, wenn Sie ein seriell oder LAN-gesteuertes Motorschaltventil verwenden. Wenn die Fraktionsgrenze erreicht ist, schaltet es in die nächste Position.
- Der *EVENT BOX-AUSGANG* sollte aktiviert werden, wenn Sie einen Fraktionssammler verwenden, der durch die Event Box gesteuert wird. Wenn die Fraktionsgrenze erreicht ist, gibt es einen Impuls am angegebenen Ausgang.

Geben Sie das Volumen- oder das Zeitlimit für die Fraktionen in *LIMITER-WERT* ein. Nach Erreichen dieses Volumens oder dieser Zeit wird der Limiter das tun, was Sie unter *LIMITERAUSGANG* einstellen.

4.4 Beschriftung

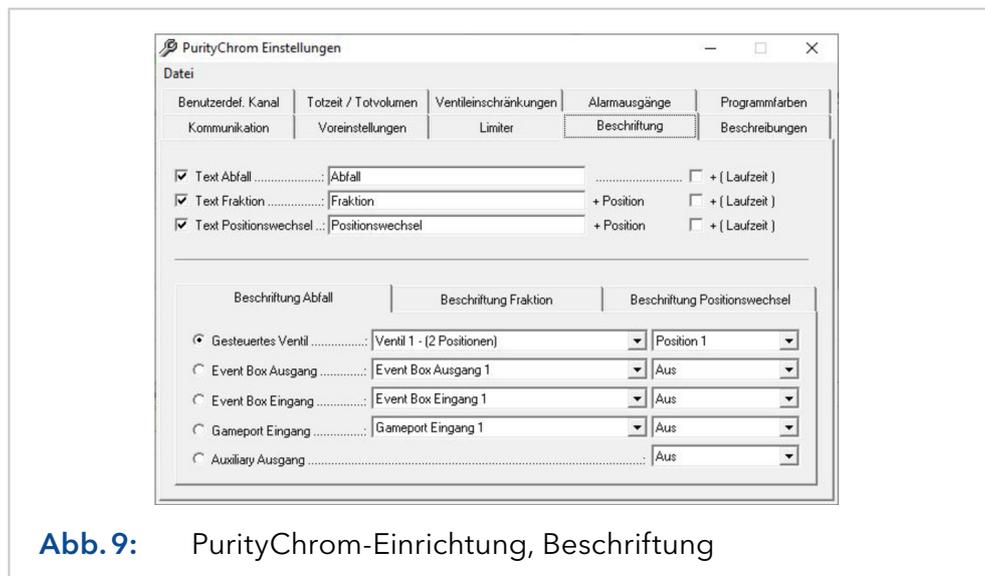


Abb. 9: PurityChrom-Einrichtung, Beschriftung

Die automatischen Beschriftungen in den Chromatogrammen werden im Setup *BESCHRIFTUNG* konfiguriert.

Mit *TEXT ABFALL* können Sie eine Anmerkung aktivieren oder deaktivieren, wenn Sie zu Abfall wechseln. Sie können den Text der Abfallanmerkung frei wählen. Die Option *+(LAUFZEIT)* fügt dem Text die verstrichene Zeit hinzu. Mit der Option *TEXT FRAKTION* können Sie beim Umschalten auf die Fraktionsposition eine Anmerkung aktivieren oder deaktivieren. Sie können auch den Text der Fraktionsanmerkung frei wählen.

Die Fraktionsnummer (Position) wird automatisch an den Text angehängt. Wenn Sie die Option *+(LAUFZEIT)* wählen, wird auch die verstrichene Zeit hinzugefügt.

Mit *TEXT POSITIONSWECHSEL* können Sie beim Ändern einer Position eine Anmerkung aktivieren oder deaktivieren. Außerdem können Sie den Text zum Positionswechsel frei wählen. Die Fraktionsnummer (Position) wird automatisch an den Text angehängt. Wenn Sie die Option *+(LAUFZEIT)* wählen, wird auch die verstrichene Zeit hinzugefügt.

Unter *BESCHRIFTUNG ABFALL* können Sie das Gerät mit der Position oder dem Zustand eingeben, die bzw. der der Abfallposition entspricht. (Bei einem Fraktionssammler müssen Sie das Ventil des Sammlers mit der Position eingeben, die der Abfallfraktion entspricht).

Unter *BESCHRIFTUNG FRAKTION* können Sie das Gerät mit seiner Position oder seinem Zustand eingeben, die bzw. der der Fraktionsposition entspricht. (Bei Verwendung eines Fraktionssammlers müssen Sie das Ventil des Sammlers mit der Position eingeben, die der *FRAKTION* entspricht).

In *BESCHRIFTUNG POSITIONSWECHSEL* können Sie das Gerät eingeben, mit dem Sie fraktionieren oder die Fraktionierung steuern.

4.5 Beschreibungen

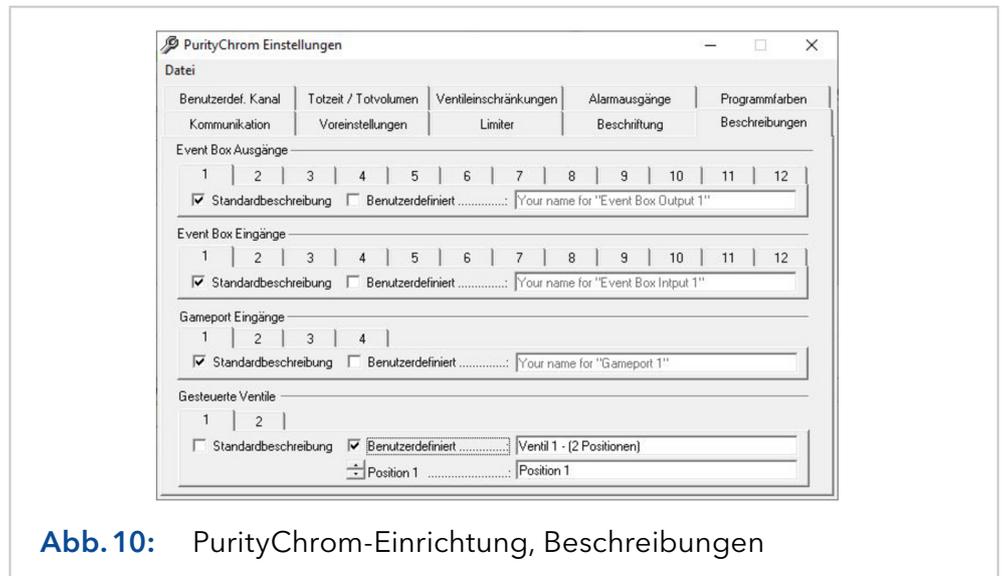


Abb. 10: PurityChrom-Einrichtung, Beschreibungen

Sie können den Ein- und Ausgängen der Event Box, den Ventilen und dem Auxiliary Ausgang der Pumpenschnittstelle in der Beschreibungseinrichtung Ihre eigenen Namen geben. Dies erleichtert die Programmierung von Zeittabellen. Es macht auch die Visualisierungen übersichtlicher, da die Eingänge, Ausgänge und Ventile nach Funktion aufgelistet werden können.

Die Option *STANDARDBESCHREIBUNG* gibt diesen Eingängen, Ausgängen und Ventilen ihre Standardbeschreibung (*EVENT BOX AUSGANG ...*, *EVENT BOX EINGANG ...*, *VENTIL NR. ...* und *AUXILIARY AUSGANG*).

Die *BENUTZERDEFINIERTE BESCHREIBUNG* gibt Ihnen die Möglichkeit, Ihre eigenen Beschreibungen in die nebenstehenden Textfelder einzugeben.

4.6 Benutzerdefinierter Kanal

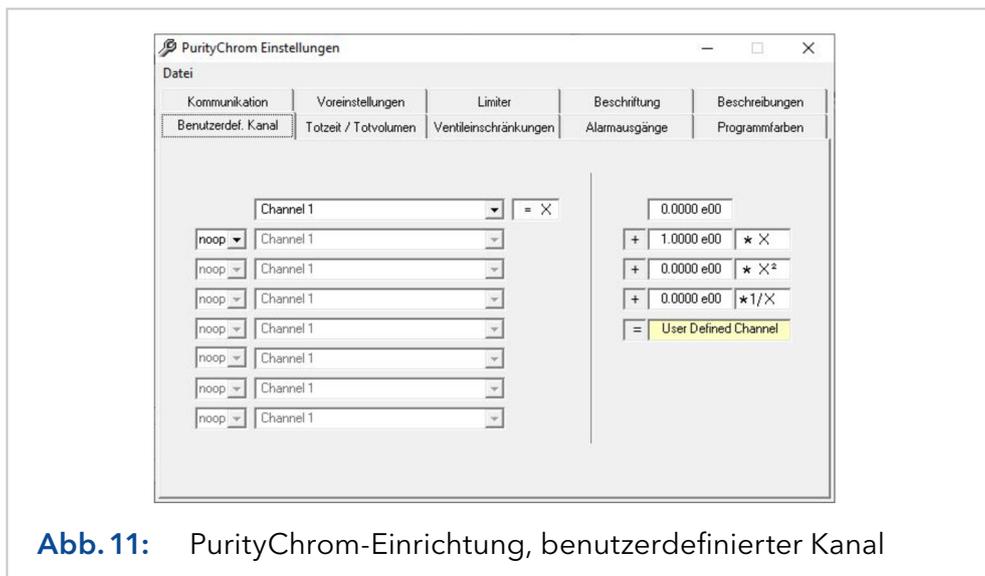


Abb. 11: PurityChrom-Einrichtung, benutzerdefinierter Kanal

Sie können einen benutzerdefinierten Datenkanal in der Registerkarte *BENUTZERDEFINIERTER KANAL* einrichten. Dieser Datenkanal wird auf die gleiche Weise wie einer Ihrer analogen Kanäle verwendet und trägt die Bezeichnung *U*.

Auf der linken Seite können Sie eines oder mehrere Ihrer Anlogsignale als Datenquelle aktivieren. Zwischen diesen Kanälen haben Sie eine Auswahl an möglichen Operationen:

Signal	Beschreibung
<i>NOOP</i>	Kein Betrieb
+	Hinzufügen des folgenden Kanals
-	Subtraktion des folgenden Kanals
*	Multiplikation mit dem folgenden Kanal
/	Division durch den folgenden Kanal

Das Ergebnis dieser Operationen steht auf der rechten Seite als Wert *X* zur Berechnung des *BENUTZERDEFINIERTEN KANALS* zur Verfügung. Sie können einen Offset in das erste Feld eingeben. Im zweiten Kästchen können Sie einen Faktor zu *X* eingeben. Im dritten Kästchen können Sie einen Faktor zum Quadrat von *X* eingeben und im vierten Kästchen einen Faktor zum Kehrwert von *X*. Die Addition der vier Zeilen ergibt den Wert Ihres *BENUTZERDEFINIERTEN KANALS*. Ein Beispiel für die Verwendung dieser Funktion ist die Berechnung des Drucks auf Ihrer Säule mit zwei Druckmonitoren vor und nach Ihrer Säule. Der benutzerdefinierte Kanal ist die Subtraktion des Drucks nach Ihrer Säule und des Drucks vor der Säule.

4.7 Totzeit/Totvolumen

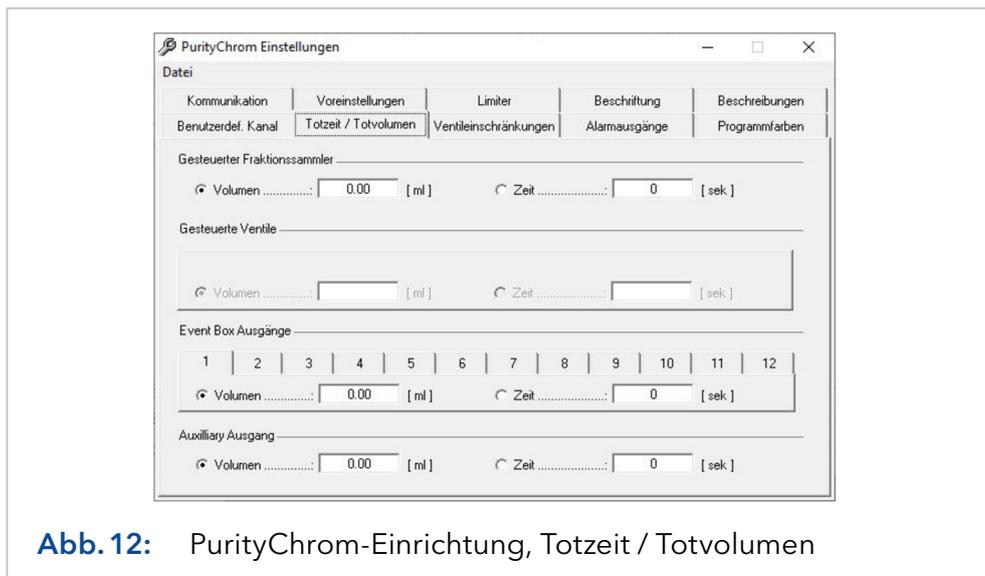


Abb. 12: PurityChrom-Einrichtung, Totzeit / Totvolumen

In den Schläuchen und Ventilen zwischen der Detektorzelle und dem Abfall-/Fraktions-Umschaltventil kann ein erhebliches Totvolumen auftreten, was zu einer Zeitverzögerung bei der Fraktionierung führt, insbesondere bei niedrigen Durchflussraten. In der Einstellung Totzeit/Totvolumen können Sie das Totvolumen oder die Totzeit Ihres Systems definieren. Wenn Sie einen Fraktionssammler verwenden, müssen Sie das Totvolumen Ihres Systems im Abschnitt *GESTEUERTER FRAKTIONSSAMMLER* und *GESTEUERTE VENTILE* einstellen.

Wenn Sie ein Totvolumen eingeben, berechnet das Programm die erforderliche Totzeit für jedes Gerät entsprechend der aktuellen Flussrate. Funktionen, die durch Schwellwerte ausgelöst werden, die automatische Peakerkennung sowie die Fraktionierung werden ebenfalls mit dieser Verzögerung ausgeführt. Beachten Sie daher, dass die Gesamtlaufzeit lang genug sein muss, um alle gewünschten Fraktionen zu sammeln.

Wenn Sie eine Totzeit eingeben, erfolgt diese 1:1. Anmerkungen werden ohne Zeitverzögerung in das Chromatogramm aufgenommen.

4.8 Ventileinschränkungen

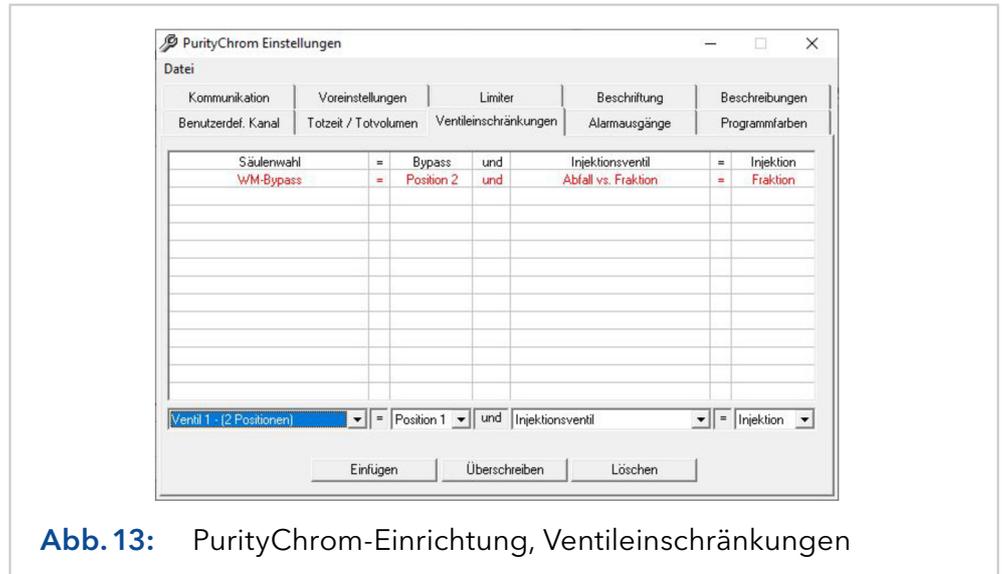


Abb. 13: PurityChrom-Einrichtung, Ventileinschränkungen

Bei Verwendung mehrerer Ventile ist es möglich, auf unzulässige Ventilstellungen zu schalten oder sogar den Durchfluss durch das System zu sperren, ohne dies zu beabsichtigen. Um dies zu verhindern, haben Sie die Möglichkeit, unter *VENTILEINSCHRÄNKUNGEN* alle unzulässigen Ventilstellungen in einer Liste einzutragen. Das Programm sucht ständig nach diesen Kombinationen und verhindert deren Ausführung. Treten diese unzulässigen Ventilstellungen auf, erscheint eine Meldung auf dem Bildschirm.

Um die Tabelle auszufüllen, wählen Sie die unzulässigen Ventilstellungen in der Bearbeitungsleiste unterhalb der Tabelle aus und fügen sie mit der Schaltfläche *EINFÜGEN* hinzu. *ÜBERSCHREIBEN* erlaubt es Ihnen, die rot markierte Zeile zu überschreiben, oder Sie können sie mit der Schaltfläche *LÖSCHEN* löschen. Die mögliche Auswahl der Ventile in der Editierleiste umfasst nur die in *KOMMUNIKATION* konfigurierten Ventile.

4.9 Alarmausgänge

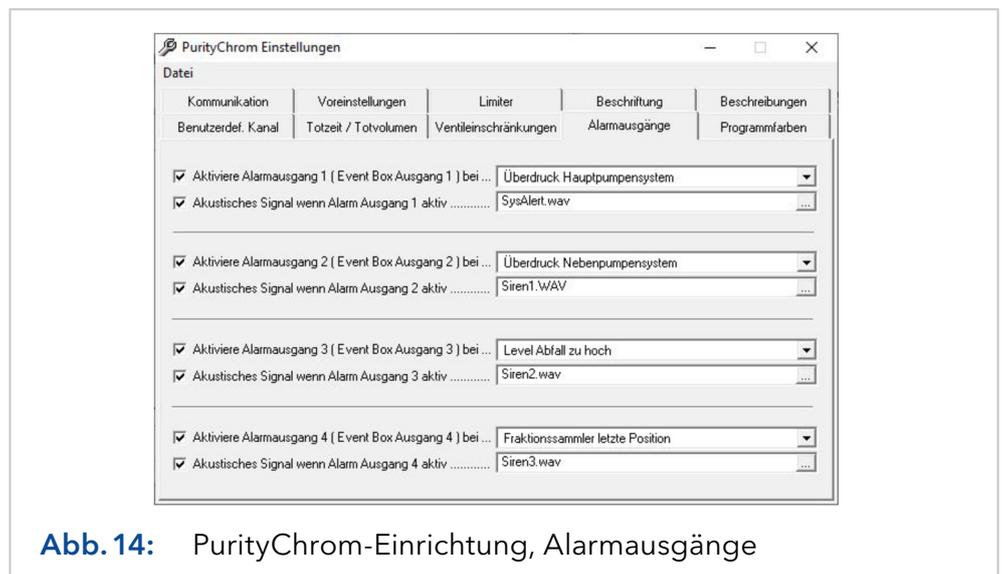


Abb. 14: PurityChrom-Einrichtung, Alarmausgänge

Bei der Einrichtung der Alarmausgänge können bis zu 4 Alarmausgänge aktiviert werden. Die Alarmausgänge 1 bis 4 werden über Event Box Ausgänge eingestellt.

Mit den entsprechenden Dropdown-Listen können Sie die zu einem Alarm führenden Situationen konfigurieren, indem Sie aus mehreren vordefinierten Situationen auswählen.

Die Option *AKUSTISCHES SIGNAL WENN ALARM AUSGANG N AKTIV* aktiviert ein akustisches Signal, das abgespielt wird, während der Alarmausgang aktiv ist. Die Signaldatei kann im nebenstehenden Feld ausgewählt werden.

4.10 Programmfarben

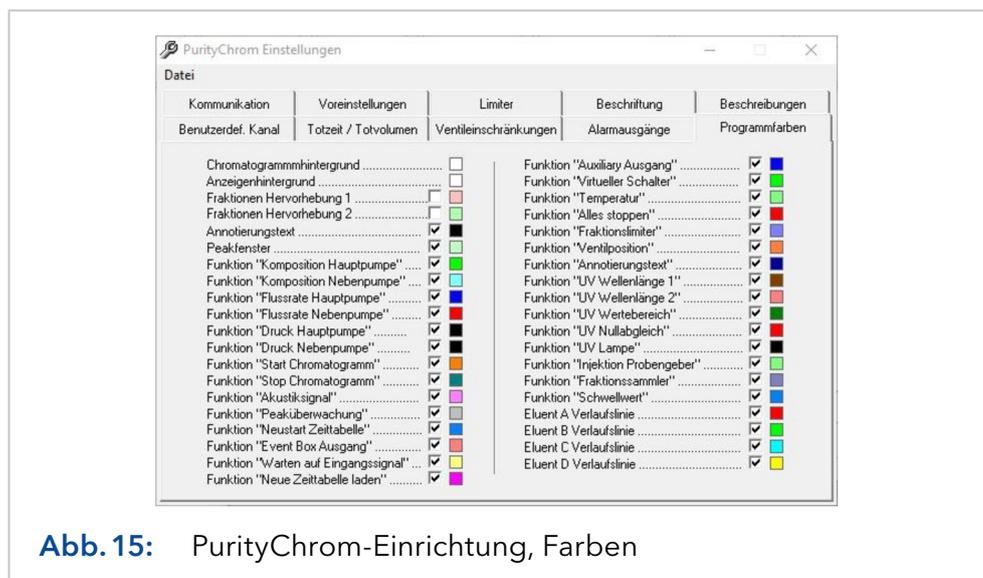


Abb. 15: PurityChrom-Einrichtung, Farben

Die Registerkarte *PROGRAMMFARBEN* erlaubt die Konfiguration von Farben für Chromatogrammhintergrund, Annotierungstext, Peakfenster und die grafischen Zeittabellenfunktionen.

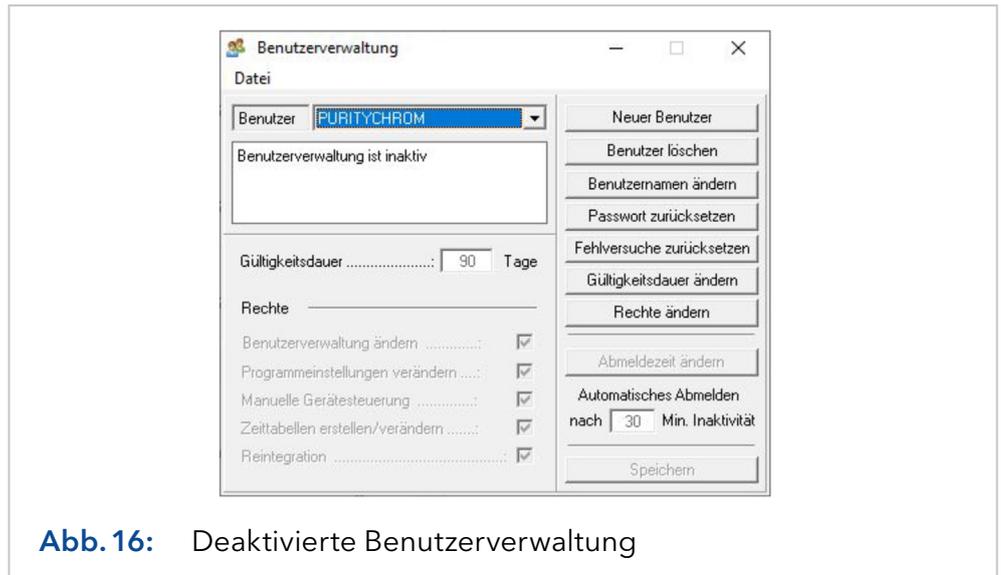
Für jedes Grafikelement oder jede Funktion bestimmt ein angrenzendes Kontrollkästchen, ob das Element oder die Funktion angezeigt wird. Durch Anklicken der farbigen Kästchen öffnet sich ein Farbdialogfenster, in dem die entsprechenden Anzeigefarben ausgewählt werden können.

5. Benutzerverwaltung

5.1 Allgemein

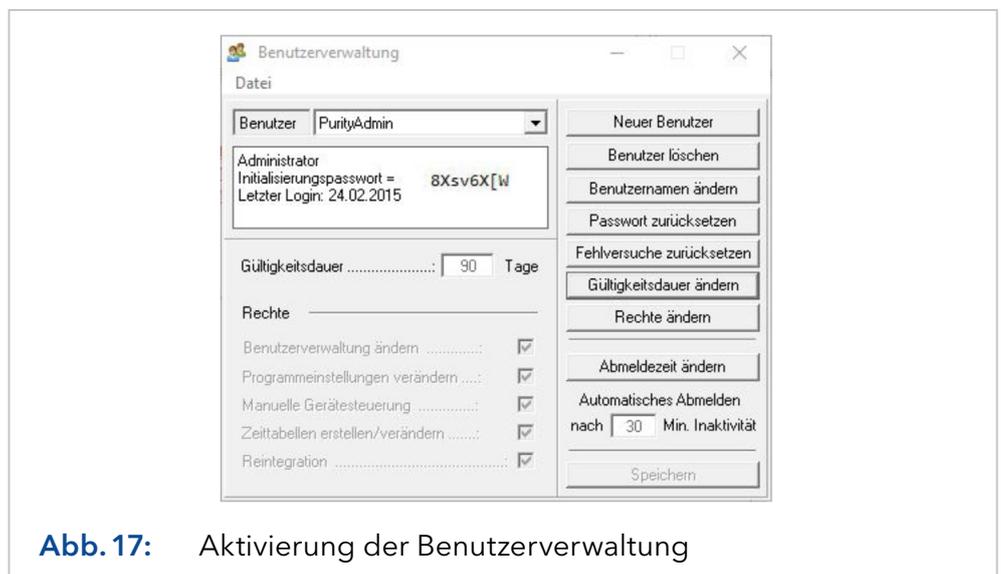
Die Benutzerverwaltung  ermöglicht es Ihnen, Administratoren und Benutzer einzurichten, denen Benutzerberechtigungen zugewiesen werden können.

5.2 Arbeiten ohne Benutzerverwaltung



Bei der Erstinstallation ist die Benutzerverwaltung deaktiviert. Diese Einstellung kann jederzeit wiederhergestellt werden. Um ohne Benutzerverwaltung zu arbeiten, nennen Sie den Administrator „PURITYCHROM“ und vergeben Sie das Passwort „KNAUER“. Diese Kombination aus Name und Passwort deaktiviert die Benutzerverwaltung.

5.3 So aktivieren Sie die Benutzerverwaltung



Die Benutzerverwaltung wird aktiviert, wenn das Passwort oder der Benutzername des Administrators geändert wird. Um den Namen des Administrators zu ändern, klicken Sie auf die Schaltfläche *BENUTZERNAME ÄNDERN*. Bei der Eingabe eines neuen Namens müssen Sie folgende Einschränkungen beachten:

- Groß-/Kleinschreibung
- Keine Leerzeichen
- Mindestens 3 Zeichen

Um die Eingabe des neuen Benutzernamens zu bestätigen, drücken Sie die Schaltfläche *SPEICHERN*. Im Statusfenster erhalten Sie ein *INITIAL-PASSWORT*, das Sie bei der ersten Anmeldung verwenden müssen.

Der erste Benutzer in der Liste kann nicht gelöscht werden und hat immer administrative Rechte, die nicht deaktiviert werden können.

5.4 Hinzufügen eines Benutzers

Um ein neues Benutzerprofil zu erstellen, klicken Sie auf die Schaltfläche *NEUER BENUTZER*. In der neuen Benutzungsoberfläche können Sie den Benutzernamen und die Gültigkeitsdauer des Passwortes eingeben und Benutzerberechtigungen vergeben.

Um die Eingabe zu bestätigen, klicken Sie auf die Schaltfläche *SPEICHERN*.

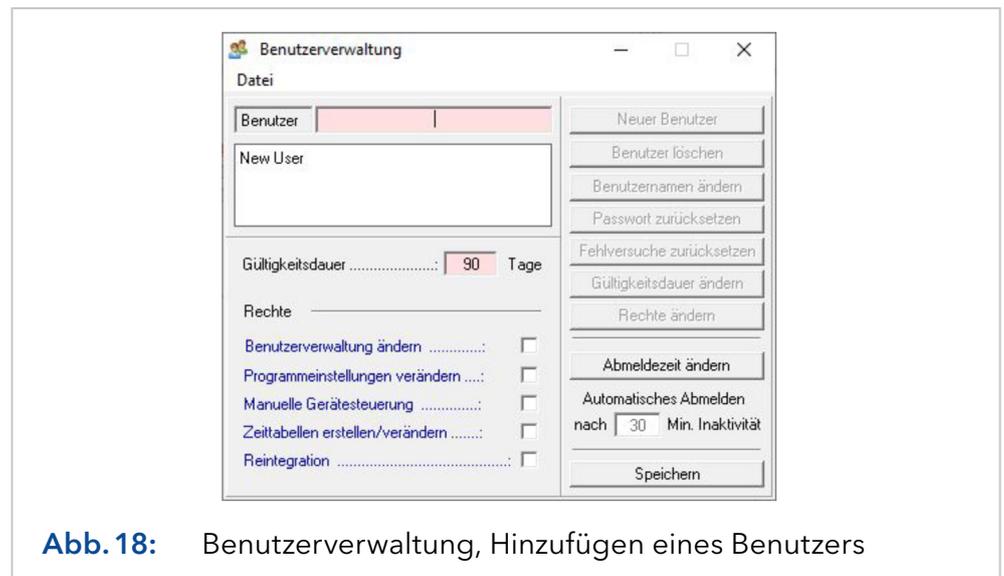


Abb. 18: Benutzerverwaltung, Hinzufügen eines Benutzers

- Unter *BENUTZER* wird der Benutzername festgelegt. Er muss mindestens 3 Zeichen lang sein, darf keine Leerzeichen enthalten und es muss auf Groß- und Kleinschreibung geachtet werden.
- *GÜLTIGKEITSDAUER* definiert die Dauer, während der das Kennwort gültig ist. Nach der eingegebenen Zeitspanne muss der Benutzer ein neues Passwort eingeben. Die Gültigkeitsdauer kann zwischen 7 und 180 Tagen lang sein.
- *BENUTZERVERWALTUNG ÄNDERN* ermöglicht dem neu angelegten Benutzer den Zugriff auf die Benutzerverwaltung.

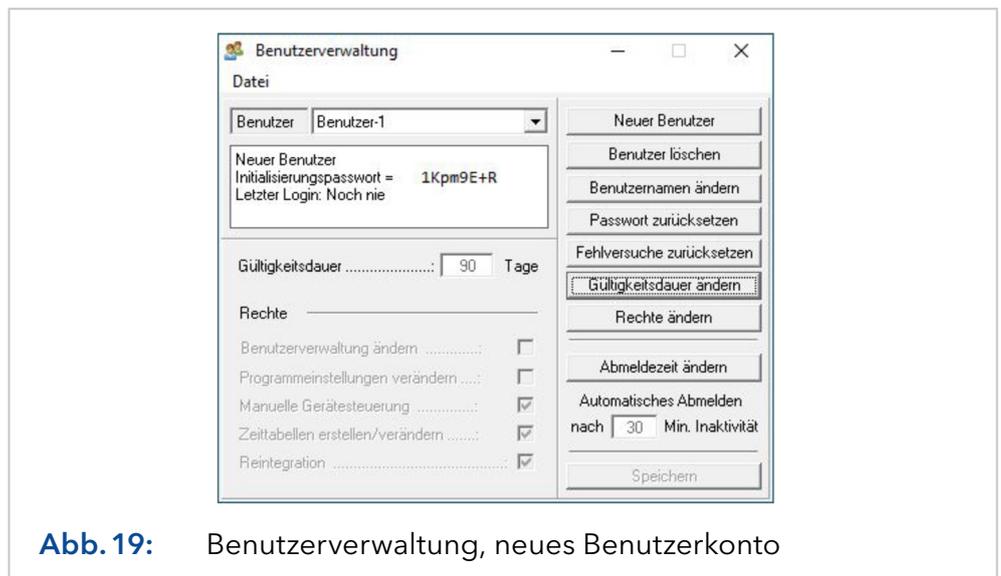


Abb. 19: Benutzerverwaltung, neues Benutzerkonto

- *PROGRAMMEINSTELLUNGEN VERÄNDERN* ermöglicht den Zugriff auf das Programm-Setup
- *MANUELLE GERÄTESTEUERUNG* ermöglicht die manuelle Bedienung des Systems mit Hilfe der manuellen Steuerfunktionen im Hauptfenster oder der Visualisierung
- *ZEITABELLEN ERSTELLEN/VERÄNDERN* erlaubt das Erstellen und Bearbeiten von Zeittabellen und Sequenztabellen
- *REINTEGRATION* ermöglicht die nachträgliche Integration der Ergebnisdateien
- *AUTOMATISCHES ABMELDEN* bestimmt die Zeit der Inaktivität, nach der der Benutzer abgemeldet wird. Um die automatische Abmeldung zu deaktivieren, geben Sie 0 Minuten ein.

Durch Drücken der Taste des Kombinationsfeldes hinter dem Benutzernamen können Sie zwischen den verschiedenen Benutzeroberflächen wechseln. Das Initialpasswort für die erste Anmeldung finden Sie im Statusfenster der Benutzeroberfläche des neu registrierten Nutzers.

Es zeigt dem Administrator auch einige zusätzliche Informationen an (letzter Login, Gültigkeitsdauer des Passwortes).

5.5 Zurücksetzen eines Passworts

Der Administrator kann ein vergessenes oder unsicheres Kennwort für den betroffenen Benutzer zurücksetzen.

Beim Drücken der Schaltfläche *PASSWORT ZURÜCKSETZEN* wird ein neues Initialpasswort generiert.

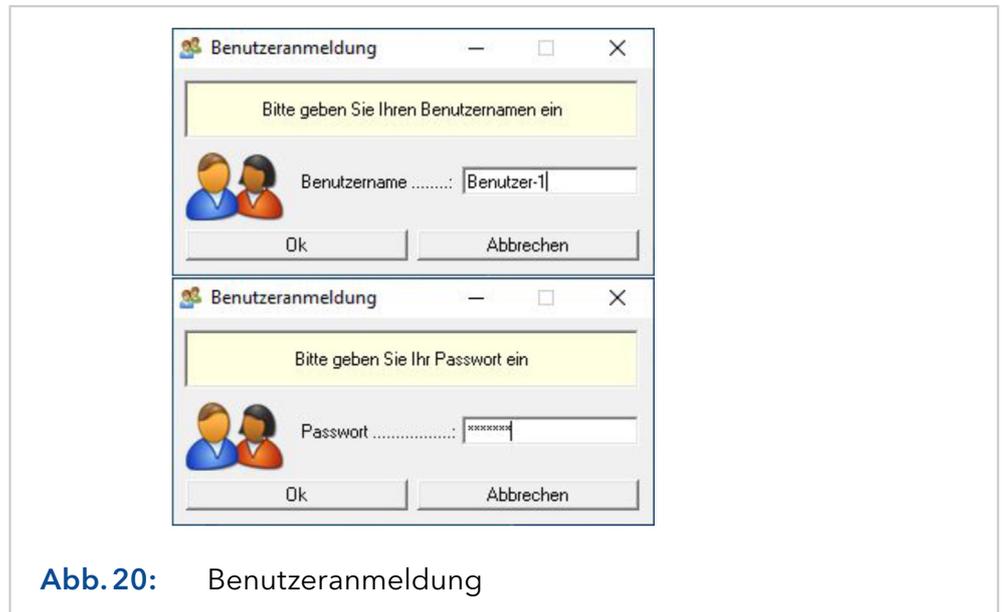
Der Betreiber muss dieses Passwort bei der nächsten Anmeldung verwenden.

5.6 Gescheiterte Versuche zurücksetzen

Nach drei fehlgeschlagenen Anmeldeversuchen wird das Konto des Betreibers gesperrt. Der Administrator hat die Möglichkeit, diese Versuche zurückzusetzen, um dem Benutzer einen weiteren Login-Versuch zu ermöglichen.

Der Administrator erhält die Informationen, wenn ein Benutzer aufgrund fehlgeschlagener Versuche gesperrt ist, im Statusfenster der Benutzeroberfläche.

5.7 Anmeldung für Benutzer



Wenn die Benutzerverwaltung aktiviert ist, erhält der Benutzer beim Start von PurityChrom ein Abfragefenster für die Anmeldung.

Der Benutzer muss sich durch Eingabe von Benutzername und Passwort identifizieren.

Bei der ersten Anmeldung nach der Aktivierung oder dem Zurücksetzen des Passworts muss der Benutzer das zugewiesene Initialpasswort verwenden, das bei der Erstellung des Benutzerprofils oder beim Zurücksetzen des Passworts generiert wurde.

Das neue Passwort muss mindestens 8 Zeichen lang sein und Zeichen aus drei der folgenden vier Kategorien enthalten:

- Kleinbuchstaben (a - z)
- Großbuchstaben (A - Z)
- Basis 10 Ziffern (0 - 9)
- Nicht-alphanumerische Sonderzeichen: ! „ # \$ % & , () * + - . / : ; < = > ? @ [\] ^ _ { | } ~

Nach der erfolgreichen Eingabe des Initialpasswortes wird der Betreiber aufgefordert, ein neues Passwort zu definieren und einzugeben.

Aus Sicherheitsgründen muss der Benutzer das Passwort mit einer zweiten Eingabe bestätigen.

Am Ende der Gültigkeitsdauer des Passwortes wird der Benutzer auch aufgefordert, ein neues Passwort einzugeben.

Das zuvor verwendete Passwort wird nicht akzeptiert.

5.8 Gesperrtes Konto

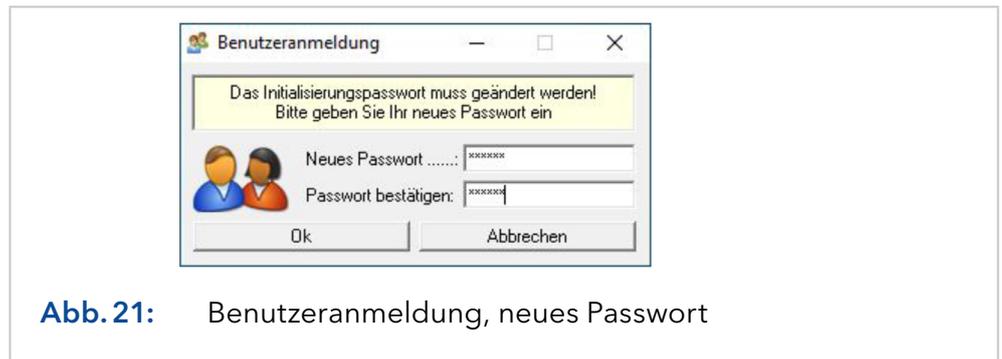


Abb. 21: Benutzeranmeldung, neues Passwort

Nach drei Versuchen mit einem falschen Passwort wird das Konto des Benutzers gesperrt. Der Administrator kann die Versuche zurücksetzen oder das Passwort zurücksetzen, um ein neues Initialpasswort zu generieren.

5.9 Drucken der Benutzerverwaltung

Um eine Liste aller Benutzer und ihrer Rechte auszudrucken, wählen Sie *BENUTZERVERWALTUNG DRUCKEN* im Menü *DATEI* der Benutzerverwaltung. Die Passwörter sind nicht Teil der Liste.

5.10 Funktionsschaltflächen im Audit-Trail-Fenster

Das Audit-Trail-Fenster lässt sich in der *BENUTZERVERWALTUNG* unter dem Menüpunkt *DATEI* öffnen. Dazu muss die Benutzerverwaltung aktiviert werden (s. Kapitel 5.3 auf Seite 22).

Menü	Funktion
	<i>LISTE AKTUALISIEREN</i> passt die Liste entsprechend der gewählten Zeitspanne an
	<i>AUDITTRAIL DRUCKEN</i> öffnet den Druckerdialog, um den Audit-Trail für den gewählten Zeitraum zu drucken.
	<i>AUDITTRAIL DRUCKEN EXPORTIEREN</i> öffnet ein Dateiauswahlfenster, um den Audit Trail als *.csv-Datei zu exportieren.
	Mit <i>BEENDEN</i> wird das Audit-Trail-Fenster geschlossen.

6. Erstellen von Zeittabellen

6.1 Allgemein

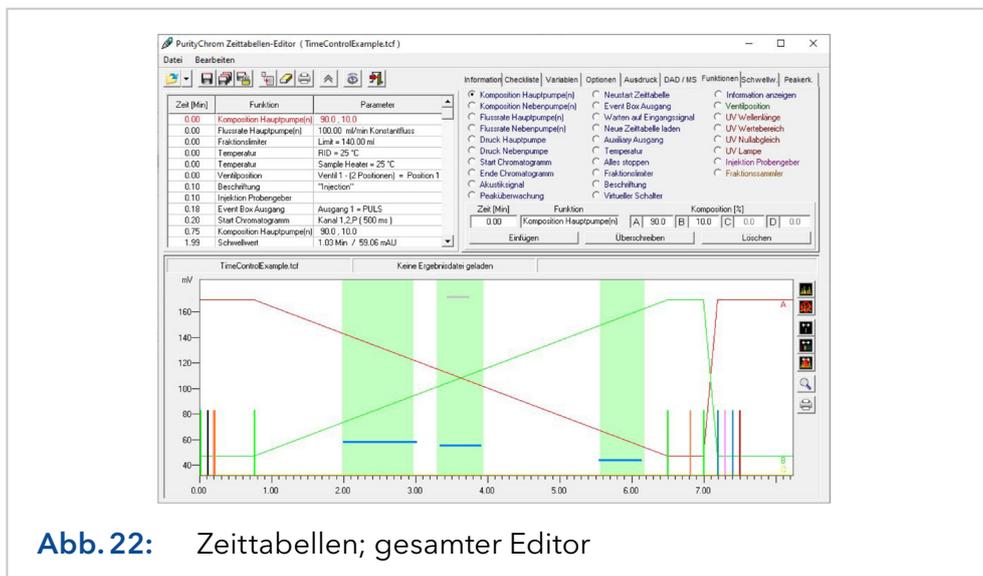


Abb.22: Zeittabellen; gesamter Editor

Sie können den Zeittabelleneditor über die Funktionstaste  oder den Menüpunkt **ZEITABELLE ERSTELLEN / BEARBEITEN** im Hauptfenster öffnen. Der Editor zeigt die Zeittabelle in tabellarischer und grafischer Form an. Die grafische Darstellung erlaubt auch das Laden eines Chromatogramms als Hintergrundbild , mit dessen Hilfe die Funktionen der Zeittabelle entlang der Zeit/Volumen/Säulenvolumen- und Intensitätsachse eingestellt und überprüft werden können. Die grafische Darstellung der Funktionen, insbesondere die Anzeige des Gradienten, sorgt für eine erhöhte Übersichtlichkeit bei der Programmierung und hilft Ihnen so, Fehler zu vermeiden.

Wenn Sie Zeittabellen auf der Grundlage der Zeit erstellen, denken Sie daran, dass Sekunden als Hundertstelminuten angegeben werden.

Die Funktionen des Zeitplans müssen nicht in chronologischer Reihenfolge programmiert werden. Sie werden beim Einfügen in die Zeittabelle automatisch in der richtigen Reihenfolge sortiert.

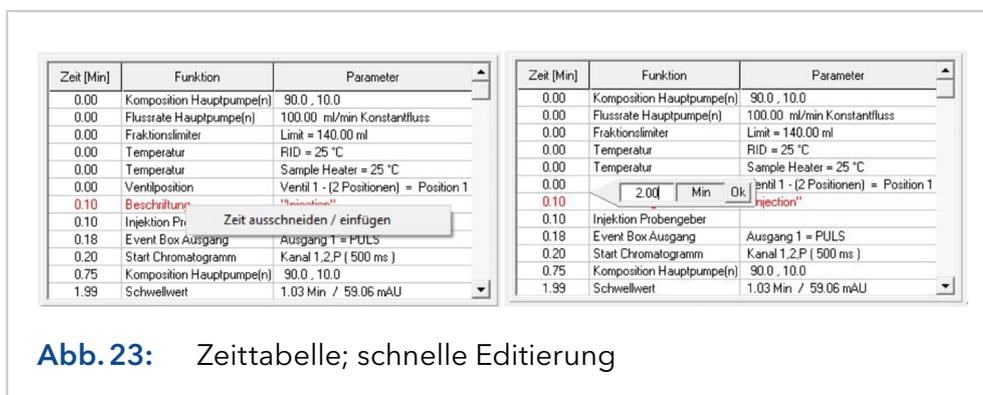


Abb.23: Zeittabelle; schnelle Editierung

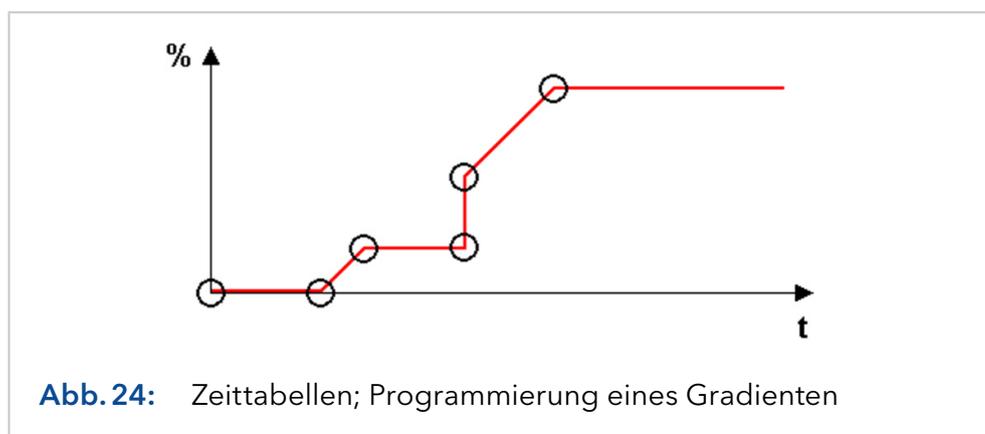
Wenn Sie mehr als eine Funktion des Zeitplans in eine andere Zeit verschieben wollen, klicken Sie mit der rechten Maustaste in die erste Zeile der zu verschiebenden Funktionen. Beim Klicken in **ZEIT AUSSCHNEI-**

DEN/EINFÜGEN erscheint ein Eingabefeld, in das eine positive oder negative Zeit eingegeben werden kann. Eine positive Zeit verschiebt alle nachfolgenden Funktionen auf einen späteren Zeitpunkt, eine negative Zeit verschiebt alle Funktionen auf einen früheren Zeitpunkt.

Es gibt bestimmte Dinge, die Sie beim Erstellen oder Bearbeiten einer Zeittabelle beachten sollten.

Es ist ein Grundprinzip, dass jede Zeittabelle zu einem Zeitpunkt von 0,00 Minuten mit einer Eluentenzusammensetzung und einer Flussrate beginnen muss, so dass die Anfangsbedingungen der Pumpen eingestellt werden.

Alle für den Zeitpunkt 0,00 Minuten programmierten Funktionen werden beim Laden der Zeittabelle ausgeführt. Deshalb ist es sinnvoll, diesen Programmpunkt zu benutzen, um alle angesteuerten Ventile in eine Grundstellung zu bringen und die verwendeten Eventbox-Ausgänge zu setzen, damit das System nicht durch vorherige Benutzung oder manuelle Bedienung in einem undefinierten Zustand bleibt.



Wenn Sie einen Gradienten programmieren wollen, sollten Sie darauf achten, dass Sie alle Winkel dieses Gradienten als Eluentenzusammensetzungen in die Zeittabelle aufnehmen. Es wird ein linearer Gradient zwischen zwei verschiedenen Eluentenzusammensetzungen zu zwei verschiedenen Zeiten berechnet. Wenn Sie einen gestuften Gradienten mit unserem P 2.1L programmieren möchten, fügen Sie Start- und Endpunkt mit einer Zeitdifferenz von mindestens 0,06 Minuten hinzu. Die zuletzt programmierte Eluentenzusammensetzung läuft isokratisch, bis die Zeittabelle beendet wird (durch das Programm oder manuell).

6.2 Erstellen einer Zeittabelle

Auf der rechten Seite des Fensters befindet sich die Symbolleiste für den Zeittabelleneditor. Hier sind die Funktionen in der Reihenfolge aufgeführt, die der Anzeige entspricht:

Menü	Funktion
	<i>ZEITTABELLE LADEN</i> lädt eine verfügbare Zeittabelle in den Editor. Die Dateitypen, die Sie zum Laden auswählen können, sind <i>ZEITTABELLE (*.tcf)</i> , <i>ERGEBNIS-DATEI (*.rfp)</i> oder <i>PURITYCHROM-DATEI (*.lgr)</i> . Mit der Option <i>ERGEBNISDATEI</i> können Sie eine Zeittabelle aus Ergebnisdaten laden. Mit der Option <i>PURITYCHROM-DATEI</i> können Sie mit PurityChrom erstellte Zeittabellen importieren.
	<i>ZEITTABELLE SPEICHERN</i> speichert die Zeittabelle unter ihrem bestehenden Namen.
	<i>ZEITTABELLE SPEICHERN UNTER ...</i> speichert die Zeittabelle unter einem neuen Namen.
	<i>ZEITTABELLE ALS VALIDIERT SPEICHERN</i> speichert die Zeittabelle als validierte Datei. Diese Datei kann nicht mehr geändert werden.
	<i>KARTEIKARTENINHALT IMPORTIEREN</i> wird verwendet, um ein Element einer Zeittabelle zu importieren. Der Inhalt der ausgewählten Registerkarte kann aus einer vorhandenen Zeittabelle importiert werden.
	<i>ALLE LÖSCHEN</i> löscht den Inhalt einer Zeittabelle. Um zu verhindern, dass die Datei versehentlich gelöscht wird, erfordert diese Funktion vor ihrer Ausführung eine weitere Bestätigung von Ihnen.
	<i>ZEITTABELLE DRUCKEN</i> öffnet einen Druckerdialog zum Ausdrucken der Zeittabelle
	<i>GRAFIK AUSBLENDEN / GRAFIK EINBLENDEN</i> blendet den graphischen Zeittabelleneditor aus oder ein. Das Fenster des Zeitplaneditors wird verkleinert oder vergrößert.
	<i>SIMULATIONSMODUS</i> aktiviert einen Simulationsmodus für die geladene Zeittabelle im Zeittabelleneditor. Durch Anklicken einer Zeile im Editor wird die entsprechende Situation in der Anlagenvisualisierung angezeigt.
	<i>BEENDEN</i> schließt den Zeittabelleneditor.

Die ausgewählte Zeile wird in der Tabelle mit zwei Pfeilen markiert. Mit den Pfeil-Schaltflächen auf der Tastatur kann die nächste oder die vorherige Zeile ausgewählt werden. Mit dieser Simulation können Grundfunktionen von Zeittabellen getestet werden. In der Anlagenvisualisierung wird das entsprechende grafische Objekt durch einen rot blinkenden Rahmen markiert. Zusätzlich zeigen Wertelabels die Parameter der ausgewählten Zeile an (Lösungsmittelzusammensetzungen, Durchflussraten, UV-Wellenlängen usw.).

5.55	Schwellwert	0.60 Min / 44.64 mAU
▶ 6.81	Ventilposition	Fraktionssammler-Ventil = Abfall
7.20	Ende Chromatogramm	Alle gestarteten Kanäle

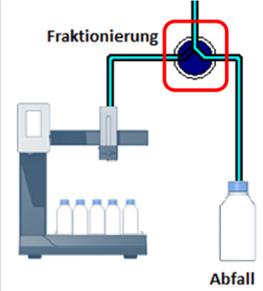


Abb.25: Zeittabellen; Simulationsmodus

6.2.1 Speicherung von allgemeinen Informationen

In der Registerkarte *INFORMATION* können Sie Informationen über den Autor der Datei, die verwendeten Eluenten, die eingesetzte Säule, das Probenmaterial und einen allgemeinen Kommentar eingeben. Das Datum wird automatisch generiert, wenn Sie die Datei speichern.

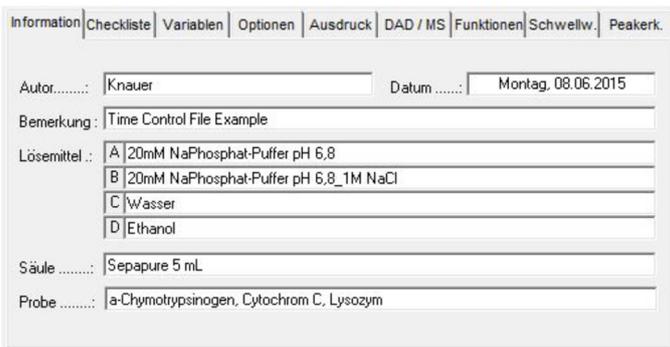


Abb.26: Zeittabellen; Allgemeine Informationen

Bei Verwendung eines Autosamplers oder bei Aktivierung der Option *MANUELLE PROBENBEZEICHNUNG* ist die Probenbezeichnung nicht enthalten. Die eingegebenen Informationen werden in der erzeugten Ergebnisdatei gespeichert und können später wieder geöffnet werden.

6.2.2 Erstellung einer Checkliste

Auf der Registerkarte *CHECKLISTE* können Sie eine Anweisungsliste oder eine Checkliste erstellen. Unten auf der Registerkarte befindet sich die Editorleiste, in der Sie zwischen *ABHAKEN* oder *BENUTZEREINGABE* wählen können:



Abb. 27: Zeittabellen; Erstellung einer Checkliste

Das *ABHAKEN* ist eine Anweisung oder eine Steueranweisung. Geben Sie den Text der Anweisung in das Eingabefeld auf der rechten Seite ein. Dieser Punkt muss vom Benutzer angekreuzt werden, bevor er diese Zeittabelle starten kann.

Die *BENUTZEREINGABE* ist eine Eingabeaufforderung. Geben Sie den Text der Eingabeaufforderung in das Eingabefeld auf der rechten Seite ein. Der Benutzer muss die Anforderung eingeben, bevor er diese Zeittabelle starten kann.

Die Schaltfläche *EINFÜGEN* fügt den Inhalt der aktuellen Editorleiste zur Checkliste hinzu. Die Drucktaste *ÜBERSCHREIBEN* überschreibt den Inhalt der von Ihnen gewählten Zeile mit dem Inhalt der Editorleiste. Die Drucktaste *LÖSCHEN* löscht die von Ihnen markierte Zeile. Um die Reihenfolge der Zeilen zu ändern, klicken Sie mit der linken Maustaste auf eine Zeile und verschieben Sie sie bei gedrückter Taste an die gewünschte Stelle.

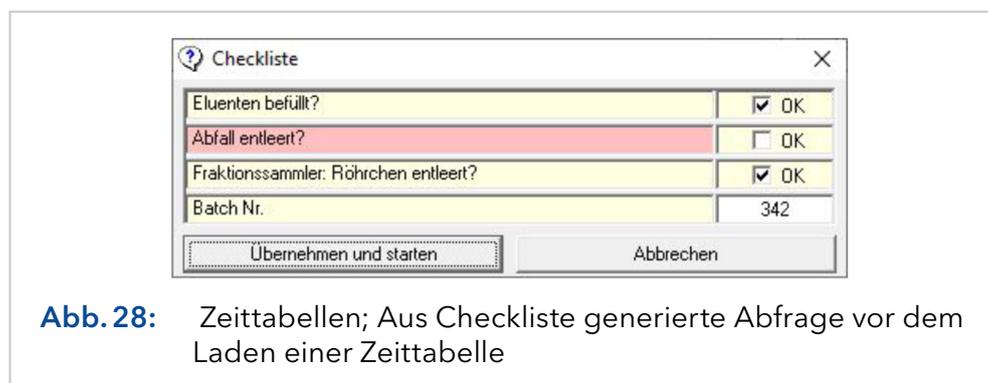


Abb. 28: Zeittabellen; Aus Checkliste generierte Abfrage vor dem Laden einer Zeittabelle

Wenn die Checkliste einer Zeittabelle Zeilen enthält, wird das Fenster mit der Checkliste geöffnet, bevor die Zeittabelle gestartet wird. Der Benutzer muss alle Checkboxes abhaken und alle Abfragen eingeben, bevor der Lauf beginnt. Eine vergessene Zeile wird rot markiert und verhindert den Start. Die Checkliste wird in der Ergebnisdatei protokolliert.

6.2.3 Variablen in Zeittabellen

Die Registerkarte *VARIABLEN* ermöglicht die Definition von Variablen, die als Parameter für die Zeittabellenfunktionen verwendet werden. Bei der Ausführung einer Zeittabelle können die Variablenwerte in Form einer Checkliste gesetzt werden. Alternativ können Zeittabellen auch innerhalb einer Sequenztabelle ausgeführt werden. Die Werte der Variablen werden in die Sequenztabelle eingegeben.

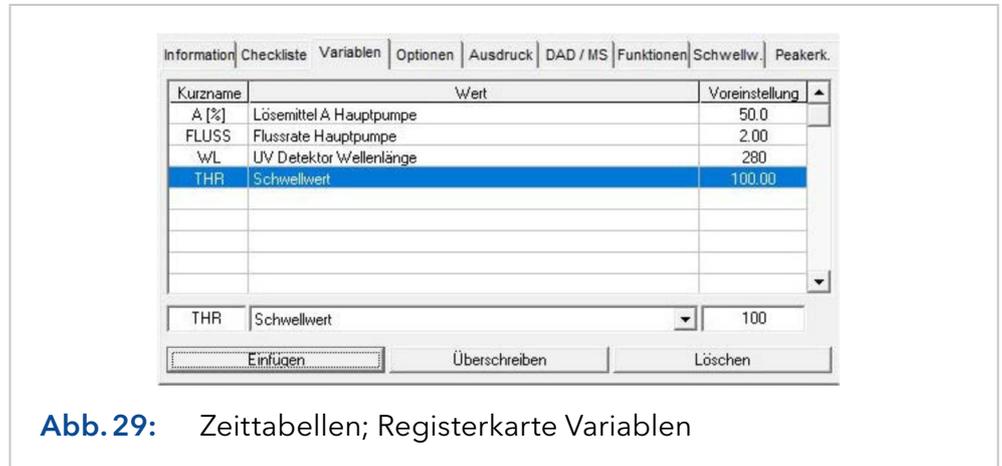


Abb. 29: Zeittabellen; Registerkarte Variablen

Die folgenden Variablen können definiert werden:

- Zusammensetzung Hauptpumpe: Lösemittel A-C Hauptpumpe
- Flussrate Hauptpumpe
- Zusammensetzung Nebpumpe: Lösemittel A-C Nebpumpe
- Flussrate Nebpumpe
- UV-Detektor Wellenlänge
- Wellenlänge [DAD]
- Masse [MS]
- Kanalnummer
- Schwellwert
- Ventilposition
- Limiter Maximalwert
- Fraktionssammlerposition
- Temperatur
- Zeit/Volumen einer Zeittabellenfunktion (einschließlich Endzeit eines programmierten Schwellwertes)
- Zeitverschiebung

Um bei der Programmierung einer Zeittabelle eine der definierten Variablen einzufügen, halten Sie in der Registerkarte *FUNKTIONEN* die linke Maustaste im Parameter-Textfeld gedrückt. Es erscheint ein Auswahlmenü mit allen geeigneten Variablen.

Die Variable *ZEITVERSCHIEBUNG* kann nicht in die Zeittabelle eingefügt werden. Der Standardwert dieser Variablen definiert eine Retentionszeit. Alle Funktionen, die nach dieser Retentionszeit folgen, werden um ein Zeitintervall verschoben, das in der Checkliste/ Sequenztabelle für diese Variable *ZEITVERSCHIEBUNG* eingegeben wurde.

6.2.4 Optionen

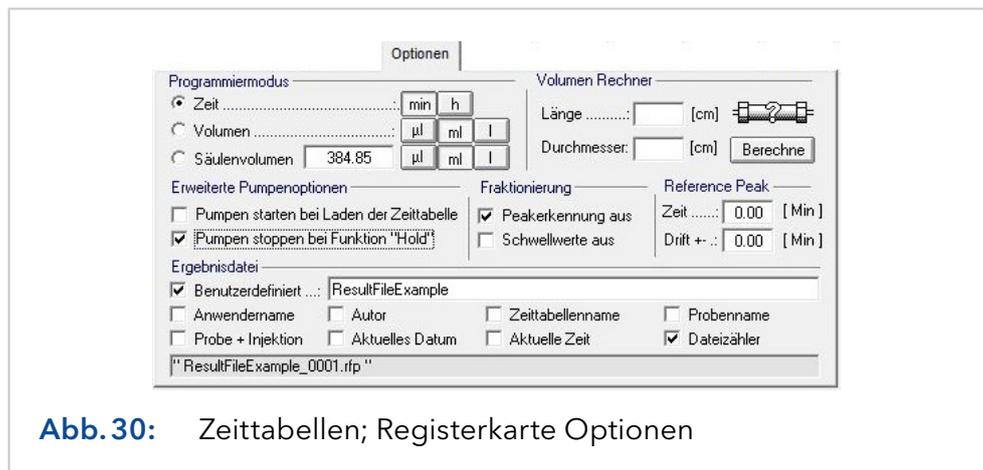


Abb. 30: Zeittabellen; Registerkarte Optionen

Auf der Registerkarte *OPTIONEN* können Sie die Abmessungen der X-Achse im *PROGRAMMIERMODUS* einstellen. Sie haben die Wahl zwischen Zeit, Volumen oder Säulenvolumen. Sie können auch die Größe der Einheiten neben jedem Programmiermodus wählen. Um die Bestimmung des Säulenvolumens bei der Programmierung in Einheiten des Säulenvolumens zu erleichtern, können Sie den Mini-Rechner auf der rechten Seite verwenden. Geben Sie dazu die Länge und den Innendurchmesser der Säule ein und klicken Sie auf die Schaltfläche *BERECHNE*. Das Säulenvolumen erscheint dann im Feld *SÄULENVOLUMEN*.

In den *ERWEITERTEN PUMPENOPTIONEN* können Sie mit der Option *PUMPEN STARTEN BEI LADEN DER ZEITABELLE* festlegen, ob die Pumpen nach dem Laden der Zeittabelle starten sollen, wobei die Parameter für den Zeitpunkt 0,00 Minuten programmiert sind. Mit der Option *PUMPEN STOPPEN BEI FUNKTION „HOLD“* können Sie bestimmen, ob die Pumpen bei einer Flussrate von 0 ml stoppen sollen, wenn die Funktion *ZEITABELLE ANHALTEN* ausgeführt wird.

Unter *FRAKTIONIERUNG* können Sie die programmierte Peak-Abtastung deaktivieren, indem Sie die Option *PEAKERKENNUNG AUS* wählen. *SCHWELLWERTE AUS* deaktiviert die für diese Zeittabelle programmierten Schwellwerte. Mit diesen Optionen können Sie die kollektiven Funktionen deaktivieren, ohne dass Sie die Schwellwerte oder Peak-Abtastwerte aus einem wertvollen Programm löschen müssen, die Sie später eventuell wieder benötigen.

Für die Funktion *REFERENCE PEAK* benötigen Sie ein Referenzchromatogramm mit einem Referenzpeak, der zu einem bestimmten Zeitpunkt eluiert. Diesen Zeitpunkt können Sie hier einstellen. Wenn Sie einen Schwellwert für diesen Peak programmieren, können Sie die Funktion *REFERENCE PEAK* wählen. Falls der Peak bei Ihrem nächsten Lauf zu einer anderen Zeit eluiert, werden alle Funktionen, die Sie nach dem Schwellwert programmiert haben, um die von Ihnen eingestellte Referenzzeit verschoben. Sie können auch einen Drift programmieren. Dies bedeutet, dass alle Funktionen aufgrund Ihrer Referenzzeit plus der Driftzeit verschoben werden.

ERGEBNISDATEI ermöglicht es Ihnen, die Namen der Ergebnisdateien einzugeben, die von dieser Zeittabelle erzeugt werden sollen. Sie können die Dateinamen mit Hilfe der folgenden 9 Namenssegmente festlegen:

1. *BENUTZERDEFINIERT* fügt dem Dateinamen einen benutzerdefinierten Text hinzu. Er sollte kurz genug sein, um in das Textfeld zu passen.
2. *ANWENDERNAME* fügt dem Dateinamen den Namen des aktuellen Benutzers hinzu.
3. *AUTOR* fügt dem Dateinamen den Namen des Autors der Zeittabelle hinzu.
4. *ZEITTABELLENNAME* fügt dem Dateinamen den Namen der Zeittabelle hinzu.
5. *PROBENNAME* fügt dem Dateinamen die Probenbezeichnung hinzu.
6. *PROBE + INJEKTION* fügt dem Dateinamen die Nummer des aktuellen Probenfläschchens und der aktuellen Injektion hinzu.
7. *AKTUELLES DATUM* fügt dem Dateinamen das aktuelle Datum hinzu.
8. *AKTUELLE ZEIT* fügt die aktuelle Zeit zum Dateinamen hinzu.
9. *DATEIZÄHLER* fügt eine vierstellige fortlaufende Nummer an das Ende des Dateinamens an, um zu verhindern, dass gleichnamige Ergebnisdateien überschrieben werden. Wenn Sie Ihre letzte Datei nicht verlieren wollen, sollten Sie immer dieses Namenssegment wählen.

6.2.5 Optionen für den Ausdruck

Auf der Registerkarte *AUSDRUCK* können Sie den Inhalt und das Design Ihrer Berichtsdatei (Report) für den automatischen Druck einrichten.

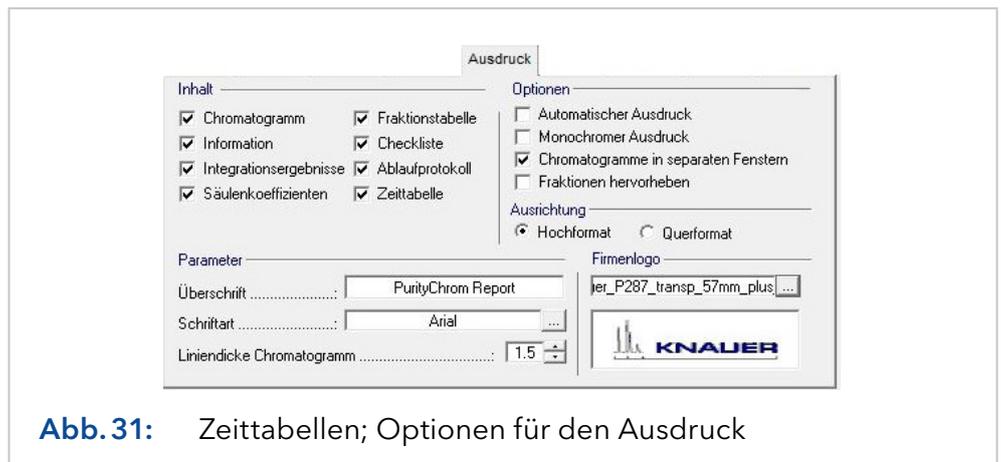


Abb.31: Zeittabellen; Optionen für den Ausdruck

Im Abschnitt *INHALT* können Sie festlegen, welche Daten Sie in Ihren Ausdruck aufnehmen möchten. Neben dem Chromatogramm können Sie verschiedene Daten, Tabellen und Protokolle auswählen.

Im Abschnitt *OPTIONEN* können Sie ankreuzen, ob der Ausdruck nach jedem Lauf automatisch ausgeführt werden soll. Es ist auch möglich, einen monochromen Ausdruck zu erstellen, jeden Datenkanal in einem separaten Fenster zu zeigen sowie die Fraktionen hervorzuheben.

Das Layout kann im Abschnitt *AUSRICHTUNG* zwischen Hoch- und Querformat variiert werden.

Im Abschnitt *PARAMETER* und *FIRMENLOGO* können Sie Ihr individuelles Design mit einer individuellen Überschrift, Schriftart, Liniendicke von Chromatogrammen und einem Firmenlogo anpassen.

Das Logo sollte als Bitmap-Datei mit den Maßen 154 x 42 Pixel vorliegen.

6.2.6 Einstellungen für Diodenarray-Detektoren (DAD)

Die Parameter des Diodenarray-Detektors werden in der Registerkarte *DAD* definiert. Um einen DAD-Detektor zu verwenden, müssen Sie die Voll-Lizenz um eine DAD-Lizenz ergänzen. Wählen Sie unter *DATEN-QUELLE* die Quelle des Datenkanals aus. Sie können entweder die A/D-Wandlerkarte per *A/D-WANDLER* für die Leitfähigkeits-, pH- oder Analogsignale oder die Daten des DAD per *DAD* wählen. Wählen Sie den Wellenlängenbereich der DAD-Kanäle in den nebenstehenden Eingabefeldern.

Bei der Verwendung von DAD können Sie die Wellenlänge nicht über den Funktionsknopf „Wellenlänge“ aus dem Hauptfenster auswählen. Die Auswahl der Kanäle erfolgt in diesem Fenster oder in der Chromatogrammansicht (siehe Datenkanaleinstellung). Die Auswahl der Datenkanäle wird beim Laden der Zeittabelle automatisch übernommen. Wählen Sie die Slicewidth (Datendichte) und Bandbreite, ansonsten werden die voreingestellten Werte aus der Datei PurityChrom.ini übernommen. Eine maximale Datenrate von 10 Hz (100 ms) wird unterstützt.

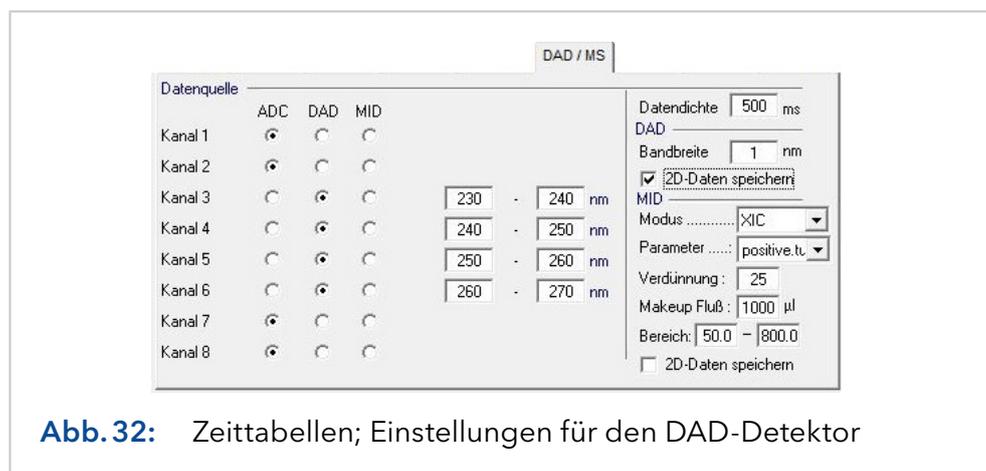


Abb.32: Zeittabellen; Einstellungen für den DAD-Detektor

Geben Sie im Eingabefeld *DATENDICHTE* die Datenrate der DAD-Kanäle in ms ein.

Der Parameter *BANDBREITE* wird zur Mittelwertbildung der Messwerte verwendet, um das Signalrauschen zu reduzieren. Bei einer Bandbreite von z.B. 5 nm wird das Signal jeder Wellenlänge über einen Bereich von +/- 2 nm gemittelt. Bei Eingabe einer Bandbreite von 1 nm wird kein Mittelwert berechnet.

Durch Wahl der Option *SPEKTRUM SPEICHERN* wird der Spektrendatensatz des DAD im ChromStar-DAD-Datenformat gespeichert.

6.2.7 Funktionen der Zeittabelle

In der Registerkarte *FUNKTIONEN* finden Sie eine Liste aller programmierbaren Funktionen der Zeittabelle. Am unteren Ende des Registers befindet sich die Editorleiste, in der alle Funktionen mit Zeit und Parametern einzugeben sind. Die Parameterfelder in der Editorleiste ändern sich je nach gewählter Funktion. Die Schaltfläche *EINFÜGEN* fügt den Inhalt der aktuellen Editorleiste in die Zeittabelle ein. Die Reihenfolge, in der Sie Ihre Eingaben machen, ist unerheblich, da alle Programmzeilen chronologisch geordnet werden. Die Drucktaste *ÜBERSCHREIBEN* überschreibt

den Inhalt der von Ihnen gewählten Zeile mit dem Inhalt der Editorleiste. Die Drucktaste **LÖSCHEN** löscht die von Ihnen markierte Zeile.

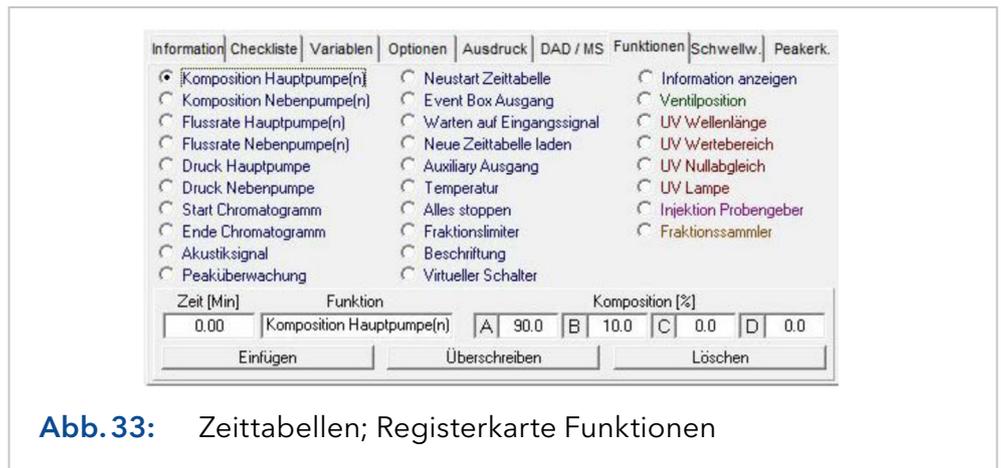


Abb. 33: Zeittabellen; Registerkarte Funktionen

KOMPOSITION HAUPTPUMPE(N) bestimmt die Eluentenzusammensetzung für die Hauptpumpen im System. Die Eingaben erfolgen in Prozent, und während Sie die Eingaben vornehmen, macht die Eingabe im folgenden Feld immer die Differenz zu 100% aus.

KOMPOSITION NEBENPUMPE(N) bestimmt die Eluentenzusammensetzung für die Nebenpumpen im System (z.B. für Säulenconditionierung, Probenapplikation etc.). Die Angaben erfolgen ebenfalls in Prozent.

FLUSSRATE HAUPTPUMPE(N) bestimmt die Flussrate der Hauptpumpen im System. Änderungen werden schrittweise vorgenommen, d.h. ein Flussratengradient kann nicht erzeugt werden. Die Eingabe erfolgt in ml/min. Es ist auch möglich, einen konstanten Druck für die Hauptpumpe einzustellen. In diesem Fall passt die Pumpe die Flussrate entsprechend dem eingestellten Druck an (wird von KNAUER-Pumpen nicht unterstützt).

FLUSSRATE NEBENPUMPE(N) bestimmt die Flussrate für die Nebenpumpen im System. Die Eingabe erfolgt ebenfalls in ml/min. Es ist auch möglich, einen konstanten Druck für die Nebenpumpe einzustellen. In diesem Fall passt die Pumpe die Flussrate entsprechend dem eingestellten Druck an (wird von KNAUER-Pumpen nicht unterstützt).

DRUCK HAUPTPUMPE bestimmt das Verhalten der Pumpe bei den eingeschriebenen Werten. Der eingestellte Wert wird an die Pumpe gesendet und wird gespeichert. Durch Öffnen und Speichern des Setups oder Neustart der Software wird der eingestellte Maximal- und Minimaldruck im Register *VOREINSTELLUNGEN* aus dem Setup an die Pumpe gesendet.

- *MINIMALDRUCK*: Pausieren der Methode und Stoppen der Pumpe, wenn der Druck 20 Sekunden lang konstant unter dem festgelegten Wert lag.
- *MAXIMALDRUCK*: Pausieren der Methode und Anhalten der Pumpe bei Überschreiten des Drucks, wenn der festgelegte Wert überschritten wird.
- *DRUCKLIMIT* (von KNAUER-Pumpen nicht unterstützt): Die automatische Flussratenregelung beginnt zu arbeiten, wenn der festgelegte Wert erreicht ist.

DRUCK NEBENPUMPE bestimmt das Verhalten der Pumpe bei den eingeschriebenen Werten. Durch Öffnen und Speichern des Setups oder Neustart der Software wird der eingestellte Maximal- und Minimal-

druck im Register *VOREINSTELLUNGEN* aus dem Setup an die Pumpe gesendet.

- *MINIMALDRUCK*: Pausieren der Methode und Stoppen der Pumpe, wenn der Druck 20 Sekunden lang konstant unter dem festgelegten Wert lag.
- *MAXIMALDRUCK*: Pausieren der Methode und Anhalten der Pumpe bei Überschreiten des Drucks, wenn der festgelegte Wert überschritten wird.
- *DRUCKLIMIT* (von KNAUER-Pumpen nicht unterstützt): Die automatische Flussratenregelung beginnt zu arbeiten, wenn der festgelegte Wert erreicht ist.

START CHROMATOGRAM startet die Chromatogrammaufzeichnung für die ausgewählten Kanäle mit der unter *DATEN* eingegebenen Datendichtedichte (max. 60 ms). Die UV-Kanäle belegen die ersten Kanäle, und das Leitfähigkeitssignal, das pH-Signal und die Temperatur oder der RID-Kanal folgen in dieser Reihenfolge. Die letzten Kanäle werden von FLD- oder Interface-Box-Kanälen belegt. Die Basislizenz umfasst drei Datenkanäle sowie Durchflussraten- und Druckaufzeichnung. Die Volllizenz unterstützt acht Datenkanäle plus Flussraten- und Druckaufzeichnung.

ENDE CHROMATOGRAM stoppt die Chromatogrammaufzeichnung für die gewählten Analogkanäle oder, wenn *ALLE AKTIV* gewählt ist, stoppt die Chromatogrammaufzeichnung für alle gestarteten Analogkanäle.

AKUSTIKSIGNAL initiiert eine Tonwiedergabe der ausgewählten Wave-Datei mit einem Intervall von 4 Sekunden. Mit der Test-Taste  können Sie die Datei anhören. Der Ton wird beendet, wenn die Zeittabelle angehalten wird.

PEAKÜBERWACHUNG wird zur Überwachung von Peakhöhen und Peakzeiten verwendet. Sie arbeitet in Verbindung mit dem Befehl *NEUSTART ZEITTABELLE* und tritt in Kraft, wenn die Zeittabelle während zyklischer Abflüsse neu gestartet wird. Als Parameter müssen die Endzeit in Minuten (*ENDE*) und der Grenzwert in mV (*WERT*) eingegeben werden. Eine Spitzenwertbegrenzung ermöglicht den Neustart der Zeittabelle nur dann, wenn ein oder mehrere Spitzenwerte den Grenzwert überschreiten und dann während der Zeitdauer der Zeittabelle wieder unter diesen Wert fallen. Wenn eine oder mehrere Spitzenwertgrenzen ausfallen, wird der Befehl *NEUSTART* ignoriert, und Sie erhalten eine Fehlermeldung auf dem Bildschirm.

NEUSTART ZEITTABELLE wird verwendet, um die Zeittabelle von vorn beginnen zu lassen. Sie können den Parameter *SCHLEIFE* für eine Endlosschleife oder *[X] NEUSTARTS* wählen, um eine bestimmte Anzahl von Wiederholungen einzugeben. Sobald alle Wiederholungen ausgeführt wurden, wird dieser Befehl ignoriert. Deshalb müssen Sie diese Funktion am Ende Ihrer Zeittabelle und vor der Funktion *ALLES STOPPEN* programmieren. Bevor Sie Ihre Zeittabelle neu starten, verwenden Sie die Funktion *ENDE CHROMATOGRAMM*, um Ihre Datenaufzeichnung auch von vorn zu beginnen.

EVENT BOX AUSGANG wird verwendet, um einen der 12 Event Box-Ausgänge zu schalten. Der gewünschte Event Box Ausgang und der Zustand, in den geschaltet werden soll (Aus, Ein, Puls), müssen als Parameter ausgewählt werden. *PULS* bedeutet, dass das Ereignis ein- und wieder ausgeschaltet werden muss.

WARTEN AUF EINGANGSSIGNAL unterbricht die Fortsetzung der Zeittabelle durch die Zeit (*HALTEFUNKTION*), bis der ausgewählte Event Box Eingang oder der Gameport den Zustand AUS, EIN oder PULS programmiert hat. Aus: Die Zeittabelle wird fortgesetzt, wenn der Auslöser ausgeschaltet bleibt. Ein: Die Zeittabelle wird fortgesetzt, wenn der Auslöser in den Zustand Ein schaltet und einen Kurzschluss erzeugt. Puls: Der Zeitplan wird fortgesetzt, wenn der Trigger in den Zustand ein und wieder ausschaltet. Diese Funktion kann z.B. bei der Injektion mittels eines manuellen Injektionsventils verwendet werden. Bei Zeit/Volumen/Säulenvolumen 0,00 können Sie diese Funktion nicht verwenden. Wenn Sie mit dem Trigger eine Zeittabelle starten wollen, müssen Sie im Eingabefeld *ZEITTABELLE STARTEN* (s. Kapitel 4.1 auf Seite 12) den entsprechenden Event Box Eingang bzw. Gameport Eingang aktivieren.

Wenn Sie ein Triggerkabel verwenden, müssen Sie den Event Box-Eingang 1 wählen. Außerdem muss die PurityChrom.ini-Datei [Pumps → IOcontrol=1] (s. Kapitel 23 auf Seite 107) geändert werden, wenn Sie Ihre Pumpe in Abhängigkeit vom Trigger starten wollen.

NEUE ZEITTABELLE LADEN wird verwendet, um die ausgewählte Zeittabelle zu laden und zu starten. Auf diese Weise können Sie mehrere Zeittabellen miteinander verknüpfen.

DER AUXILIARY AUSGANG wird zum Schalten des Hilfsausgangs der Pumpenschnittstelle verwendet. Mit dieser Funktion können Sie einen Relaiskontakt steuern. Sie können als Parameter *EIN* oder *AUS* wählen.

TEMPERATUR wird verwendet, um bis zu zwei Systemtemperaturen zu programmieren. Die Parameter sind die Temperaturen in °C.

ALLES STOPPEN wird verwendet, um einen Lauf zu beenden und die Pumpen anzuhalten.

FRAKTIONSLIMITER wird zur Programmierung von Fraktionsgrenzen verwendet. Sie können ein maximales Volumen in ml oder eine maximale Zeit in Sekunden eingeben. Der programmierte Wert ändert die Einstellung des Limiters nicht, sondern wird als aktueller Wert übernommen.

BESCHRIFTUNG wird verwendet, um den Chromatogrammen manuelle Textanmerkungen hinzuzufügen.

DER VIRTUELLE SCHALTER wird zur Programmierung von bis zu 10 virtuellen Schaltern verwendet. Dieser virtuelle Schalter ist nur eine Variable, die auf 0 oder 1 gesetzt werden kann. Beispiel: Sie können diesen Schalter mit einer Schaltfläche in Ihrer Visualisierung verknüpfen. In Ihrer Zeittabelle können Sie mit der Funktion *WARTEN AUF EINGANGSSIGNAL* programmieren, dass auf den auf 1 gesetzten virtuellen Schalter gewartet wird. Dann wird Ihre Zeittabelle so lange gehalten, bis Sie den virtuellen Schalter durch Drücken der Taste in Ihrer Visualisierung auf 1 schalten. Diese virtuellen Schalter können den Zustand *EIN* oder *AUS* haben.

INFORMATION ANZEIGEN wird verwendet, um benutzerdefinierte Informationen anzuzeigen, die im Etikett Information der Systemvisualisierung angezeigt werden.

VENTILPOSITION wird zum Schalten von Ventilen verwendet. Wählen Sie das gewünschte Ventil und die gewünschte Position als Parameter aus.

UV-WELLENLÄNGE wird verwendet, um je nach Detektor bis zu 4 Wellenlängen eines UV-Detektors zu programmieren.

UV WERTEBEREICH wird verwendet, um den Bereichswert eines UV-Detektors zu programmieren.

UV NULLABGLEICH bewirkt, dass der UV-Detektor automatisch auf null zurückkehrt.

UV LAMPE wird verwendet, um die Lampe vom UV-Detektor ein- oder auszuschalten. (Nur wenn unterstützt).

INJEKTION PROBENGEBER wird verwendet, um eine Injektion von einem Autosampler aus durchzuführen. Für die Verwendung eines Autosamplers benötigen Sie die Volllizenz. Diese Funktion kann nur in Verbindung mit einer Probengeber- oder Sequenztabelle verwendet werden. Der Ablauf der Zeittabelle wird während der Injektionsphase angehalten und die Anzeige der abgelaufenen Zeit im Hauptfenster zeigt abwechselnd die verstrichene Zeit und die Injektion an.

FRAKTIONSSAMMLER wird verwendet, um eine Fraktionssammlerposition zu programmieren. Die Parameter können eine Rückkehr zur Ausgangsposition (*HOME*), eine Bewegung zu einer weiteren Position (*STEP*) oder eine Positionsnummer (*POSITION*) sein.

6.3 Verwendung der AZURA®-Pumpe P 6.1L (Version mit Hochdruckgradient)

Bei Verwendung des P 6.1L (Hochdruckgradient-Version) müssen Sie das Lösungsmittelauswahlventil separat konfigurieren, indem Sie zwei Standardventile wählen (s. Kapitel 4.2 auf Seite 13). Das erste Ventil kann zwischen A1 (Position 1) und A2 (Position 2) und das zweite zwischen B1 (Position 1) und B2 (Position 2) umschalten. Verwenden Sie den Startpunkt Ihrer Zeittabelle-Steuerdatei, um diese Ventile auf die Position einzustellen, die Ihrem gewünschten Lösungsmittel entspricht.



Hinweis: Während eines Laufs ist es nicht empfehlenswert, diese Ventile zu schalten.

6.4 Fraktionierung mit einem Fraktionssammler

Zuerst müssen Sie das Ventil Ihres Fraktionssammlers im PurityChrom-Setup (s. Kapitel 4.3 auf Seite 14), die Beschriftungen (s. Kapitel 4.4 auf Seite 16), das Totvolumen oder die Totzeit (s. Kapitel 4.7 auf Seite 19) und Ihr Rack, das Sie verwenden möchten, konfigurieren (s. Kapitel 17.4 auf Seite 90). Zu dem jeweiligen Zeitpunkt, an dem Sie mit der Fraktionierung beginnen möchten, müssen Sie die Funktion *FRAKTIONSSAMMLER* wählen und dem Sammelarm die Position mitteilen, an der er mit der Fraktionierung beginnen soll. Wenn Sie *STEP* wählen, schaltet er auf die nächste Position im Rack um.

Die aktuelle Position des Fraktionssammlerarms wird gespeichert, bis das Programm aus- und wieder eingeschaltet wird. Durch Programmierung der Funktion *FRAKTIONSSAMMLER STEP* am Anfang der Zeittabelle wird der Arm beim Laden der Zeittabellen-Steuerdatei zur nächsten Position springen und dies beim Start der Zeittabelle wiederholen. Um dies zu vermeiden, können Sie diese Funktion z.B. bei 0.01 min/ml/CV programmieren. Als nächstes müssen Sie das Ventil des Fraktionssammlers von Abfall auf Fraktion umschalten und ein Volumen- oder Zeitlimit einstellen,

aber nur, wenn es sich von dem im Setup eingestellten Limit unterscheidet (s. Kapitel 4.3 auf Seite 14).

6.5 Fraktionieren mit einem Multipositionsventil

Zuerst müssen Sie im PurityChrom-Setup das Ventil (s. Kapitel 4.3 auf Seite 14), die Anmerkungen (s. Kapitel 4.4 auf Seite 16)) und das Totvolumen oder die Totzeit (s. Kapitel 4.7 auf Seite 19) konfigurieren. Zu dem jeweiligen Zeitpunkt, an dem Sie mit der Fraktionierung beginnen wollen, müssen Sie das Multipositionsventil von Abfall auf Fraktion umstellen und ein Volumen- oder Zeitlimit einstellen, aber nur, wenn es sich von dem im Setup eingestellten Grenzwert unterscheidet (s. Kapitel 4.3 auf Seite 14). Sie können eine bestimmte Position wählen oder Sie wählen den Befehl *NÄCHSTE POSITION*, um automatisch zur nächsten Position zu gehen. Die Positionen Ihrer gesammelten Fraktionen werden von der Software nach dem Wechsel zur Abfallposition (*WASTE*) nicht gespeichert.

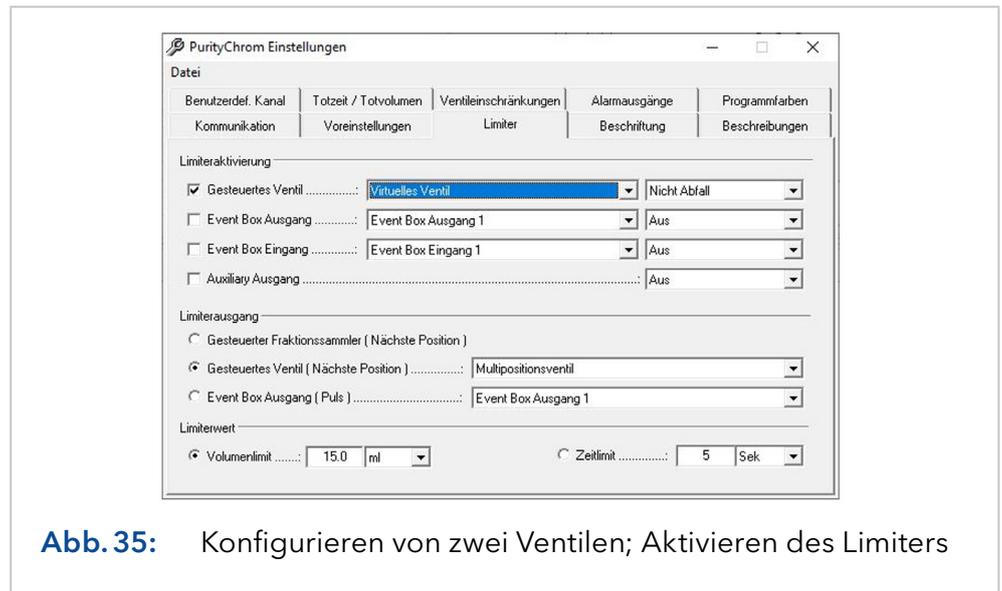
Wenn Sie möchten, dass sich das Ventil seine Position nach dem Umschalten auf *WASTE* (Abfall) merkt und Sie mit einem KNAUER-Multipositionsventil arbeiten, können Sie dazu ein virtuelles Ventil mit dem physikalischen Ventil kombinieren. Dazu müssen Sie zwei Ventile im PurityChrom Setup konfigurieren. Das virtuelle Ventil schaltet zwischen Abfall und Fraktion um und das Multipositionsventil arbeitet wie gewohnt.

Im Setup muss das virtuelle Ventil mit derselben Adresse und demselben Winsock-Anschluss wie das Multipositionsventil konfiguriert werden, jedoch mit zwei Positionen. Das Multipositionsventil wird wie üblich konfiguriert.



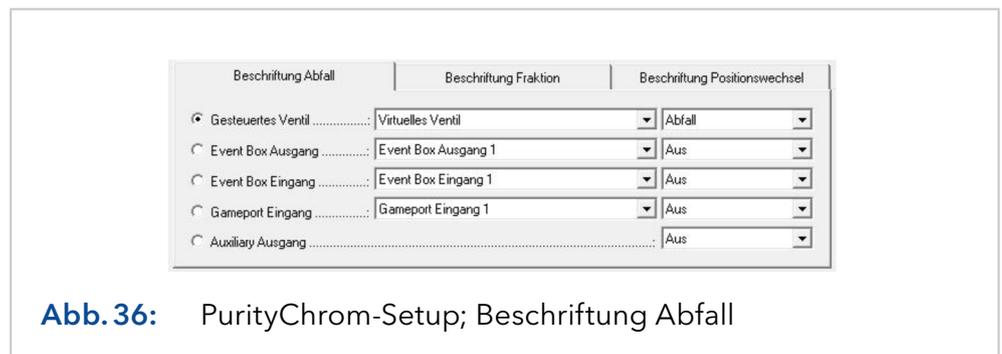
Abb. 34: Konfigurieren von zwei Ventilen im PurityChrom-Setup

Um die Fraktionierung einzustellen, verwenden Sie das virtuelle Ventil für die Aktivierung des Limiters, wenn es sich nicht in der Abfallposition befindet, und das Multipositionsventil als Ausgangsventil des Limiters.

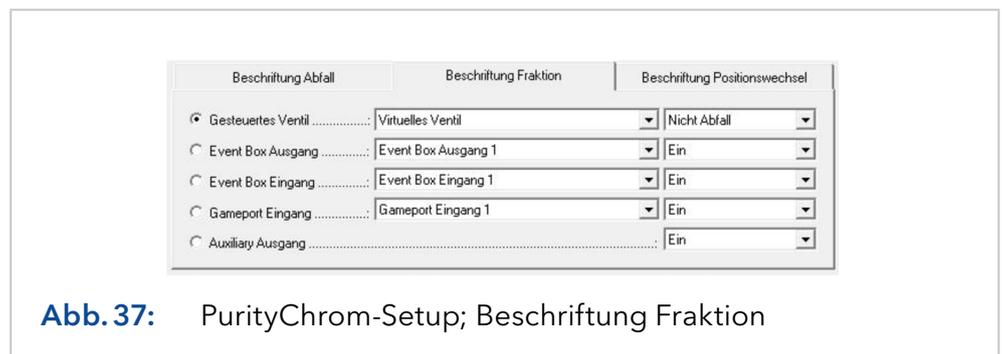


Legen Sie in der Registerkarte *BESCHRIFTUNG* die Beschriftung wie folgt fest:

- Beschriftung Abfall: Gesteuertes Ventil: Virtuelles Ventil im Abfall



- Beschriftung Fraktion: Gesteuertes Ventil: Virtuelles Ventil in Fraktion (Nicht Abfall)



- Beschriftung Positionswechsel: Positionswechsel gesteuertes Ventil: Multipositionsventil



Abb. 38: PurityChrom-Setup; Beschriftung Positionswechsel

Beim Schreiben einer Methode verwenden Sie den Schwellwert für die Fraktionierung und setzen im Threshold-Over-Event das virtuelle Ventil in die Fraktionierungsposition und das Multipositionsventil in die nächste Position.



Note: Achten Sie darauf, die Reihenfolge dieser beiden Funktionen nicht zu verändern!

Stellen Sie bei der *SCHWELLWERT UNTERSCHREITUNG* das virtuelle Ventil in die *POSITION ABFALL*.

Wenn Sie die Fraktionierung auch über die Visualisierung steuern wollen, müssen Sie beide Ventile in der Visualisierung einstellen. Das virtuelle Ventil schaltet den Limiter ab und das Multipositionsventil definiert die Fraktionsstellung.

Tipp: Verwenden Sie die Ein/Aus-Schaltfläche als Visualisierungselement für das virtuelle Ventil.

6.6 Programmieren von Schwellwerten

SCHWELLWERT: Auf der Registerkarte „*SCHWELLW.*“ können Sie Schwellwerte programmieren, d.h. eine Reihe von Gerätesteuerfunktionen können ausgeführt werden, wenn ein Wert den Schwellwert über- oder unterschreitet. Dank ihrer wählbaren Datenquelle, ihres programmierbaren Zeitrahmens für Aktivitäten sowie programmierbarer Levels ermöglichen die Schwellwerte eine individuelle Fraktionierung oder Systemüberwachung. Bis zu 50 Schwellwerte können gleichzeitig aktiv sein.

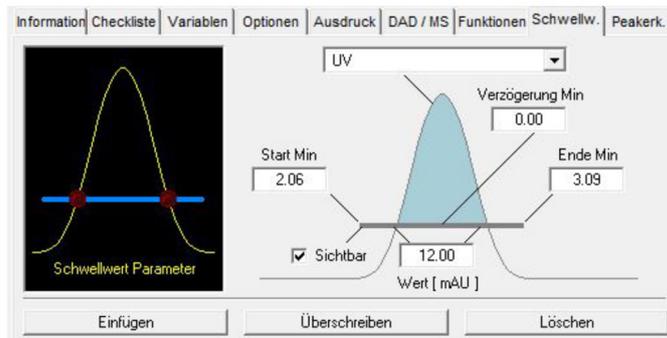


Abb. 39: Programmieren von Schwellwerten

Das Diagramm auf der linken Seite der Registerkarte dient zur Auswahl der Schwellwertparameter. Klicken Sie auf die schwarze Fläche in der

Grafik erscheinen die Kästchen für die allgemeinen Schwellwertparameter. Im oberen Kästchen können Sie die Datenquelle eines Schwellwertes auswählen. Sie können zwischen allen analogen Kanälen, dem Systemdruck, den Eingängen der Event Box und den Gameporteingängen wählen.

START MIN und *ENDE MIN*: Die Felder *START MIN* und *ENDE MIN* legen den Zeitrahmen für die Aktivität des Schwellwerts fest.

WERT: Das Feld *WERT* ist für den Schwellwert. Bei Verwendung von Event Box- oder Gameport-Eingängen ist dieser Parameter nicht verfügbar, da die Datenquelle nur zwei mögliche Zustände hat (Niedrig = Schwellwert Unterschreitung, Hoch = Schwellwert Überschreitung).

VERZÖGERUNG MIN: Der Parameter *VERZÖGERUNG MIN* verzögert die Ausführung der programmierten Funktionen bei *SCHWELLWERT ÜBERSCHREITUNG* in diesem Schwellwert.

SICHTBAR: Wenn Sie die Option *SICHTBAR* wählen, wird die grafische Linie dieser Schwelle in den Analysefenstern angezeigt. Andernfalls bleibt sie unsichtbar.

Klicken Sie auf den linken roten Punkt in der Grafik und es erscheint die Funktionstabelle für eine *SCHWELLWERT ÜBERSCHREITUNG*, d.h. die Funktionen, die bei Überschreiten des Schwellwertes ausgeführt werden sollen, müssen hier definiert werden.

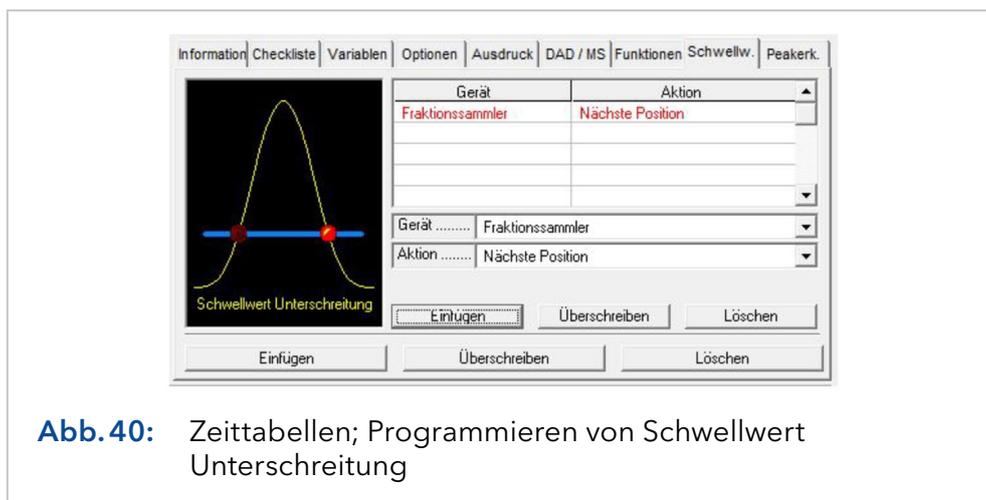


Abb. 40: Zeittabellen; Programmieren von Schwellwert Unterschreitung

Mit den Auswahlfeldern *GERÄT* und *AKTION* können Sie die gewünschte Funktion einstellen, und mit der Schaltfläche *EINFÜGEN* werden diese Funktionen in die Zeittabelle übernommen.

Mit der Schaltfläche *ÜBERSCHREIBEN* können Sie eine markierte Zeile überschreiben, mit der Taste *LÖSCHEN* können Sie sie löschen. Wenn Sie auf den rechten roten Punkt klicken, erscheint die Funktionstabelle für *SCHWELLWERT UNTERSCHREITUNG*, d.h. die Funktionen, die ausgeführt werden, wenn der Wert unter dem Schwellwert liegt. Funktionen können hier auf genau die gleiche Weise wie bei *SCHWELLWERT ÜBERSCHREITUNG* eingestellt werden.

6.7 Schwellwert Programmierung mit logischen Verknüpfungen

Als Über- und Unterschreitungsfunktionen können die Eingänge von Logikgattern gesetzt werden. Logische Gatter können verwendet werden, um mehrere Kanäle gleichzeitig zu überwachen und die Kombination dieser Kanäle als Eingang für die Fraktionierung zu verwenden. PurityChrom verwaltet 10 einzelne logische Gatter. Für jedes Gatter können mehrere Eingänge von vier internen Gattern auf 0 oder 1 gesetzt werden. Die vier internen Gatter sind ODER-Gatter (OR), UND-Gatter (AND), NICHT-UND-Gatter (AND NOT) und Exklusiv-Oder-Gatter (XOR). Diese internen Gatter werden in der folgenden Reihenfolge ausgewertet: OR-AND-AND NOT-XOR. Wenn ein internes Gatter das Ergebnis 0 ergibt, wird die Auswertung gestoppt, und das Logikgatter wird insgesamt auf 0 gesetzt. Wenn z.B. die Eingänge des OR-Gatters ausgewertet werden und das Ergebnis 0 ist, werden die anderen logischen Gatter nicht verarbeitet.

Die verschiedenen Eingänge und ein Ausgang eines Logikgatters können die Binärwerte 0 oder 1 haben.

A	B	Y	A	B	Y	A	B	Y	A	B	Y
0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
0	1	1	0	1	0	0	1	1	0	1	1
1	0	1	1	0	0	1	0	1	1	0	1
1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1	0
OR-Gatter			AND-Gatter			NOT AND-Gatter			XOR-Gatter		

Abb. 41: Wahrheitstabelle der Logikgatter

Der Ausgang des OR-Gatters hat den Wert 1, wenn mindestens 1 Eingangswert 1 ist. Der Ausgang des AND-Gatters ist 1, wenn alle Eingänge 1 sind. Der Ausgang des AND NOT-Gatters hat den Wert 1, wenn mindestens ein Eingang den Wert 1 hat, und der Ausgang des XOR-Gatters hat den Wert 1, wenn genau 1 Eingang den Wert 1 hat. Die logischen Operationen, die zu den Ausgängen führen, sind in den Wahrheitstabellen für die vier verwendeten Logikgatter dargestellt.

Beispiel: Logische Gatter können zum Sammeln von Fraktionen verwendet werden, wenn ein definierter UV-Kanal (Kanal 1) und ein definierter MS-Kanal (Kanal 2) über dem Schwellwert liegen, während ein anderer MS-Kanal (Kanal 3) nicht über dem Schwellwert liegt.

Der Schwellwert 1 wird für Kanal 1 programmiert: bei Überschreiten des Schwellwertes wird ein AND-Eingang des Logikgatters 1 auf 1 gesetzt, bei Unterschreiten des Schwellwertes wird der Eingang wieder auf 0 gesetzt, indem ein AND-Eingang des Logikgatters 1 auf 1 bei „Überschreitung“ bzw. auf 0 bei „Unterschreitung“ gesetzt wird.

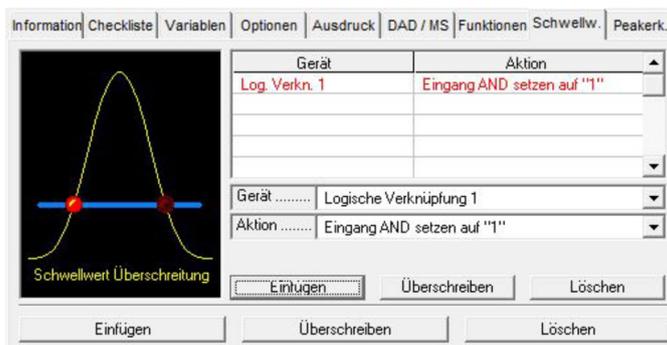


Abb. 42: Schwellwert 1 mit Logikgatter 1

Auf die gleiche Weise wird ein weiterer Schwellwertüberwachungskanal 2 programmiert, indem ein weiterer AND-Eingang des Logikgatters 1 auf 1 (für „Überschreitung“) bzw. auf 0 (für „Unterschreitung“) gesetzt wird. Ein dritter Schwellwert überwacht Kanal 3 und setzt den AND NOT-Eingang von Logikgatter 1 auf 1 (für „Überschreitung“) bzw. 0 (für „Unterschreitung“).

Der Ausgang von Logikgatter 1 ist jetzt 1, wenn beide Signale von Kanal 1 und 2 über dem Schwellwert liegen, während Kanal 3 unter dem Schwellwert liegt. Dieses Verhalten kann auch durch die entsprechende Wahrheitstabelle demonstriert werden, die die AND-Eingänge A und B mit dem AND NOT-Eingang C zum Ausgang Y des logischen Gatters verbindet. Ist das AND der Kanäle 1 und 2 gleich 0, so wird das AND NOT nicht ausgewertet (straffierte Felder in der Wahrheitstabelle).

A	B	C	Y
0	0	0	0
0	1	0	0
1	0	0	0
1	1	0	1
0	0	1	0
0	1	1	0
1	0	1	0
1	1	1	0

Abb. 43: Wahrheitstabelle mit kombinierten Logikgattern

Für die Fraktionierung kann ein weiterer Schwellwert mit Logikgatter 1 als Eingang verwendet werden.

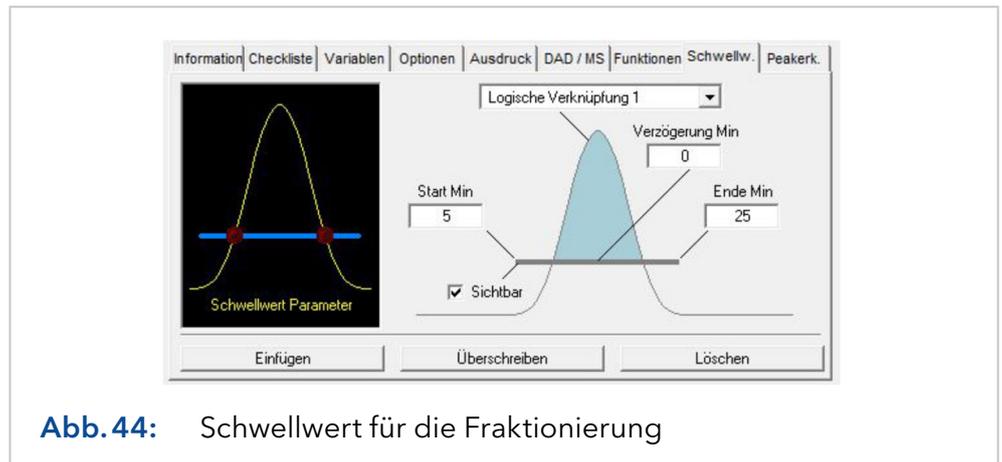


Abb.44: Schwellwert für die Fraktionierung

6.8 Programmierung der Spitzenabtastung

Auf der Registerkarte *PEAKERKENNUNG* („PEAKERK.“) können Sie die Peakabtastung programmieren. Die Peakabtastung ist eine Möglichkeit, eine Reihe von Gerätesteuerfunktionen auf der Grundlage automatisch erkannter Peak-Situationen auszuführen. Die Peakabtastung findet in Peakfenstern statt, deren Start- und Endzeit vom Benutzer eingestellt werden können. Sie können die Datenquelle, die Empfindlichkeit der Peakerkennung und die auszuführenden Funktionen für jedes Peakfenster separat auswählen. So können Sie individuell auf einzelne Peaks reagieren.

Bei der Fraktionierung in Kombination mit Schwellwerten bilden die Schwellwerte und die Peakabtastung immer ein Fraktionierungsereignis. Das heißt, solange der Schwellwert noch überschritten ist oder die Peakabtastung das Ende eines Peaks noch nicht erkannt hat, wird die Fraktionierung fortgesetzt.

Über den Button *CHROMATOGRAMM LADEN*  kann zunächst ein bereits aufgenommenes Chromatogramm geöffnet werden, das dann als Vorlage zur Definition der Peakfenster dient. Solange keiner der roten oder blauen Punkte in der Peakerkennungsgrafik angeklickt ist, können die Eckdaten der Peakerkennung angegeben werden.

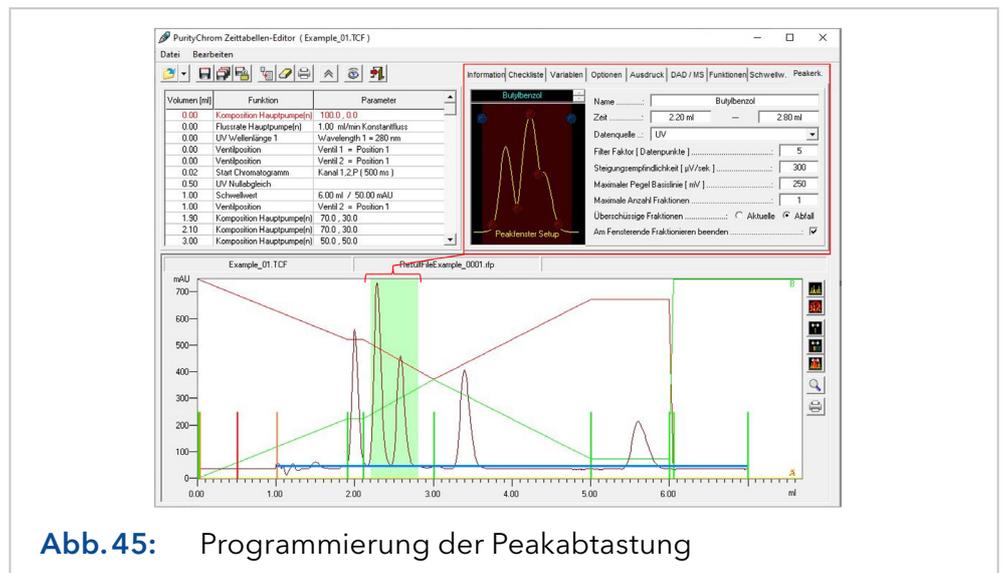


Abb.45: Programmierung der Peakabtastung

NAME: Im Feld *NAME* kann der Name des Peakfensters eingegeben werden.

ZEIT: Die Zeitfelder sind für Start- und Endpunkt des Peakfensters.

DATENQUELLE: In dem drop-down Menü können Sie zwischen Ihren einzelnen Datenkanälen auswählen.

FILTER-FAKTOR (DATENPUNKTE): Der Parameter *FILTERFAKTOR* gibt die Anzahl der Datenpunkte an, die für die erste Ableitung bei der Berechnung des Gradienten verwendet wurden.

STEIGUNGSEMPFINDLICHKEIT: Die *STEIGUNGSEMPFINDLICHKEIT* gibt die Größe der Steigung an, ab der der Beginn eines Peaks erkannt wird.

MAXIMALER PEGEL BASISLINIE wird als Schwellwert für die Peakerkennung verwendet. Über dem eingegebenen Wert wird kein Peakende erkannt.

MAXIMALE ANZAHL FRAKTIONEN: Dieser Parameter ist nur für die Einstellung *DEFINIERT DURCH PEAKFENSTER* relevant, die eine mögliche Positionseinstellung für motorisierte Schaltventile ist. Er gibt die maximale Anzahl von Fraktionen an, die in diesem Peakfenster auftreten können.

ÜBERSCHÜSSIGE FRAKTIONEN: Diese Option legt fest, wohin die Fraktionen, die die maximale Anzahl von Fraktionen überschreiten, gepumpt werden sollen. Die Einstellung *AKTUELLE* sammelt die Fraktion weiter an der aktuellen Position, und die Einstellung *ABFALL* sorgt für die Umleitung zum Abfall.

AM FENSTERENDE FRAKTIONIEREN BEENDEN: Diese Option gibt an, ob die Fraktionierung nach dem Ende der Zeitspanne eines Peakfensters fortgesetzt werden soll oder ob das System auf Abfall umschalten soll.

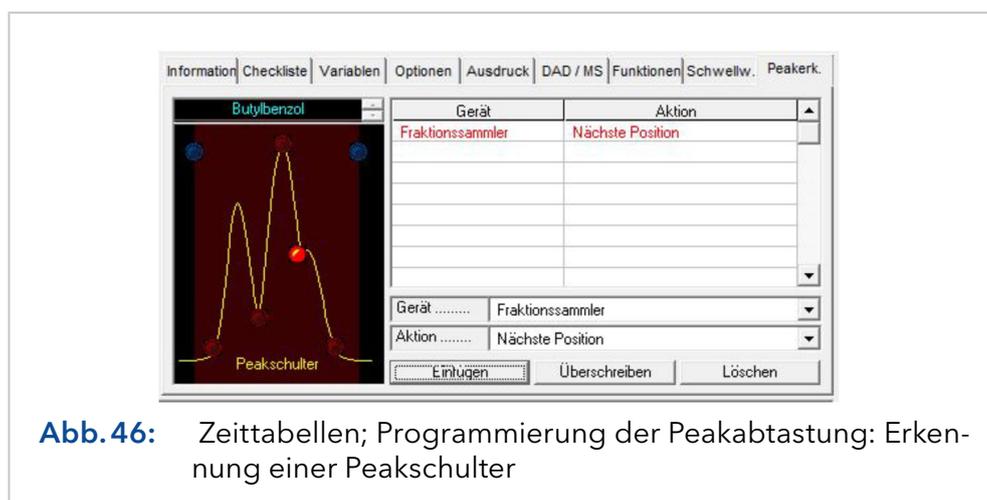


Abb.46: Zeittabellen; Programmierung der Peakabtastung: Erkennung einer Peakschulter

Zum Programmieren der Peakabtastfunktionen klicken Sie auf den roten Punkt an der gewünschten Stelle. Es erscheint dann auf der rechten Seite eine Funktionstabelle, die Sie mit Funktionen ausfüllen können. In den Auswahlfeldern *GERÄT* und *AKTION* können Sie die gewünschte Funktion auswählen und mit der Schaltfläche *EINFÜGEN* in die Zeittabelle übernehmen. Mit der Schaltfläche *ÜBERSCHREIBEN* können Sie eine markierte Zeile verändern, mit der Schaltfläche *LÖSCHEN* können Sie sie löschen.

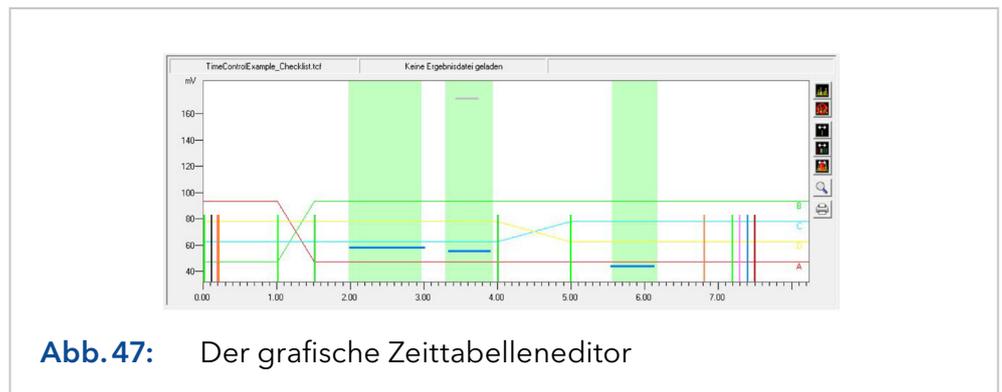
Die möglichen Situationen zur Peakerkennung sind:

- *PEAKFENSTER START* (blauer Punkt auf der linken Seite) ist der Zeitpunkt, an dem ein Peakfenster beginnt.
- *PEAKFENSTER ENDE* (blauer Punkt auf der rechten Seite) ist der Zeitpunkt, an dem ein Peakfenster endet.
- *PEAKSTART* ist der Beginn eines Peaks, wie er von der Peakabtastung erkannt wird.
- *PEAKTAL* ist ein Einbruch in einem Peak.
- *PEAKMAXIMUM* ist der höchste Punkt eines Peaks.
- *PEAKSCHULTER* ist die Schulter eines Peaks.
- *PEAKENDE* ist das Ende eines Peaks, wie es von der Peakabtastung erkannt wird.

Die folgenden Regeln gelten für die Empfindlichkeit der Peakabtastung:

- Je geringer die Datenpunktdichte (slice width), desto schneller und empfindlicher ist die Peakabtastung. Denken Sie jedoch daran, dass sehr kleine Datenpunktdichten zu großen Ergebnisdateien führen.
- Je kleiner der *FILTER FAKTOR*, desto schneller und empfindlicher ist die Peakabtastung. Beachten Sie, dass der Faktor im Bereich von 5 bis 15 liegt und der eingegebene Wert eine ungerade Zahl sein muss.
- Je kleiner der Wert für die *STEIGUNGSEMPFINDLICHKEIT*, desto empfindlicher ist die Peakabtastung.
- Ein Peakstart wird erkannt, wenn der gemessene Wert den eingestellten Wert für die *STEIGUNGSEMPFINDLICHKEIT* überschreitet. Die Erkennung des Peakanfangs ist unabhängig vom *MAXIMALEN PEGEL BASISLINIE*.
- Ein Peakende wird nur dann erkannt, wenn der gemessene Wert unter den eingestellten Wert für die *STEIGUNGSEMPFINDLICHKEIT* und den *MAXIMALEN PEGEL BASISLINIE* fällt.

6.9 Grafischer Editor für eine Zeittabelle



Der grafische Zeittabelleneditor dient dazu, eine grafische Darstellung einer Zeittabelle zu erstellen und eine visuelle Bearbeitung der Methode zu ermöglichen. Alle Funktionen der Zeittabelle werden als farbige Linien dargestellt, die mit der Maus horizontal (zeitliche Verschiebung) und vertikal (Änderung des Schwellwertes oder der Peakabtastung) verschoben werden können. Eine in der tabellarischen Darstellung der Zeittabelle angeklickte Funktion wird in der Tabelle rot hervorgehoben und blinkt

in der Grafik. Durch Anklicken einer Funktion in der Grafik wird die entsprechende Zeile in der Tabelle ebenfalls hervorgehoben. Peakfenster werden ebenfalls grafisch dargestellt, können mit der Maus erstellt und bearbeitet werden.

Eine programmierte Gradientenentwicklung wird ebenfalls durch farbige Linien dargestellt, wobei diese bei 0% als y-Achsen-Minimum und bei 100% als y-Achsen-Maximum dargestellt werden.

Sie können ein Chromatogramm als Hintergrundbild laden, das Sie dann zur Anpassung der Funktionen Ihrer Zeittabelle verwenden können. Die Darstellungsfarben aller Funktionen sind im Setup des grafischen Zeittabelleneditors wählbar. Funktionen, die nicht angezeigt werden sollen, können deaktiviert werden.



Abb. 48: Der grafische Zeittabelleneditor, Statusleiste

Die Statuszeile im grafischen Zeittabelleneditor zeigt den Namen der geladenen Zeittabelle, den Namen des geladenen Chromatogramms und ggf. ein Informationsfeld mit folgenden Angaben:

- Die Zeittabellenfunktion, über der sich der Mauszeiger befindet oder die Sie mit der Funktion *EINZELFUNKTION VERSCHIEBEN* verschieben.
- Die Zeit, um die Sie die Funktionen verschieben, wenn Sie die Funktion *MEHRERE FUNKTIONEN VERSCHIEBEN* verwenden.
- Der Name und die Zeiten des Peakfensters, über dem sich der Mauszeiger bei Verwendung der Funktion *PEAKFENSTER ERSTELLEN/BEARBEITEN* befindet.

Die Symbolleiste des grafischen Zeiteditors befindet sich auf der rechten Seite des Fensters. Seine Funktionen sind hier in der gleichen Reihenfolge aufgelistet, in der sie auf dem Bildschirm erscheinen:

Menü	Funktion
	<i>CHROMATOGRAMM LADEN</i> öffnet ein Chromatogramm, das als Hintergrundbild verwendet wird.
	<i>CHROMATOGRAMM ENTFERNEN</i> entfernt das geladene Chromatogramm aus der Grafik.
	MIT <i>EINZELFUNKTION VERSCHIEBEN</i> können einzelne Funktionen verschoben werden.
	<i>MEHRERE FUNKTIONEN VERSCHIEBEN</i> ermöglicht die Veränderung mehrerer Funktionen. Beginnen Sie dazu mit dem Zeichnen eines Zeitfensters bei gedrückter linker Maustaste. Alle Funktionen innerhalb von diesem Fenster können dann gleichzeitig mit der Maus (unter gedrückter linker Maustaste) verschoben werden. Sobald die Maustaste nicht mehr gedrückt wird, werden die Funktionen zeitlich verschoben.

Menü	Funktion
	<p><i>PEAKFENSTER ERSTELLEN/BEARBEITEN</i> ermöglicht das Erstellen und Bearbeiten von Peakfenstern. Um ein Peakfenster zu erstellen, halten Sie einfach die linke Maustaste gedrückt und ziehen Sie ein neues Fenster auf den Bildschirm. Wenn Sie die Maustaste loslassen, werden Sie nach dem Namen des neuen Fensters gefragt. Sie können ein bestehendes Peakfenster bearbeiten, indem Sie den Mauszeiger über das Fenster bewegen. Der Cursor verändert sich je nach seiner Position im Fenster von einem Pfeil, der nach links (auf der linken Seite des Fensters), einem Pfeil, der nach rechts (auf der rechten Seite des Fensters) oder einem Pfeil, der in beide Richtungen zeigt (in der Mitte des Fensters). Wenn Sie die linke Maustaste gedrückt halten, können Sie das Fenster nun nach links und rechts erweitern oder verschieben. Wenn Sie mit der rechten Maustaste über ein Peakfenster klicken, erscheinen Menüoptionen zum Umbenennen oder Löschen des Fensters.</p>
	<p><i>ZOOM</i> wird verwendet, um einen Teil eines Diagramms zu vergrößern. Ziehen Sie dazu mit gedrückter linker Maustaste ein Fenster über den Bereich, den Sie vergrößern möchten. Um zur ursprünglichen Größe des Diagramms zurückzukehren, klicken Sie mit der rechten Maustaste.</p>
	<p><i>DRUCKEN</i> druckt die gezeigte Grafik aus.</p>

7. Erstellen von Sequenztabelle

7.1 Allgemein

Sie können den Sequenztabelle-Editor über die Funktionstaste oder den Menüpunkt „Sequenztabelle erstellen / bearbeiten“ im Hauptfenster öffnen.

Eine Sequenztabelle verarbeitet eine Folge von Zeittabelle. Diese Zeittabelle können die Autosampler-Injektion über den Befehl „Autosampler Injekt“ verwenden oder nicht. Bei Zeittabelle mit Autosampler-Injektion können die Probenposition, die Anzahl der Injektionen und das Injektionsvolumen des Autosamplers in der Sequenztabelle programmiert werden.

Wenn Zeittabelle, die Variablen verwenden, in die Sequenztabelle eingefügt werden, werden der Sequenztabelle Spalten für jede Variable hinzugefügt. Für jede Zeile der Sequenztabelle können den Variablen der Zeittabelle unterschiedliche Werte zugewiesen werden.

Zeittabelle, die die Funktionen „Zeittabelle neu starten“ und „Neue Datei laden“ enthalten, können in der Sequenztabelle nicht verwendet werden. Wenn Sie verschiedene Zeittabelle miteinander verbinden wollen, können Sie dies nur über die Zeilen der Sequenztabelle tun.

7.2 Erstellen einer Sequenztabelle

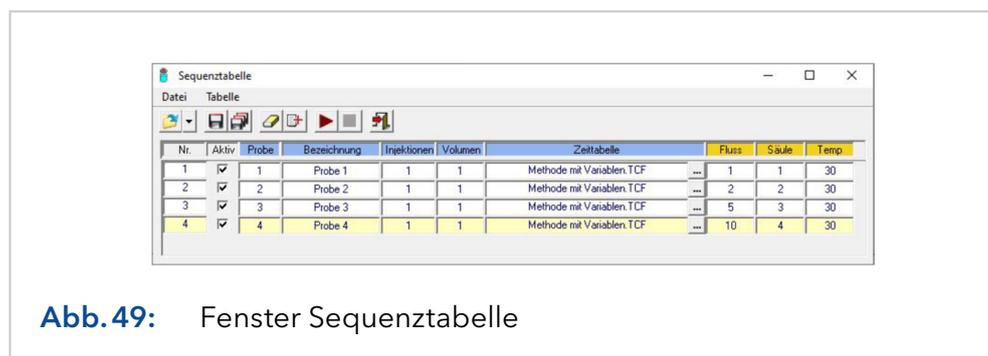


Abb.49: Fenster Sequenztabelle

Auf der linken Seite des Fensters befindet sich die Symbolleiste für den Sequenztabelle-Editor mit folgenden Funktionen:

Menü	Funktion
	<i>SEQUENZTABELLE LADEN</i> lädt eine verfügbare Sequenztabelle in den Editor.
	<i>SEQUENZTABELLE SPEICHERN</i> speichert die Sequenztabelle unter ihrem bestehenden Dateinamen als .seq-Datei.
	<i>SEQUENZTABELLE SPEICHERN UNTER ...</i> speichert die Sequenztabelle unter einem neuen Namen.
	<i>SEQUENZTABELLE LÖSCHEN</i> löscht alle Einträge in allen Zeilen der Sequenztabelle.

Menü	Funktion
	<i>ZEILE ZU SEQUENZTABELLE HINZUFÜGEN</i> fügt eine neue leere Zeile in die Sequenztable ein.
	<i>SEQUENZTABELLE STARTEN</i> beginnt die Ausführung der Sequenztable.
	<i>SEQUENZTABELLE STOPPEN</i> oder die Schaltfläche "Alles stoppen" im Hauptfenster beendet die Ausführung der Sequenztable.
	<i>BEENDEN</i> schließt den Sequenztabellen-Editor.

Nach Auswahl einer Zeittabelle (.tcf-Datei) in einer Sequenztabellenzeile werden die Spalten auf der rechten Seite automatisch angepasst, wobei für jede in einer Zeittabelle verwendete Variable eine Spalte angezeigt wird. Für jede Zeile können die in der ausgewählten Zeittabelle verwendeten Variablenwerte in die Sequenztabellenzeile eingegeben werden. Dies ermöglicht eine Modifikation der Zeittabelle innerhalb der Sequenztable.

Ein Klick mit der rechten Maustaste öffnet ein Menü mit Einträgen zum Kopieren, Einfügen und Löschen von Zeilen in die Sequenztable.

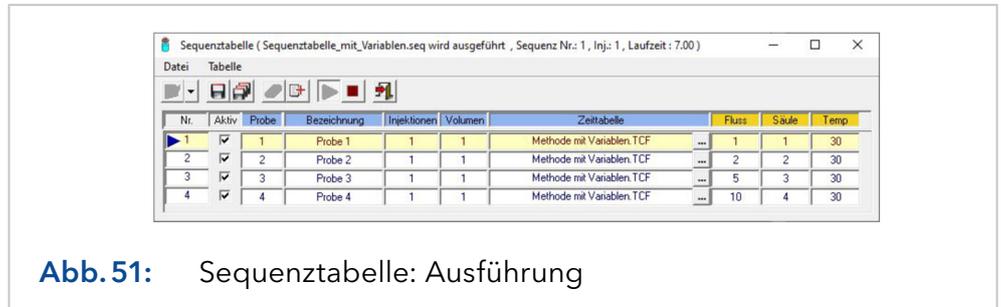


Abb.50: Sequenztable: Zeilen bearbeiten

Der Menüpunkt „Tabelle - Probengebertabelle importieren“ öffnet ein Dialogfenster zur Auswahl einer Autosampler-Kontrolldatei (.acf). Die Zeilen der Probengebertabelle werden in die Sequenztable importiert.

7.3 Ausführung einer Sequenztafel

Alle Zeilen der Sequenztafel, bei denen das Kontrollkästchen in der Spalte *AKTIV* ausgewählt ist, werden nacheinander ausgeführt. Während der Ausführung wird die aktuelle Zeile mit einem blauen Pfeil markiert und die Beschriftung des Sequenztafel-Editor-Fensters zeigt die aktuelle Sequenz, Injektion und Laufzeit an. Zukünftige Zeilen können während der Ausführung bearbeitet werden.



8. Erstellen von Probengebertabellen

8.1 Allgemein

Unter dem Menüpunkt *DATEI* im Hauptfenster von PurityChrom® finden Sie das *AUTOSAMPLER SETUP*:

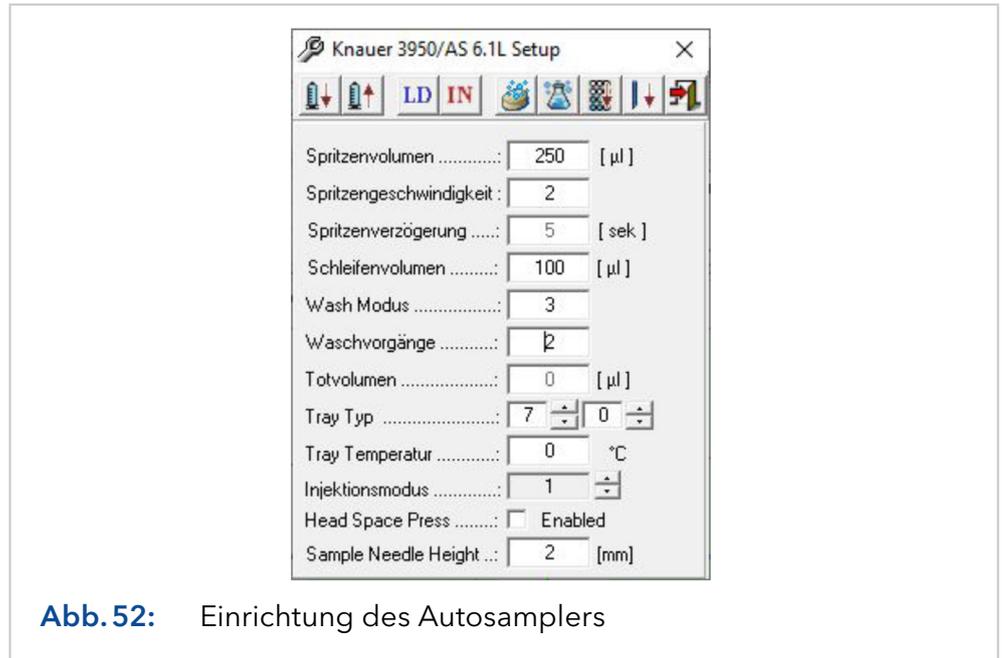


Abb. 52: Einrichtung des Autosamplers

Die Symbolleiste des Editors befindet sich im oberen Teil des Fensters mit folgenden Funktionen:

Menü	Funktion
	<i>SPRITZE AUFZIEHEN</i> bewegt den Spritzenstempel in die untere Position.
	<i>SPRITZE AUSDRÜCKEN</i> bewegt den Spritzenstempel in die obere Position.
	<i>INJEKTOR LADEN</i> schaltet das Injektionsventil in die Position <i>LOAD</i> .
	<i>INJEKTOR INJIZIEREN</i> schaltet das Injektionsventil in die Position <i>INJECT</i> .
	<i>NEEDLE WASH</i> initialisiert das Waschprogramm für die Spritze.
	<i>TRANSPORT WASH</i> initialisiert das Waschen der Transportflüssigkeit.
	<i>TABLETT VORFAHREN</i> bewegt das Probenfach.
	<i>NADEL AUSTAUSCHEN</i> fährt die Injektionsnadel in die Position zum manuellen Austausch der Nadel.

Menü	Funktion
	<i>BEENDEN</i> schließt Fenster

Die Parameter befinden sich unterhalb der Symbolleiste des Editors:

Parameter	Beschreibung
Spritzenvolumen	Das Volumen der Autosampler-Spritze
Spritzengeschwindigkeit	1: langsam 2: mittel 3: schnell
Spritzenverzögerung	Voreinstellung bei 5 Sekunden; nicht änderbar
Schleifenvolumen	Volumen der Probenschleife.
Wash Modus	0: Waschzyklus ist ausgeschaltet 2: zwischen Probenvials 3: zwischen Injektionen
Waschvorgänge	Anzahl an Waschzyklen (1-3 Mal).
Totvolumen	Nicht änderbar für KNAUER-Autosampler.
Tray-Typ	0: Wellplate 96 niedrig (low) 1: Wellplate 96 hoch (high) 2: Wellplate 384 niedrig (low) 3: 48 Vials 4: 12 Vials 5: 108 Vials* 6: 84 + 3 Vials* 7: 30 Vials (präparativ)* Hinweis: Bitte beachten Sie, dass die Vials 86 und 87 nicht in Rack 6 (84+3) verwendet werden können. Das Vial 85 wird für Transport Wash verwendet, wenn „TransportLiquid=1“ ausgewählt ist.
Tray Temperatur	0 °C: aus Probentellerkühlung für KNAUER 3950/AS 6.1L Mit Kühlungsoption: 4 - 40 °C

Parameter	Beschreibung
Injektionsmodus	0: Kein Modus 1: Partielle Schleifenfüllung (Partial Loop Fill) 2: Volle Schleife (Full Loop) 3: Mikroliter-Aufnahme (Microliter Pickup)
Head Space Press	Aktivieren Sie diese Option, um den Proben-transport zur Probenschleife zu unterstützen. Dadurch wird verhindert, dass ein Unterdruck, der beim Ansaugen der Probe im Fläschchen entstehen könnte, das Injektionsvolumen beeinflusst. Hinweis: Die Genauigkeit und Reproduzierbarkeit des Autosamplers kann abnehmen, wenn die Option <i>HEAD SPACE PRESS</i> abgeschaltet wird.
Sample Needle Height	Unter dieser Option legen Sie fest, wie tief die Injektionsnadel in einen Probenvial einsticht. Wählen Sie einen Abstand zwischen 2 und 6 mm.

Bei der Verwendung des Injektionsmodus 1 (Partial Loop Fill) oder 3 (Mikroliter-Pickup) beträgt das maximale Injektionsvolumen 50 % des Probenschleifenvolumens.

Die Kombinationen der verschiedenen Trays und die Nummerierung der einzelnen Vial-Positionen entnehmen Sie bitte dem Anhang (s. Kapitel 23 auf Seite 107).

Die Funktionsschaltfläche und der Menüpunkt *PROBENGEBERTABELLE ERSTELLEN / BEARBEITEN*  im Hauptfenster öffnet den Autosampler-Steuerdatei-Editor. Zur Verwendung eines Autosamplers wird die Vollversion von PurityChrom benötigt.

Eine Autosampler-Steuerdatei arbeitet nach dem Prinzip einer Reihe von Zeitsteuerdateien, denen jeweils eine automatische Probeninjektion zugeordnet ist. Der Befehl für die Probeninjektion wird mit dem Befehl *INJIZIEREN* in die entsprechende Zeittabelle programmiert.

Während der Injektion wird der zeitliche Verlauf angehalten (*TIME CONTROL HOLD*). Die Parameter für die Injektionen werden in die Probengebertabelle programmiert. Zu diesen Parametern gehören die Vialnummern, die Anzahl der Injektionen pro Vial, das Injektionsvolumen und die Säulenofentemperatur. Es können jedoch auch bestimmte Werte für die Zeittabelle voreingestellt werden. Dazu muss der Parameter *AS* in die Zeittabelle eingetragen werden. Dann wirkt der Parameter *AS* als Variable und bezieht seine Werte aus der aktuellen Zeile der Probengebertabelle.

Mögliche Befehle sind unter anderem:

- *ELUENTEN* (Fließmittelzusammensetzung für die Pumpe)
- *FLUSSRATE* (Flussrate für die Pumpen)
- *SCHWELLWERT* (Niveau eines programmierten Schwellwertes)
- *WELLENLÄNGE* (Wellenlänge des UV-Detektors)

- *FRAKTIONSLIMIT* (maximale Größe der erhaltenen Fraktionen)

Die in der Probengebertabelle programmierte Laufzeit bestimmt die Zeit, nach der die aktuelle oder eine neue Zeittabelle für die nächste Injektion gestartet wird. Der zeitliche Verlauf einer Autosampler-Steuerdatei bestimmt, welche Zeittabelle gestartet wird und wie lange sie läuft. Der Neustart einer Zeittabelle erfolgt nur so lange, wie weitere Injektionen stattfinden. Nach der letzten Injektion läuft daher die entsprechende Zeittabelle bis zum Stillstand des Systems weiter. Diese Funktion kann nützlich sein, wenn Sie in der Zeittabelle nach der programmierten Laufzeit der Probengebertabelle einen *STOP ALL* programmieren.

Solange weitere Injektionen anstehen, wird dieser Befehl nicht ausgeführt, da die Zeittabelle immer zuerst neu gestartet wird. Erst nach der letzten Injektion erreicht die Zeittabelle diese Programmzeile, und das System stoppt automatisch.

Autosampler-Injektionen können entweder als einzelne Injektionen oder als Sequenz programmiert werden. Die Probenbezeichnungen der einzelnen Vials können in eine Probentabelle eingegeben werden. Für jede Injektion wird die Probenbezeichnung, die der Probennummer entspricht, aus dieser Tabelle gelesen.

8.2 Erstellen einer Probengebertabelle

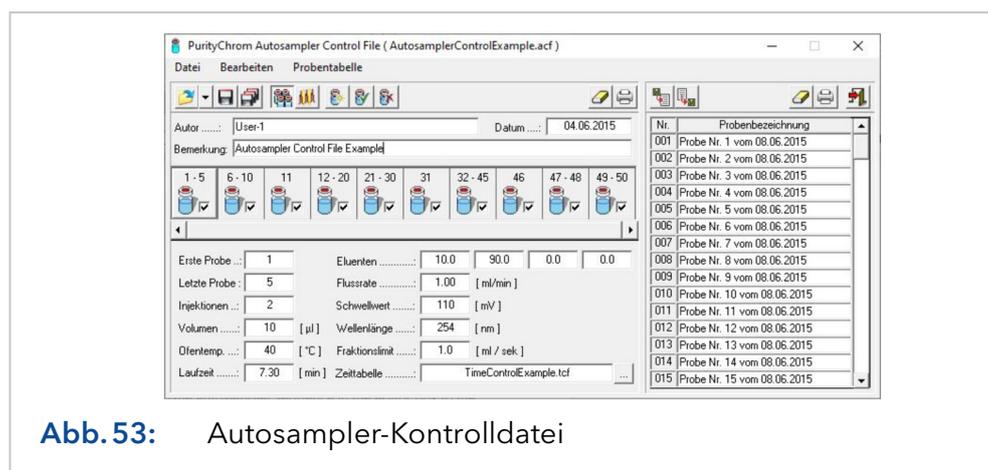


Abb. 53: Autosampler-Kontrolldatei

Die Symbolleiste des Editors befindet sich im oberen Teil des Fensters und besitzt folgende Funktionen:

Menü	Funktion
	<i>PROBENGEBERTABELLE LADEN</i> öffnet eine vorhandene Autosampler-Kontrolldatei in dem Editor. Die möglichen zu ladenden Dateitypen sind <i>AUTOSAMPLER-KONTROLLDATEI</i> (*:acf) oder <i>RESULT FILE</i> (*:rpf). <i>RESULT FILE</i> ermöglicht das Laden einer Autosampler-Steuerdatei aus einer Ergebnisdatei.
	<i>PROBENGEBERTABELLE SPEICHERN</i> speichert die Autosampler-Kontrolldatei unter ihrem bestehenden Namen.

Menü	Funktion
	<i>PROBENGEBERTABELLE SPEICHERN UNTER ...</i> speichert die Autosampler-Kontrolldatei unter einem neuen Namen.
	<i>INJEKTIONSPARAMETER</i> öffnet das Panel mit den Eingabefeldern zur Injektion.
	<i>STACKED INJECTION PARAMETER</i> öffnet das Panel mit den Parametern für gestapelte Injektionen „stacked injections“ (von KNAUER-Autosamplern noch nicht unterstützt).
	<i>STACKED INJECTION ENABLE / DISABLE</i> aktiviert bzw. deaktiviert gestapelte Injektionen in der Autosampler-Steuereinstellung (von KNAUER-Autosamplern noch nicht unterstützt).
	<i>PROBENSEQUENZ EINFÜGEN</i> fügt die Autosampler-Sequenz im Editor-Feld zur Probengebertabelle hinzu.
	<i>PROBENSEQUENZ ÜBERSCHREIBEN</i> überschreibt die markierte Autosamplersequenz mit der im Editor-Feld.
	<i>PROBENSEQUENZ LÖSCHEN</i> löscht die markierte Autosamplersequenz.
	<i>PROBENGEBERTABELLE LÖSCHEN</i> löscht den Inhalt der Autosampler-Kontrolldatei. Um ein versehentliches Löschen zu verhindern, wird diese Funktion erst nach Bestätigung ausgeführt.
	<i>PROBENGEBERTABELLE DRUCKEN</i> öffnet ein Drucker-Dialogfeld zum Ausdrucken der Autosampler-Steuereinstellung.
	<i>BEENDEN</i> schließt Fenster.

Der Name des Erstellers und ein Kommentar können auf der Probengebertabelle in den Feldern *AUTOR* und *BEMERKUNG* eingegeben werden. Das Datum wird beim Speichern der Datei automatisch generiert.

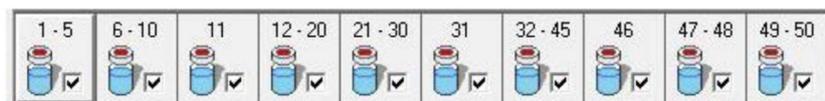


Abb. 54: Probengebertabelle: Sequenzleiste

Die Sequenzleiste zeigt alle Sequenzen des Autosamplers an. Wenn es mehr als 10 Sequenzen gibt, kann der Sequenzbalken mit der darunter liegenden Bildlaufleiste gescrollt werden. Jede Sequenz wird mit den programmierten Vialnummern angezeigt. Die Sequenzsymbole können angekreuzt werden, um sie für die Ausführung zu aktivieren oder zu deaktivieren.

tivieren. Im Falle einer Laufunterbrechung können mit dieser Funktion die bereits verarbeiteten Sequenzen deaktiviert werden.

Unterhalb der Sequenzleiste befindet sich das Editierfeld mit Eingabefeldern für eine Mustersequenz. Die einzugebenden Parameter sind die folgenden:

ERSTE PROBE ist die Nummer des ersten Vials in einer Probensequenz.

LETZTE PROBE ist die Nummer des letzten Vials in einer Probensequenz. Wenn nur aus einem Vial injiziert wird, geben Sie die gleiche Nummer in *ERSTE PROBE* und *LETZTE PROBE* ein.

INJEKTIONEN gibt die Anzahl der Injektionen pro Vial an.

VOLUMEN gibt das Injektionsvolumen in µl an.

OFENTEMP. gibt die Temperatur des Säulenofens an.

LAUFZEIT gibt die Laufzeit an, nach der die aktuelle oder eine neue Zeittabelle mit der nächsten Injektion beginnt. Die Laufzeit sollte immer kürzer sein als die noch auszuführende Funktion *ALLES STOPPEN* in der entsprechenden Zeittabelle. Bei Mehrfachinjektionen ist die Funktion *ENDE CHROMATOGRAMM* bei der Erstellung der Zeittabelle zu verwenden, um die Datenaufzeichnung neu zu starten. Zwischen der Funktion *ENDE CHROMATOGRAMM* in der Zeittabelle und der Laufzeit in der Probengebertabelle muss eine minimale Zeitdifferenz von 0,2 min programmiert werden. Weiterhin ist ein minimaler Zeitabstand von 0,2 min zwischen der *LAUFZEIT* des Autosamplers und der Funktion *ALLES STOPPEN* in der Zeittabelle zu programmieren.

ELUENTEN gibt eine Fließmittelzusammensetzung an, die in einer Zeittabelle mit der Eluentenzusammensetzung *AS* als Parameter programmiert wird.

FLUSSRATE gibt einen Fluss an, der in die Flussratenzeile der Zeittabelle mit dem Flussratenparameter *AS* eingegeben wurde.

SCHWELLWERT bezeichnet einen in die Registerkarte *SCHWELLWERT* der Zeittabelle als *AS* eingegebenen Schwellwertpegel.

WELLENLÄNGE gibt eine Wellenlänge an, die in den Zeilen zur Wellenlänge in der Zeittabelle mit dem Wellenlängenparameter *AS* eingegeben wurde.

FRAKTIONSLIMIT gibt das maximale Volumen an, das in den Zeilen der Zeittabelle unter *FRAKTIONSLIMITER* mit dem Parameter *AS* für das maximale Volumen eingegeben wird.

ZEITABELLE gibt die Zeittabellen-Datei an, die für jede Injektion in dieser Sequenz geladen wird.

8.3 Gestapelte Injektion (Stacked Injection)



Hinweis: Gestapelte Injektionen werden mit KNAUER 3950 / AS 6.1L nicht unterstützt.

Die Funktion *STACKED INJECTION* ermöglicht mehrere verschachtelte Injektionen von identischen Proben, um Lösungsmittel und Zeit zu sparen. Während der Elutionszeit einer Probe wird bereits die nachfolgende Probe auf die Säule injiziert. Wenn die Funktion *STACKED INJECTION* über die beiden Schaltflächen in der Symbolleiste  aktiviert ist, werden

alle Einträge der Probentabelle innerhalb eines Laufs ausgeführt. In der Auswahlliste unter dem Punkt *INJEKTION MIT...* kann gewählt werden, ob die Proben automatisch durch einen Autosampler oder durch ein Ventil injiziert werden. Bei der Injektion über ein Ventil saugt die Hauptpumpe die Probe an und schaltet das Injektionsventil in Position 2 bis die erforderliche Probenmenge in das System gepumpt ist.

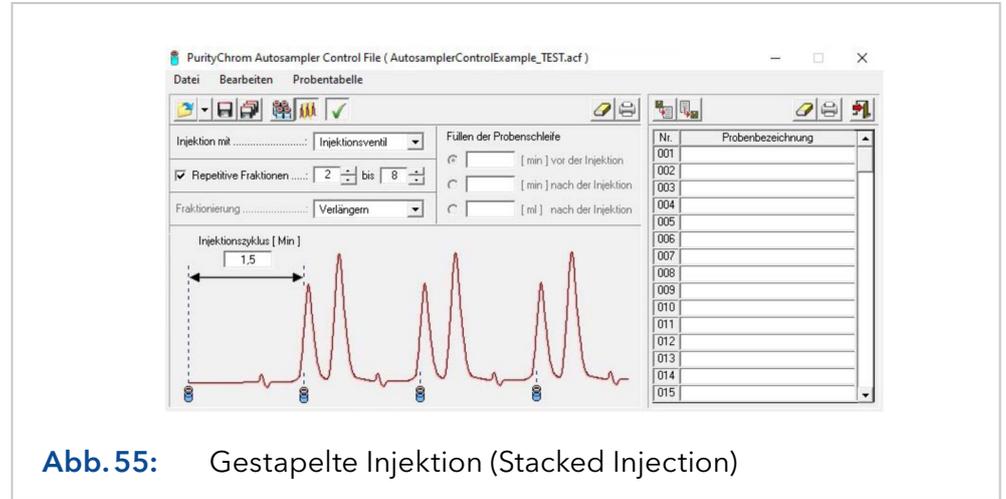


Abb. 55: Gestapelte Injektion (Stacked Injection)

Der Parameter *REPETITIVE FRAKTIONEN* definiert die spezifischen Fraktionen, die in einem Zyklus verwendet werden. Nachdem die Endfraktion erreicht ist, wird der Zyklus wiederholt. Der Parameter *FRAKTIONIERUNG* definiert, ob das in der Zeittabelle festgelegte Fraktionierungsereignis verlängert (z.B. im Falle eines Schwellwertes) oder kopiert (z.B. für ein Peakfenster) wird.

Im Falle von Injektionen mit einem Autosampler definiert der Parameter *FÜLLEN DER PROBENSCHLEIFE*, zu welchem Zeitpunkt die Probenschleife wieder aufgefüllt wird. Mögliche Optionen sind *ZEIT VOR DER INJEKTION*, *ZEIT NACH DER INJEKTION* und *VOLUMEN NACH DER INJEKTION*.

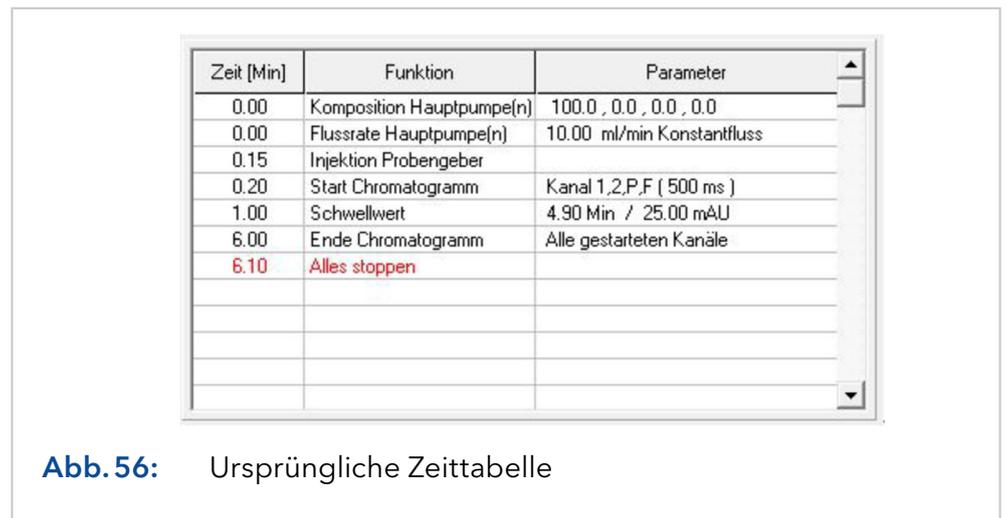


Abb. 56: Ursprüngliche Zeittabelle

Zeit [Min]	Funktion	Parameter
0.00	Komposition Hauptpumpe(n)	100.0 , 0.0 , 0.0 , 0.0
0.00	Flussrate Hauptpumpe(n)	10.00 ml/min Konstantfluss
0.15	Injektion Probengeber	
0.20	Start Chromatogramm	Kanal 1,2,P,F (500 ms)
1.00	Schwellwert	28.20 Min / 25.00 mAU
1.86	Injektion Probengeber	
3.57	Injektion Probengeber	
5.28	Injektion Probengeber	
6.99	Injektion Probengeber	
8.70	Injektion Probengeber	
10.41	Injektion Probengeber	
12.12	Injektion Probengeber	
13.83	Injektion Probengeber	
15.54	Injektion Probengeber	
21.39	Ende Chromatogramm	Alle gestarteten Kanäle
21.49	Alles stoppen	

Abb.57: Erweiterte Zeittabelle mit gestapelter Injektion (stacked injection)

Der Parameter *INJEKTIONSZYKLUS* definiert die Zeit zwischen zwei aufeinanderfolgenden Injektionen. Die Injektionszeiten werden durch Vials im Chromatogramm angezeigt. Die Zeittabelle für einen Lauf mit gestapelten Injektionen entspricht dem einer einzelnen Injektion, wird aber bei jeder weiteren Injektion automatisch verlängert.

8.4 Erstellen einer Probenbezeichnungstabelle



Nr.	Probenbezeichnung
001	Probe Nr. 1 vom 08.06.2015
002	Probe Nr. 2 vom 08.06.2015
003	Probe Nr. 3 vom 08.06.2015
004	Probe Nr. 4 vom 08.06.2015
005	Probe Nr. 5 vom 08.06.2015
006	Probe Nr. 6 vom 08.06.2015
007	Probe Nr. 7 vom 08.06.2015
008	Probe Nr. 8 vom 08.06.2015
009	Probe Nr. 9 vom 08.06.2015
010	Probe Nr. 10 vom 08.06.2015
011	Probe Nr. 11 vom 08.06.2015
012	Probe Nr. 12 vom 08.06.2015
013	Probe Nr. 13 vom 08.06.2015
014	Probe Nr. 14 vom 08.06.2015
015	Probe Nr. 15 vom 08.06.2015

Abb.58: Tabelle zur Probenbezeichnung

Die Tabelle zur Probenbezeichnung befindet sich auf der rechten Seite des Editors. Die Probennummern werden in der ersten Spalte der Tabelle und die Probenbezeichnung in der zweiten Spalte angezeigt. Die Probenbezeichnungen können direkt in die Tabelle geschrieben werden.

Vor jeder Injektion wird die Probenbezeichnung, die der Probennummer entspricht, aus dieser Tabelle gelesen und als *PROBENNAME* verwendet. Die Anzahl der Zeilen in der Tabelle kann in der Datei PurityChrom.ini mit

dem Befehl *[MAXIMUMSAMPLES]* eingestellt werden. Standardmäßig sind 100 Probenbezeichnungen möglich.

Oberhalb der Tabelle befindet sich die Symbolleiste mit folgenden Schaltflächen:

Menü	Funktion
	<i>PROBENTABELLE IMPORTIEREN</i> lädt eine Probenbezeichnungstabelle aus einer Textdatei.
	<i>PROBENTABELLE EXPORTIEREN</i> erstellt aus der Probenbezeichnungstabelle eine Textdatei.
	<i>PROBENTABELLE LÖSCHEN</i> löscht den Inhalt der Probenbezeichnungstabelle. Um ein versehentliches Löschen zu vermeiden, wird diese Funktion nur nach Bestätigung durch den Benutzer ausgeführt.
	<i>PROBENTABELLE DRUCKEN</i> öffnet ein Drucker-Dialogfeld zum Ausdrucken der Probenbezeichnungstabelle.

9. Visualisierung der Ablauftabelle



Abb. 59: Visualisierung der Ablauftabelle

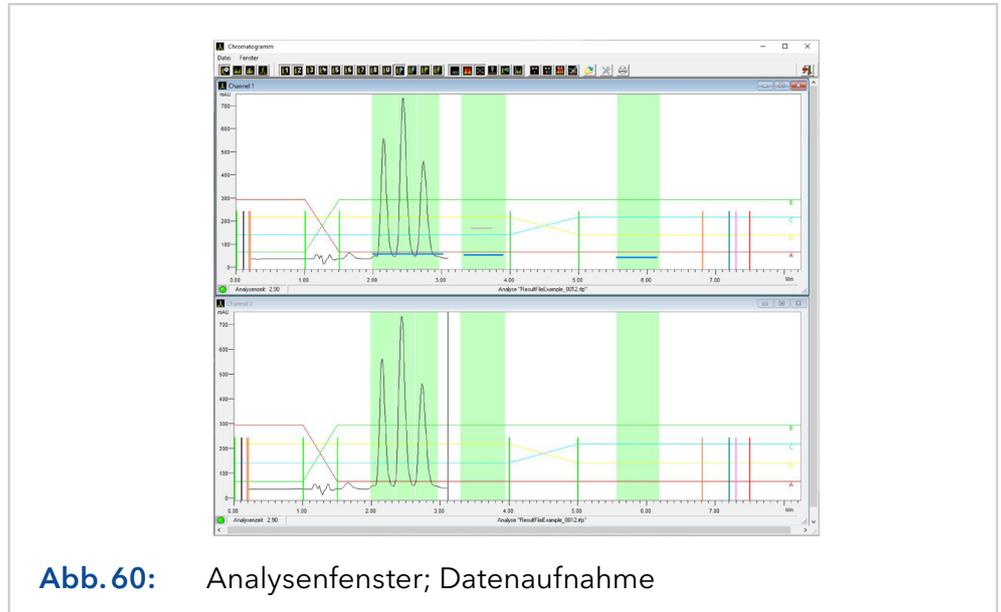
Der Funktionsknopf und der Menüpunkt **ABLAUFTABELLE**  im Hauptfenster öffnen ein neues Fenster, in dem Sie die Zeit- und Probengebortabellen visualisieren können. Wenn Sie eine Zeittabelle ausführen, wird diese in Form einer Tabelle angezeigt. Alle Zeilen, die bereits abgearbeitet sind, werden in rot dargestellt, die noch anstehenden in blau. Die blaue Zeile über der Tabelle zeigt den Namen der geladenen Zeittabelle an.

Wenn Sie eine Probengebortabelle ausführen, zeigt eine weitere Tabelle alle Injektionen in den programmierten Sequenzen an. Auch hier sind die bereits erfolgten Injektionen rot und die noch ausstehenden blau dargestellt. Die Spalten der Tabelle zeigen Ihnen die Nummer jedes Vials, die Injektionsnummer, das injizierte Probenvolumen, die Laufzeit der Zeittabelle und die Probenbezeichnung. Das gelbe Feld über dieser Tabelle zeigt den Namen der Autosampler-Kontrolldatei an. Die Tabellen blättern automatisch so nach unten, dass immer die aktuelle Zeile sichtbar ist.

10. Datenaufzeichnung (Analyse)

10.1 Allgemein

Der Funktionsknopf und der Menüpunkt *CHROMATOGRAMM*  im Hauptfenster öffnen das Chromatogrammfenster. Der erste Bereich ist die Datenaufnahme (Analyse).



Das Datenaufzeichnungsfenster wird zur Anzeige und Aufzeichnung von Analogsignalen verwendet. Voraussetzung dafür ist eine Analog/Digital-Wandlerkarte in Ihrem PC. Es können bis zu 8 Analogsignale gleichzeitig aufgezeichnet werden. Die automatische Spitzenwertabtastung kann nur mit diesen Analogsignalen arbeiten.

Die Datenaufnahme wird in der Zeittabelle mit dem Befehl *START CHROMATOGRAMM* gestartet und mit *ENDE CHROMATOGRAMM* gestoppt. Chromatogramme können gleichzeitig oder verzögert gestartet werden.

Während eine Zeittabelle läuft, werden in den Datenaufnahmefenstern die grafische Darstellung der Zeittabelle, die aktuelle Chromatogrammspur, die programmierten Peakfenster, der Gradient und die aktuellen Chromatogrammbeschriftungen angezeigt. Wie im grafischen Zeittabelleneditor haben Sie auch in den Datenaufnahmefenstern die Möglichkeit, Zeittabellenfunktionen und Peakfenster zu editieren. Diese Änderungen wirken sich auf den aktuellen Lauf aus und können auch in der geladenen Zeittabelle gespeichert werden. Damit haben Sie die Möglichkeit, *ONLINE* in einen Prozess einzugreifen.

Die Schaltflächen *100% LÖSEMITTEL A-D* und *FLUSSRATE* im Hauptfenster können während eines Laufs aktiviert werden, indem die Datei PurityChrom.ini [Pumps → Parameter Change=1] (s. Kapitel 23 auf Seite 107) geändert wird. Auf diese Weise können Sie die Flussrate und die Gradientenzusammensetzung während des Laufs ändern. Alle Änderungen mit Ausnahme von geänderten Fraktionssammler- oder Multipositionsventilstellungen, die während eines Laufs vorgenommen wurden, werden aufgezeichnet und können im *ABLAUFPROTOKOLL* durch Öffnen

des Chromatogramms im Rekonstruktionsfenster eingesehen werden (s. Kapitel 11.2 auf Seite 71).

10.2 Funktionstasten

Menü	Funktion
	<i>KANAL...</i> wird verwendet, um ein Datenkanalfenster zu öffnen oder zu schließen. Es werden nur die Schaltflächen für die Kanäle angezeigt, die ausgewählt werden können. Die Schaltfläche <i>U</i> gehört zu einem benutzerdefinierten Kanal (s. Kapitel 4.6 auf Seite 18). Datenkanäle, die in eine Zeittabelle programmiert sind, werden beim Laden automatisch geöffnet. Wenn keine Datenaufzeichnung aktiv ist, läuft die gewählte Datenspur im Grundlinienmodus, d.h. vom linken zum rechten Rand in ca. 8 Minuten als Endlosschleife. Die Datenaufnahme wird mit dem Zeittabellenbefehl <i>START CHROMATOGRAMM</i> gestartet und mit dem Befehl <i>ENDE CHROMATOGRAMM</i> beendet.
	<i>DRUCKKANAL</i> zeigt die Druckdaten der Pumpe an. Dieser Kanal kann wie die oben beschriebenen Datenkanäle verwendet werden.
	<i>FLUSSRATENKANAL</i> zeigt den aktuellen Wert der Flussrate, die vom Hauptpumpensystem ausgeführt wird. Er kann wie die oben beschriebenen Datenkanäle verwendet werden. Er ist besonders nützlich, wenn die Option <i>DRUCKLIMIT</i> in einer Zeitsteuerungsdatei programmiert wird. Dann zeigt er an, wann und in welcher Intensität die automatische Flussratenregelung aktiv war.
	<i>SPEKTRUM KANAL</i> wird verwendet, um das Spektrumfenster des DAD ein- oder auszublenden.
	<i>FUNKTIONEN ANZEIGEN</i> dient zum Ein- und Ausblenden der Zeittabellenfunktionen. Beim Ausblenden der Funktionen wird der Inhalt des Fensters auf den Bereich der Datenaufzeichnung skaliert.
	<i>PEAKFENSTER ANZEIGEN</i> wird verwendet, um die Zeitfenster der Peakerkennung ein- oder auszublenden.
	<i>GRADIENTENVERLAUF ANZEIGEN</i> wird verwendet, um die programmierten Eluentenzusammensetzung ein- oder auszublenden.
	<i>BESCHRIFTUNGEN ANZEIGEN</i> wird verwendet, um die aktuellen Anmerkungen ein- oder auszublenden.
	<i>VORHERIGE ERGEBNISDATEI</i> lädt automatisch das letzte Chromatogramm als Hintergrundbild in das Datenkanalfenster.

Menü	Funktion
	<i>ABGELAUFENE ZEITLINIE ANZEIGEN</i> wird verwendet, um die vertikale Linie, die die verstrichene Zeit anzeigt, ein- oder auszublenden.
	<i>MIT DER EINZELFUNKTION VERSCHIEBEN</i> können Sie einzelne Funktionen verschieben (s. Kapitel 6.9 auf Seite 48). Änderungen werden sofort im aktuellen Lauf wirksam, und nach dem Abwählen dieser Funktionen werden Sie gefragt, ob sie auch in der Zeittabelle gespeichert werden sollen.
	Mit <i>FUNKTIONSBLOCK VERSCHIEBEN</i> können Sie mehrere Funktionen verschieben (s. Kapitel 6.9 auf Seite 48). Änderungen werden sofort im aktuellen Lauf wirksam, und nach dem Abwählen dieser Funktionen werden Sie gefragt, ob sie auch in der Zeittabelle gespeichert werden sollen.
	<i>MIT PEAKFENSTER ERSTELLEN/BEARBEITEN</i> können Sie Peakfenster erstellen und bearbeiten (s. Kapitel 6.9 auf Seite 48). Änderungen werden sofort im aktuellen Lauf wirksam. Nach dem Abwählen dieser Funktionen werden Sie gefragt, ob sie auch in der Zeittabelle gespeichert werden sollen.
	<i>GRADIENTENVERLAUF BEARBEITEN</i> öffnet ein Fenster, in dem Sie den laufenden Farbverlauf bearbeiten können. Änderungen werden sofort im aktuellen Lauf wirksam, und nach dem Schließen des Fensters werden Sie gefragt, ob sie auch in der Zeittabelle gespeichert werden sollen.
	<i>ERGEBNISDATEI LADEN</i> dient zum manuellen Laden eines Chromatogramms, als Hintergrundbild für das Datenkanalfenster.
	<i>KANALEINSTELLUNGEN</i> öffnet das Fenster mit den Einstellungen für die einzelnen Datenkanäle. Die verschiedenen Parameter werden im Kapitel „10.4 Datenkanal-Einstellungen“ beschrieben.
	<i>AUTOMATISCHER DRUCK</i> aktiviert oder deaktiviert den automatischen Druck des Berichts nach dem letzten Lauf.

10.3 Statusleiste

Der Status der Datenaufzeichnung wird mit einer Grafik im linken Feld der Statusleiste angezeigt.



Abb. 61: Datenaufzeichnung, Statusleiste

Die Bedeutung der Symbole ist wie folgt:

Status	Bedeutung
	GRUNDLINIE (Grundlinie wird angezeigt)
	BEREIT (Datenkanal ist in Benutzung, aber Datenaufnahme hat noch nicht begonnen)
	CHROMATOGRAMM LÄUFT (Datenaufnahme ist aktiv)
	CHROMATOGRAMM BEENDET (Datenaufnahme ist beendet)

Der mittlere Kasten zeigt die Laufzeit des Chromatogramms, der rechte Kasten zeigt den aktuellen Status mit dem Namen der Ergebnisdatei.

10.4 Datenkanal-Einstellungen

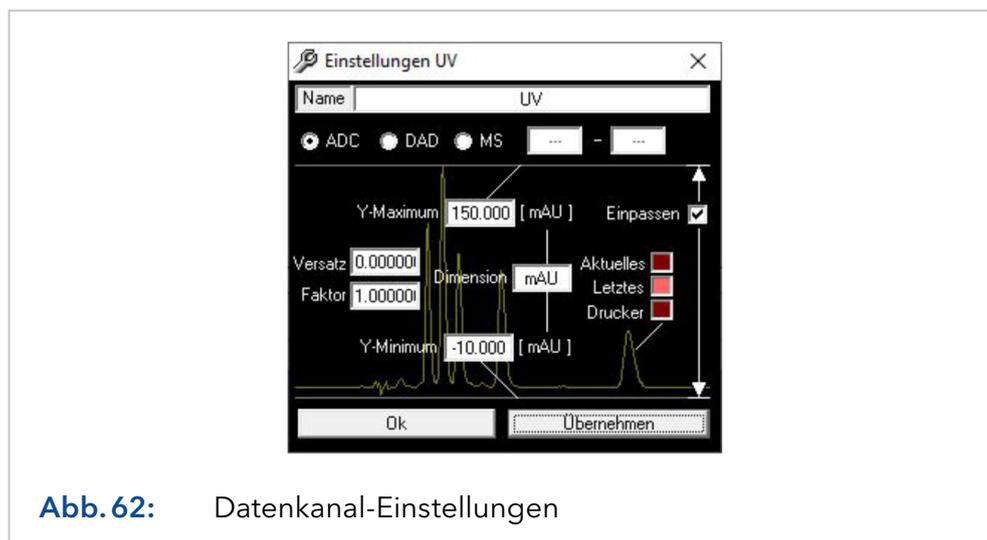


Abb. 62: Datenkanal-Einstellungen

Das Fenster zeigt immer die Daten des ausgewählten Kanals, d.h. das Analysenfenster im Fokus.

NAME: Sie können die Bezeichnung des Kanals im Fenster *NAME* ändern.

Mit den Optionen *A/D-WANDLER*, *DAD* oder *MS* können Sie die Datenquelle des Kanals bestimmen.

A/D-WANDLER: Für die Daten des A/D-Wandlers oder UV-Detektors.

DAD: Für die Daten des DAD

MS: Für die Daten des MS

VERSATZ: Dieser Parameter wird zur Kompensation eines Detektor-Offsets verwendet. Der eingegebene Wert wird zum Analogsignal addiert und kann positiv oder negativ sein.

FAKTOR: Der Parameter *FAKTOR* wird zur Korrektur der Größe des angezeigten Signals verwendet. Ein Faktor von 1 zeigt das Analogsignal in seiner ursprünglichen Größe an.

Y-MAXIMUM und *Y-MINIMUM*: Die Werte *Y-MAXIMUM* und *Y-MINIMUM* legen den Maßstab der Y-Achse fest.

EINPASSEN: Diese Option ermöglicht ein automatisches Skalieren, d.h. wenn Signale das eingegebene y-Maximum/Minimum über- oder unterschreiten wird die Skalierung angepasst.

DIMENSION: Hier können Sie die Maßeinheit für jeden Kanal einstellen.

AKTUELLES, *LETZTES* oder *DRUCKER*: Durch Anklicken dieser Felder öffnet sich ein Farbauswahldialog, mit dem Sie die Farbe jeder Chromatogrammspur einstellen können. *AKTUELLES* ist die Farbe des momentanen Chromatogramms und *LETZTES* ist die Farbe des vorherigen Chromatogramms, die angezeigt wird, wenn Sie die Funktion *LETZTES CHROMATOGRAMM ANZEIGEN* benutzen und *DRUCKER* ist die Farbe des ausgedruckten Chromatogramms.

Mit der Schaltfläche *ÜBERNEHMEN* werden die Einstellungen übernommen, und mit der Schaltfläche *OK* wird das Fenster gleichzeitig geschlossen.

Wählen Sie den Typ des angezeigten Spektrums im Setup-Fenster für das DAD-Spektrum unter *SPEKTRUM AUSWAHL*.

DUNKELSTROM ist der verbleibende Strom, der selbst bei Dunkelheit noch fließt.

LAMPENSPEKTRUM: Das Lampenspektrum ist das gemessene Spektrum des DAD abzüglich des Dunkelstroms.

ABSORPTIONSSPEKTRUM: Das Absorptionsspektrum des DAD ist der Logarithmus des Referenzspektrums abzüglich des Logarithmus des tatsächlich gemessenen Lampenspektrums.

REFERENZSPEKTRUM: Das Referenzspektrum ist ein gespeichertes Lampenspektrum. Ein Referenzspektrum kann manuell im Hauptfenster über die Funktionsschaltfläche *REFERENZSPEKTRUM SETZEN*  eingestellt werden. Andernfalls wird es beim Start von PurityChrom automatisch eingestellt.



AKTUALISIERUNG: Dieser Parameter definiert, nach welcher Zeit die Spektrumsanzeige aktualisiert wird.

Y-MAXIMUM und *Y-MINIMUM:* Diese Werte definieren die Skalierung der Y-Achse.

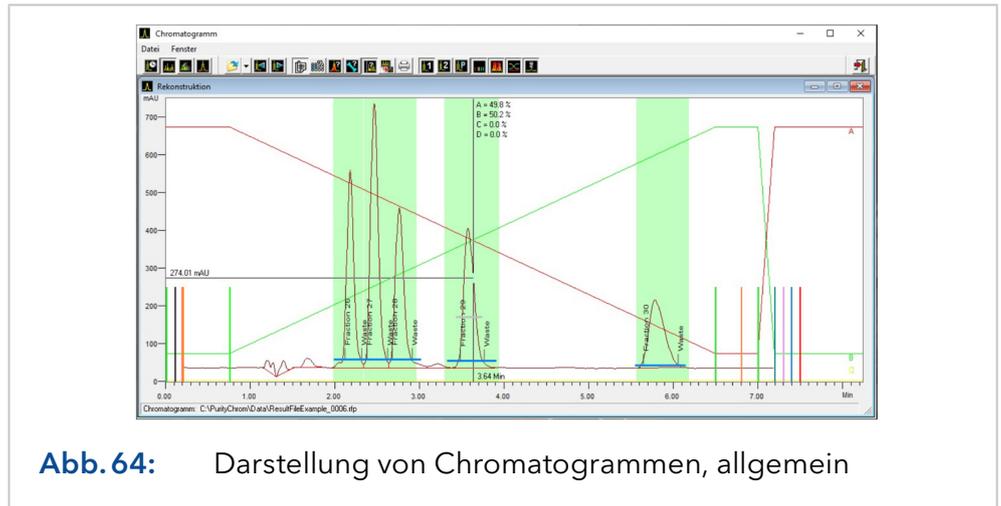
EINPASSEN: Diese Option passt die Skalierung automatisch entsprechend dem Signalmaximum und -minimum an.

FARBE: Unter diesem Parameter kann die Farbe zur Darstellung des DAD-Spektrums ausgewählt werden.

11. Darstellung von Chromatogrammen (Rekonstruktion)

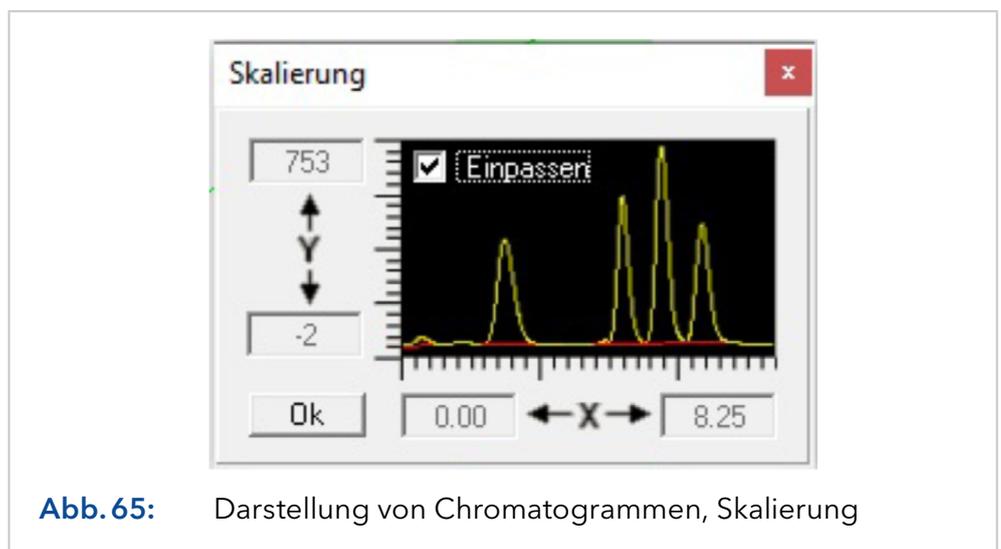
11.1 Allgemein

Der Funktionsknopf und der Menüpunkt **CHROMATOGRAMM**  im Hauptfenster öffnen das Chromatogrammfenster. Der zweite Bereich zeigt die Chromatogramme (Rekonstruktion).



Sie können Ergebnisdateien in das Rekonstruktionsfenster laden und anzeigen. Es können Chromatogramme, Zeittabellenfunktionen, Peakfenster, Gradienten, Chromatogrammbeschriftungen und das Protokoll des Laufes angezeigt werden. Die Chromatogramme können einzeln oder bei mehrkanaliger Datenaufnahme überlagert dargestellt werden.

Um die Darstellung bestimmter Bereiche zu vergrößern, können Sie mit gedrückter linker Maustaste ein Zoomfenster aufziehen. Wenn Sie die Maustaste loslassen, zoomt die Anzeige automatisch in diesen Bereich hinein. Diesen Vorgang können Sie bis zur maximalen Zoomstufe wiederholen. Um zur ursprünglichen Größe zurückzukehren, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Diagramm.



Ein Doppelklick auf y- oder x-Achse öffnet ein Fenster, in dem Sie die Skalierung durch Werte fixieren können. Danach wird die Skalierung übernommen. Die Option *EINPASSEN* skaliert das Chromatogramm automatisch in das Rekonstruktionsfenster ein.

Die Statusleiste am unteren Rand des Fensters zeigt den Pfad und den Namen der geladenen Ergebnisdatei an. Wenn Sie den Mauszeiger über eine Zeittabellenfunktion bewegen, werden die Zeit- und Parameterwerte dieser Funktion in der Statusleiste angezeigt.

11.2 Funktionstasten

Menü	Funktion
	<i>ERGEBNISDATEI LADEN</i> öffnet eine Ergebnisdatei (*.rfp). Temporäre Ergebnisdateien (*(H).tmp) können ebenfalls geöffnet werden. Die temporären Ergebnisdateien werden am Ende eines Methodenlaufs erstellt und normalerweise gelöscht, nachdem sie zur Ergebnisdatei zusammengefasst wurden. Bei einem unerwarteten Ende eines Laufs, wie z.B. Stromausfall oder Systemabsturz, sind die temporären Dateien noch vorhanden. Beim Öffnen einer temporären Ergebnisdatei wird automatisch eine normale Ergebnisdatei erstellt. Der maximale Datenverlust beträgt 100 Datenpunkte. Dies entspricht einem Verlust von 50 Sekunden chromatographischer Zeit bei einer slice width von 500 ms.
	<i>VORHERIGE ERGEBNISDATEI</i> lädt die Ergebnisdatei, die vor der geladenen Datei steht, in der Reihenfolge ihrer Namen.
	<i>NÄCHSTE ERGEBNISDATEI</i> lädt die Ergebnisdatei, die nach der geladenen Datei kommt, in der Reihenfolge ihrer Namen.
	<i>ABLAUFPROTOKOLL ANZEIGEN</i> öffnet ein Fenster, in dem die tatsächliche Zeittabelle angezeigt wird. Alle Änderungen, die während des Laufs manuell durchgeführt wurden, werden hier aufgelistet.
	<i>FRAKTIONSTABELLE ANZEIGEN</i> öffnet ein Fenster, in dem die Fraktionstabelle des geöffneten Chromatogramms gezeigt wird.
	<i>INTEGRATIONSERGEBNISSE ANZEIGEN</i> öffnet das Fenster mit den Integrationsergebnissen in Tabellenform.
	<i>SÄULENKOEFFIZIENTEN ANZEIGEN</i> öffnet das Fenster mit der Anzeige der Säulen Kennwerte in Tabellenform. Zur Berechnung der Kapazität geben Sie im Feld <i>SÄULENTOTZEIT</i> die Totzeit der Säule ein. Anstelle der Asymmetrie kann auch der Tailing-Faktor berechnet werden. Dazu ist die PurityChrom.ini-Datei [IntegrationPresets → TailingFactor=1] (s. Kapitel 23 auf Seite 107) zu modifizieren.

Menü	Funktion
	<p><i>PEAKHÖHE ANZEIGEN</i> wird zur Registrierung der Peakwerte und der Gradientenzusammensetzung verwendet. Nach Auswahl dieser Funktion erscheint ein Fadenkreuz in der Grafik, das Sie entlang der Chromatogrammspur verschieben können. Die Zeit, Intensität und Gradientenzusammensetzung werden auf den Fadenkreuzlinien angezeigt. In einer Ergebnisdatei mit mehreren Kanälen kann nur ein Chromatogramm zur Registrierung der Peakwerte ausgewählt werden. Zu jedem Zeitpunkt im Chromatogramm kann das entsprechende Spektrum angezeigt werden, wenn das Chromatogramm von einem DAD-Detektor aufgenommen wurde und eine DAD-Ergebnisdatei (2D-Daten) existiert. Klicken Sie mit der rechten Maustaste in das Chromatogramm und wählen Sie <i>SHOW DAD SPECTRUM</i>. Es erscheint ein neues Fenster mit dem zur gewählten Zeit gehörenden Spektrum. Dieser Vorgang kann durch erneutes Klicken mit der rechten Maustaste oder durch Bewegen der Maus bei gedrückter rechter Maustaste wiederholt werden.</p>
	<p><i>CHROMATOGRAMM EXPORTIEREN</i> dient zum Exportieren eines oder mehrerer Chromatogramme. Die Exportformate können im Dateiauswahlfenster als Dateitypen ausgewählt werden. Mögliche Exportformate sind <i>COMMA SEPARATED VALUE FILE (.csv)</i> für den Export nach Excel, <i>AIA/ANDI FILE (.cdf)</i> für den Export im Andi-Dateiformat oder <i>SLIC EFILE (.sli)</i> für den Export nach ChromStar.</p>
	<p><i>ERGEBNISDATEI DRUCKEN</i> wird verwendet, um die geladene Ergebnisdatei zu drucken. Nach Auswahl dieser Funktion öffnet sich ein Fenster, in dem Sie Elemente der Ergebnisdaten aktivieren oder deaktivieren können, die auf dem Ausdruck erscheinen sollen (s. Kapitel 6.2.5 auf Seite 34).</p>

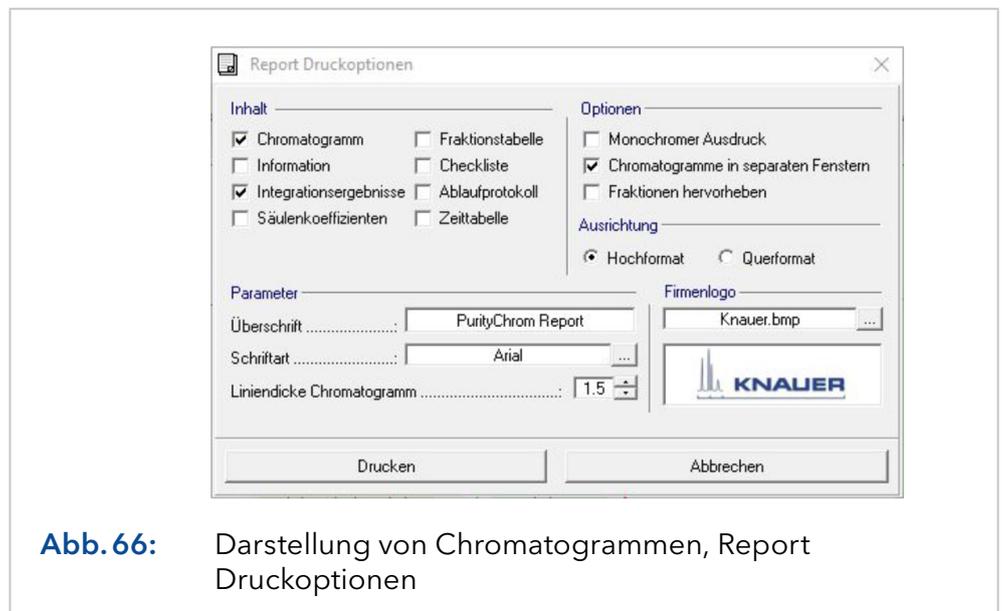


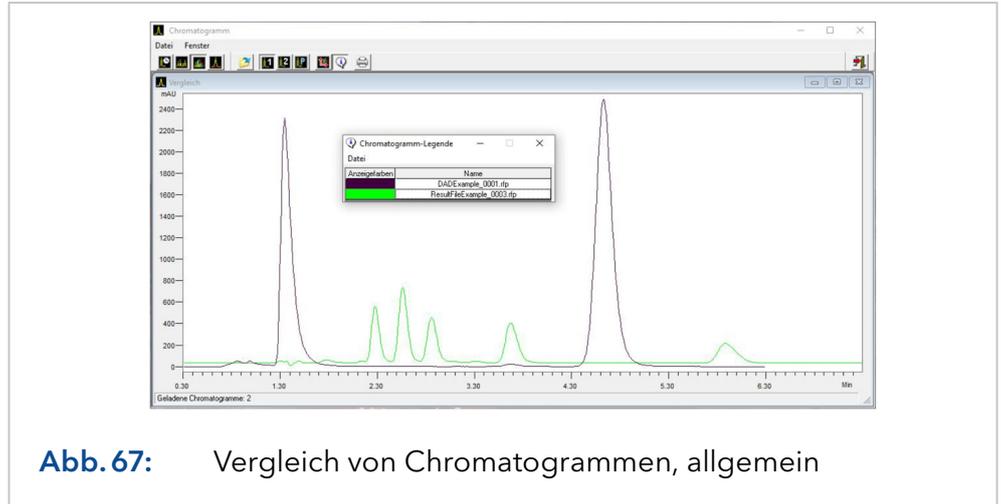
Abb. 66: Darstellung von Chromatogrammen, Report Druckoptionen

Menü	Funktion
	<i>KANAL ...</i> blendet jedes Chromatogramm ein oder aus. Ausgeblendete Chromatogramme werden auf dem Bildschirm nicht angezeigt, und sie erscheinen auch nicht auf dem Ausdruck.
	<i>FUNKTIONEN ANZEIGEN</i> blendet die Funktionen der Zeittabelle ein oder aus. Beim Ausblenden der Funktionen wird der Fensterinhalt so skaliert, dass er in den Bereich der Datenaufzeichnung passt.
	<i>PEAKFENSTER ANZEIGEN</i> blendet die Peakfenster ein oder aus.
	<i>GRADIENTENVERLAUF ANZEIGEN</i> blendet die Eluentenkomposition ein oder aus.
	<i>BESCHRIFTUNGEN ANZEIGEN</i> blendet die Anmerkungen ein oder aus.

12. Vergleich von Chromatogrammen

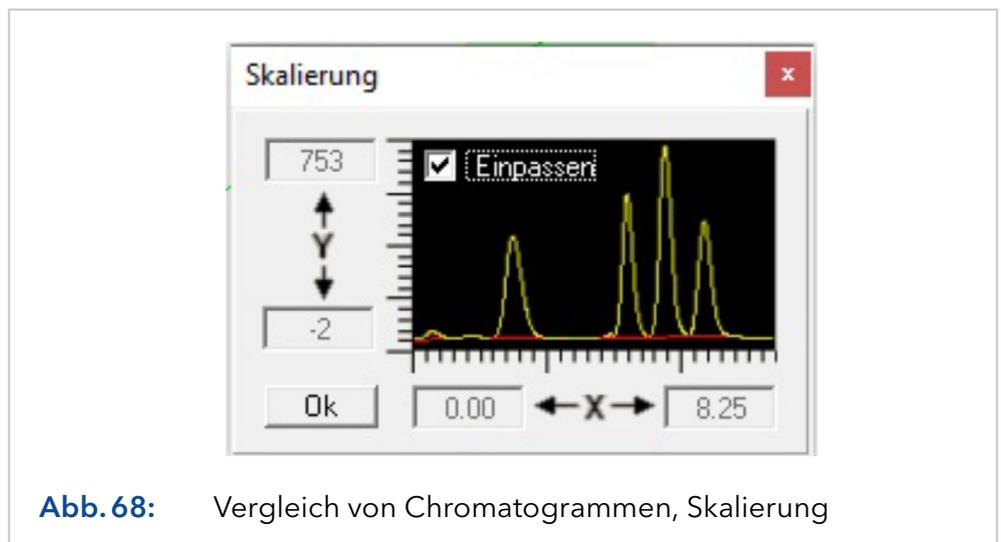
12.1 Allgemein

Das Chromatogrammfenster wird im Hauptfenster über die Funktions-taste oder den Menüpunkt *CHROMATOGRAMM*  geöffnet. Der dritte Funktionsknopf öffnet das Fenster Chromatogramme vergleichen (*VERGLEICH*).



Es können mehrere Ergebnisdateien (.rfp) geladen werden. Es wird aber jeweils nur das Chromatogramm angezeigt.

Ein Zoomfenster kann durch Drücken der linken Maustaste und Ziehen der Maus geöffnet werden. Bei gedrückter Maustaste wird das gezoomte Fenster angezeigt. Dieser Vorgang kann so oft wiederholt werden, bis eine maximale Vergrößerung erreicht ist. Durch Drücken der rechten Maustaste wird die ursprüngliche Größe wiederhergestellt.



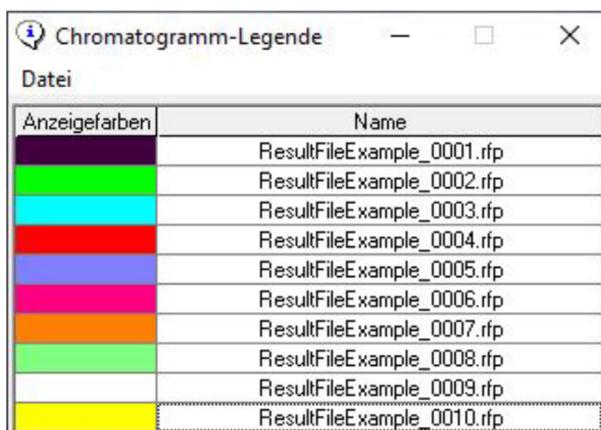
Ein Doppelklick auf die y- oder x-Achse öffnet ein Fenster, in dem Sie die Skalierung durch Werte fixieren können. Danach wird die Skalierung übernommen. Die Option *EINPASSEN* skaliert die geöffneten Chromatogramme automatisch in das Vergleichsfenster ein.

Die Statusleiste unten zeigt die Anzahl der geladenen Ergebnisdateien an.

12.2 Funktionstasten

Menü	Funktion
	<i>ERGEBNISDATEI LADEN</i> öffnet eine oder mehrere Dateien. Die Auswahl mehrerer Ergebnisdateien kann entweder mit der <i>STRG-TASTE</i> oder der <i>SHIFT-TASTE</i> erfolgen.
	<i>KANAL ...</i> wählt den Datenkanal aus, dessen Chromatogramme im Fenster <i>VERGLEICH</i> angezeigt werden sollen.
	<i>CHROMATOGRAMM VERSATZ</i> wird zum Versetzen der geladenen Chromatogramme verwendet. Mit Hilfe der Cursortasten werden die Chromatogramme auf der x- und y-Achse verschoben. In der Statusleiste wird der Versatz in Pixel angezeigt.
	<i>CHROMATOGRAMM LEGENDE</i> öffnet ein Fenster, das die Liste der derzeit geladenen Ergebnisdateien und die entsprechenden Farben anzeigt. Die Spalte <i>ANZEIGEFARBEN</i> gibt die Farbe und die Spalte <i>NAME</i> den Dateinamen wieder.
	<i>ERGEBNISDATEIEN DRUCKEN</i> druckt die grafische Darstellung der geladenen Ergebnisdateien und die Farbpferenzen aus.

Mit dem Menüpunkt *DATEI* und *ANZEIGEFARBEN* können die Farben in der Anzeige gewählt werden. Mit Hilfe von *DRUCKFARBEN* können die Farben im Ausdruck gewählt werden. Ein Doppelklick in eine der Farben öffnet ein Dialogfenster, in dem die Farbe geändert werden kann.



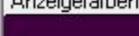
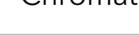
Anzeigefarben	Name
	ResultFileExample_0001.rfp
	ResultFileExample_0002.rfp
	ResultFileExample_0003.rfp
	ResultFileExample_0004.rfp
	ResultFileExample_0005.rfp
	ResultFileExample_0006.rfp
	ResultFileExample_0007.rfp
	ResultFileExample_0008.rfp
	ResultFileExample_0009.rfp
	ResultFileExample_0010.rfp

Abb. 69: Chromatogramme vergleichen, Legende

13. Reintegration von Chromatogrammen

13.1 Allgemein

Der Funktionsknopf und der Menüpunkt *CHROMATOGRAMM*  im Hauptfenster öffnen das Chromatogrammfenster. Der vierte Bereich zeigt die Reintegration von Chromatogrammen. Im Integrationsfenster können Sie die Chromatogramme aus Ergebnisdateien hinsichtlich ihrer Peakflächen auswerten.

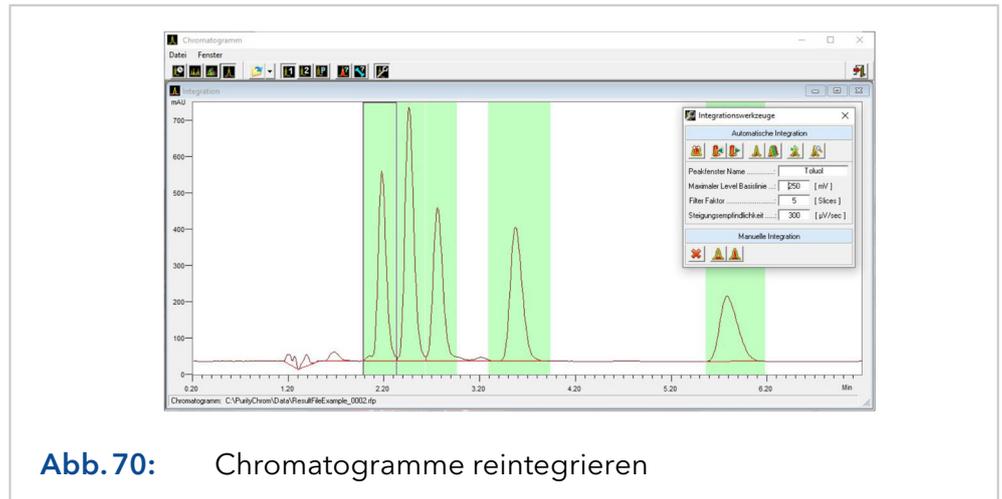


Abb. 70: Chromatogramme reintegrieren

Die Chromatogramme können einzeln oder bei mehrkanaliger Datenaufnahme gemeinsam reintegriert werden. Die einmal durchgeführte Reintegration wird automatisch gespeichert. Die ursprüngliche Integration bleibt in der Ergebnisdatei erhalten, sodass Sie immer die Möglichkeit haben, zum Original zurückzukehren.

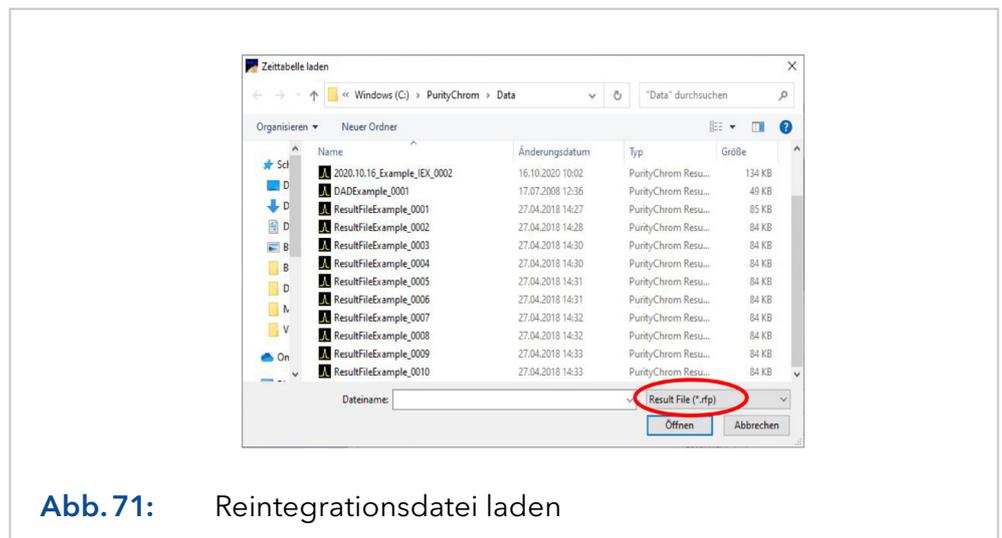


Abb. 71: Reintegrationsdatei laden

Mit der Reintegration können Sie später die Integration Ihrer Chromatogramme optimieren. Wenn Sie statt einer Zeittabelle eine reintegrierte Ergebnisdatei (.rfp-Datei) in den Zeittabelleneditor laden, erkennt das Programm die Reintegration und fragt Sie, ob Sie die Reintegrationsparameter laden wollen. Diese Zeittabelle ist identisch mit dem abgeschlossenen Lauf, enthält aber die Integrationsparameter der Reintegration. Sie können diese Zeittabelle dann unter einem neuen Namen speichern oder die alte Datei überschreiben.

Um die Darstellung bestimmter Bereiche zu vergrößern, können Sie mit gedrückter linker Maustaste ein Zoomfenster aufziehen. Wenn Sie die Maustaste loslassen, zoomt die Anzeige automatisch in diesen Bereich hinein. Diesen Vorgang können Sie bis zur maximalen Zoomstufe wiederholen. Um zur ursprünglichen Größe zurückzukehren, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Diagramm.

Die Statusleiste am unteren Rand des Fensters zeigt den Pfad und den Namen der geladenen Ergebnisdatei an.

13.2 Funktionstasten

Menü	Funktion
	<i>ERGEBNISDATEI LADEN</i> öffnet eine Ergebnisdatei.
	<i>KANAL ...</i> dient zur Auswahl des im Reintegrationsfenster dargestellten Chromatogramms.
	<i>INTEGRATIONSERGEBNISSE ANZEIGEN</i> öffnet das Fenster mit der Anzeige der Integrationsergebnisse in Tabellenform.
	<i>SÄULENKOEFFIZIENTEN ANZEIGEN</i> öffnet das Fenster mit der Anzeige der Säulenkennwerte in Tabellenform. Zur Berechnung der Kapazität geben Sie im Feld <i>SÄULENTOTZEIT</i> die Totzeit der Säule ein. Anstelle der Asymmetrie kann auch der Tailing-Faktor berechnet werden. Dazu ist die PurityChrom.ini-Datei [IntegrationPresets → TailingFactor=1] (s. Kapitel 23 auf Seite 107) zu modifizieren.
	<i>INTEGRATIONSWERKZEUGE</i> öffnet das Fenster mit den Funktionstasten und Parameterboxen für die Reintegration.

Das Fenster *INTEGRATIONSWERKZEUGE* enthält die für die Reintegration erforderlichen Parameter. Die Integrationsparameter werden zusammen mit den Peakfenstern gespeichert. Die Durchführung einer Reintegration betrifft immer den Teil des Chromatogramms innerhalb des gewählten Peakfensters.

Außerhalb der Peakfenster werden die Standardparameter angewendet, wie sie in der Datei PurityChrom.ini definiert sind (s. Kapitel 23 auf Seite 107).

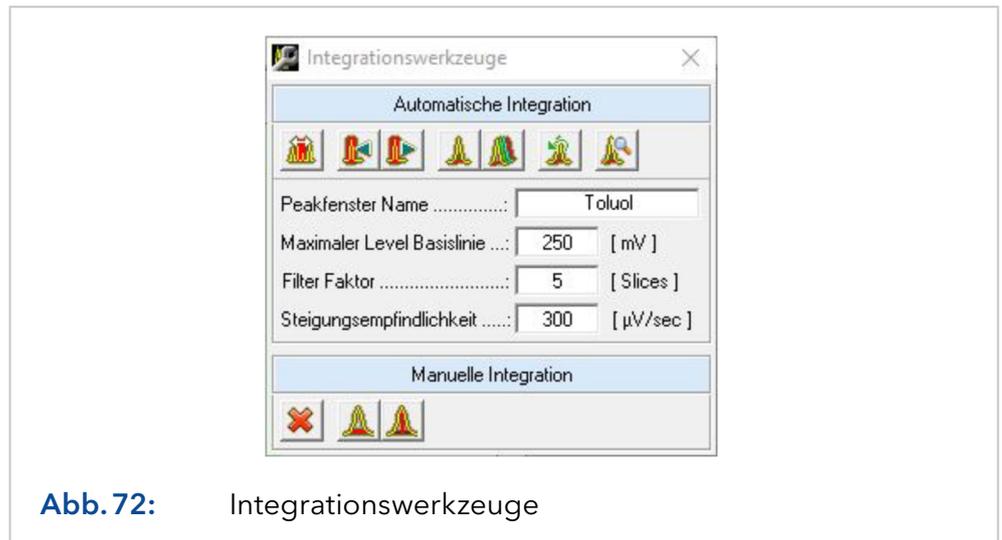


Abb. 72: Integrationswerkzeuge

Die Schaltflächen im Werkzeugfenster haben die folgenden Funktionen:

Menü	Funktion
	Mit <i>PEAKFENSTER ERSTELLEN/BEARBEITEN</i> können Sie Bereiche für Peaks erstellen und bearbeiten (s. Kapitel 6.9 auf Seite 48).
	<i>VORHERIGES PEAKFENSTER</i> und <i>NÄCHSTES PEAKFENSTER</i> werden zur Auswahl des Peakfensters verwendet. Das ausgewählte Peakfenster wird in der Grafik im Reintegrationsfenster eingerahmt. Der Name des Fensters wird im Feld unter der Symbolleiste angezeigt.
	<i>ANGEZEIGTEN KANAL INTEGRIEREN</i> reintegriert das ausgewählte Chromatogramm.
	<i>ALLE KANÄLE INTEGRIEREN</i> reintegriert alle Chromatogramme der geladenen Ergebnisdatei.
	<i>ORIGINALINTEGRATION WIEDERHERSTELLEN</i> kehrt zur ursprünglichen Integration zurück.
	<i>PEAKERKENNUNG-VORSCHAU</i> zeigt das Ergebnis der Online-Peakabtastung an. Die Peaks, die von der Online-Peakerkennung erkannt werden, entsprechen den ausgefüllten Bereichen unter dem Chromatogramm. Unterschiedliche Peaksituationen werden durch helle vertikale Linien angezeigt. Wenn die Maus über die erkannten Peaksituationen bewegt wird, wird der Bereich zwischen zwei aufeinanderfolgenden Peaksituationen hervorgehoben. Die entsprechende Start- und Endzeit sowie die jeweiligen Situationsnamen werden in der Statusleiste angezeigt.

Die Reintegrationsparameter haben folgende Bedeutung:

DER MAXIMALE LEVEL BASISLINIE fungiert als Schwellwert für die Peakerkennung. Über dem in mV eingegebenen Wert werden keine Peaks mehr erkannt.

FILTER FAKTOR: Dieser Parameter zeigt die Anzahl der slices an, die zur Bildung der ersten Ableitung der Gradientenberechnung verwendet wurden.

STEIGUNGSEMPFINDLICHKEIT: Dieser Parameter gibt die Größe des Signalanstiegs in $\mu\text{V}/\text{sec}$ an, bei dem ein Peak anfang erkannt wird.

Eine Änderung dieser Parameter wirkt sich auf die Integration der von Ihnen gewählten Peaks aus.

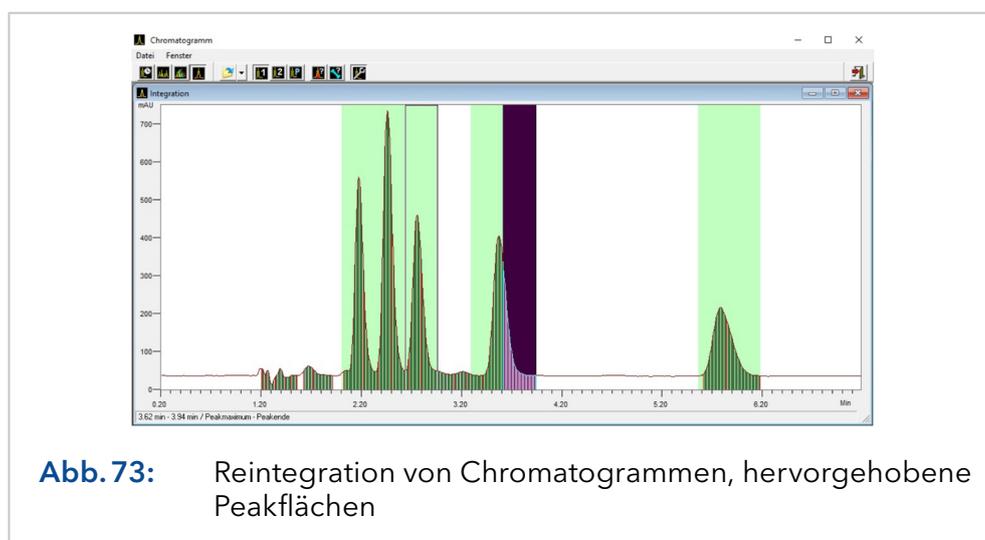


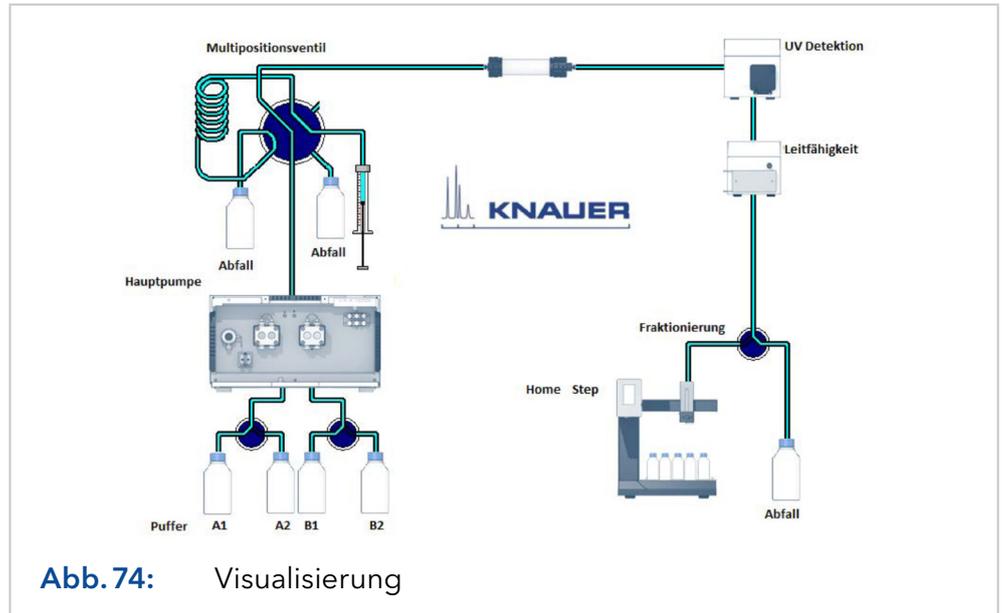
Abb. 73: Reintegration von Chromatogrammen, hervorgehobene Peakflächen

Menü	Funktion
	<i>INTEGRATIONSERGEBNISSE LÖSCHEN</i> löscht alle Integrationsergebnisse des angezeigten Kanals
	<i>MANUELLE BASISLINIE SETZEN</i> ermöglicht das manuelle Einfügen einer Baseline. Anfangs- und Endpunkt können mit der linken Maustaste festgelegt werden. Platzierte Punkte können weiterhin mit der linken Maustaste verschoben werden. Nach dem Loslassen der Taste wird die Grundlinie automatisch verwendet. Für jede Situation muss die Schaltfläche <i>MANUELLE BASISLINIE SETZEN</i> neu ausgewählt werden.
	<i>MANUELLES LOT SETZEN</i> ermöglicht das Einfügen eines Lots zur vertikalen Abtrennung von Peaks. Der Zeitpunkt des Lots kann mit der linken Maustaste festgelegt und auch wieder verschoben werden. Nach dem erneuten Klicken auf die Schaltfläche <i>MANUELLES LOT SETZEN</i> wird die Lot-Linie automatisch verwendet. Für jedes weitere Lot muss erneut die Schaltfläche gewählt werden.

14. System-Visualisierung

14.1 Allgemein

Die Funktionstaste oder der Menüpunkt *SYSTEMVISUALISIERUNG*  im Hauptfenster öffnet das Fenster zur Darstellung des Systems.



Die Anlagensvisualisierung dient zur grafischen Darstellung des Ablaufs sowie zur manuellen Bedienung aller Geräte, die über die Visualisierung gesteuert werden können. Darüber hinaus können in den Anzeigeboxen Daten über den aktuellen Druck, die Eluentenzusammensetzung, die Flussrate, die Detektorsignale, die Anzahl der Autosampler-Vials, die Position des Fraktionssammlers und die Temperatur angezeigt werden.

Eine Bibliothek von Grafikobjekten und die Verwendung von Hintergrundbildern im Windows Bitmap-Format (*.bmp) ermöglichen es dem Benutzer, eine individuell konfigurierte Systemvisualisierung zu erstellen.

Jedes Gerät, das visualisiert werden kann, zeigt immer seine aktuelle Position oder seinen aktuellen Zustand an.

Das Visualisierungsfenster kann über den Menüpunkt *ANSICHT* oder durch Ziehen an den Fenstergrenzen frei skaliert werden.

14.2 Funktionen zur Systemvisualisierung

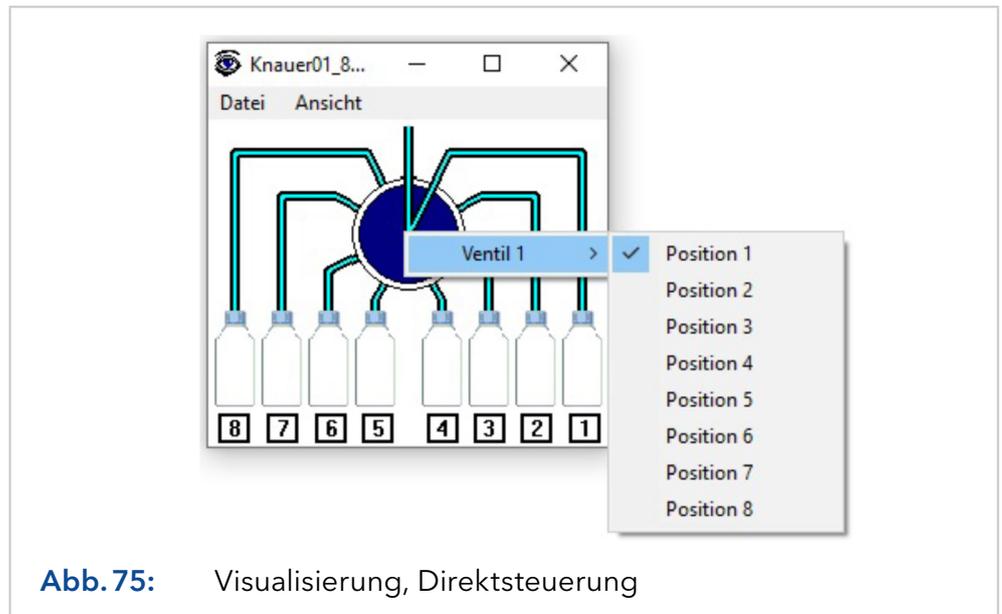


Abb. 75: Visualisierung, Direktsteuerung

Alle Geräte, die visualisiert werden können, können innerhalb der Visualisierung gesteuert werden. Um ein Menü anzuzeigen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das gewünschte Gerät. Im erscheinenden Popup-Menü wird als erster Menüpunkt der Gerätenname angezeigt, gefolgt von den Positionen bzw. Zuständen, in die das betreffende Gerät geschaltet werden kann. Durch Klicken mit der linken Maustaste auf die Menüoptionen wird das Gerät in die entsprechende Position oder den entsprechenden Zustand geschaltet. Das Button-Objekt kann durch Linksklick mit der Maus wie eine Funktionstaste verwendet werden. Durch Klicken mit der rechten Maustaste auf ein Kästchen (Value Label) wird die Datenquelle des Displays angezeigt.

14.3 Erstellen einer Systemvisualisierung

Die Menüoption *EINSTELLUNGEN* unter *DATEI* im Visualisierungsfenster öffnet das Setup-Fenster der Systemvisualisierung.

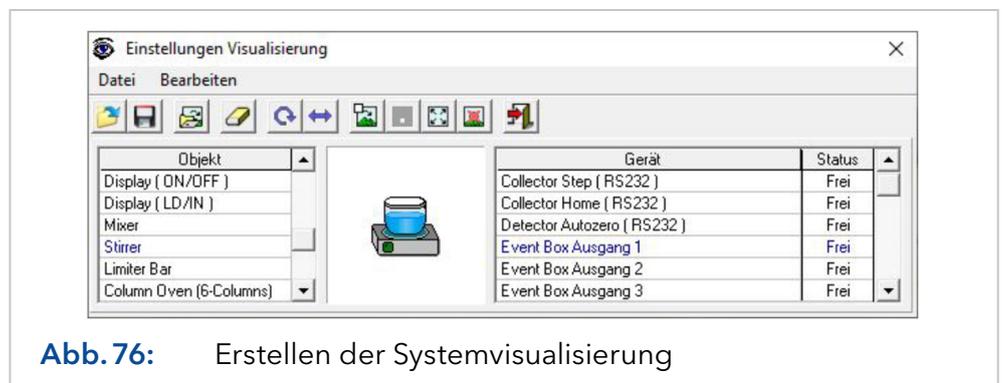


Abb. 76: Erstellen der Systemvisualisierung

Die Funktionsschaltflächen in der Symbolleiste haben folgende Funktionen:

Menü	Funktion
	<i>VISUALISIERUNG LADEN</i> öffnet eine zuvor erstellte Visualisierung. Alle Visualisierungen befinden sich im Ordner <i>VISUALISATION OBJECTS</i> . Dieser Ordner befindet sich im Verzeichnis C:\PurityChrom\Visualisation.
	<i>VISUALISIERUNG SPEICHERN</i> speichert eine neu erstellte Visualisierung.
	<i>HINTERGRUNDBILD LADEN</i> öffnet ein Hintergrundbild im Bitmap-Format. Alle Hintergrundbilder werden im Ordner <i>VISUALISATION BACKGROUNDS</i> gespeichert. Dieser Ordner befindet sich im Verzeichnis C:\PurityChrom\Visualisation.
	<i>VISUALISIERUNG LÖSCHEN</i> löscht die geladene Visualisierung und alle ihre Objekte. Um ein versehentliches Löschen zu vermeiden, wird diese Funktion erst nach Bestätigung durch den Benutzer ausgeführt.
	<i>OBJEKT 90° ROTIEREN</i> dreht das ausgewählte Objekt um 90° im Uhrzeigersinn.
	<i>OBJEKT SPIEGELN</i> spiegelt das ausgewählte Objekt horizontal.
	<i>OBJEKT EINFÜGEN</i> fügt das ausgewählte Objekt der gewählten Anordnung im Visualisierungsfenster hinzu. Alle Objekte werden in ihrer Grundstellung eingefügt (z.B. Ventile in Position 1).
	<i>OBJEKT PLATZIEREN</i> fixiert das eingefügte Objekt an der gewählten Position in der Visualisierung.
	<i>OBJEKT VERSCHIEBEN</i> ermöglicht das Versetzen eines bereits platzierten Objekts.
	<i>OBJEKT LÖSCHEN</i> löscht ein bereits platziertes Objekt.
	<i>BEENDEN</i> schließt das Visualisierungs-Setup-Fenster.

Um eine neue Visualisierung zu erstellen, zeichnen Sie zunächst ein Hintergrundbild, das den Geräten und dem Fluss in Ihrem System entspricht. Dazu können Sie das Windows-Programm *PAINT* verwenden. Sie finden eine Reihe von Modellen für die einzelnen Elemente im Verzeichnis C:\PurityChrom\Visualisation\Bitmap. Anschließend müssen Sie das Hintergrundbild im Verzeichnis C:\PurityChrom\Visualisation\Visualisation Backgrounds speichern und mit der Funktion *HINTERGRUNDBILD LADEN* als Hintergrundbild öffnen.

Nun müssen Sie für jedes der zu visualisierenden Geräte die entsprechenden grafischen Objekte positionieren. Die linke Tabelle im Ein-

richtungsfenster enthält alle grafischen Objekte und die rechte Tabelle enthält alle visualisierbaren Geräte Ihrer Anlage. Wenn Sie *VALUE LABEL* als Objekt wählen, werden in der rechten Tabelle nur die visualisierbaren Werte (wie z.B. Flussrate, Druck, UV, etc.) angezeigt.

Die grafischen Objekte werden in der Vorschau-Box in der Mitte des Einrichtungsfensters angezeigt. Prüfen Sie hier, ob das Objekt in der gleichen Richtung liegt wie das entsprechende Element in Ihrem Hintergrundbild. Verwenden Sie die Funktionen *OBJEKT 90° ROTIEREN* und *OBJEKT SPIEGELN*, um die Ausrichtung anzupassen. Nachdem Sie in der rechten Tabelle ein passendes Gerät für Ihre Anlage ausgewählt haben, können Sie das Objekt mit der Funktion *OBJEKT EINFÜGEN* in das Visualisierungsfenster übernehmen. Es erscheint dann in der linken oberen Ecke und kann mit der Maus oder den Cursor-Tasten an die richtige Stelle gesetzt werden. Wenn Sie dies getan haben, fixieren Sie es mit der Funktion *OBJEKT PLATZIEREN* in der Visualisierung.

Wenn alle Objekte hinzugefügt worden sind, müssen Sie die Visualisierung mit der Funktion *VISUALISIERUNG SPEICHERN* speichern. Alle Visualisierungen müssen im Dateipfad C:\PurityChrom\Visualisation\Visualisation Files gespeichert werden.

15. Anzeige des Lösungsmittelvorrats

15.1 Allgemein

Der Funktionsknopf oder der Menüpunkt **LÖSEMITTELVORRAT**  im Hauptfenster öffnet das Anzeigefenster für den Lösemittelvorrat.

Die Lösemittelvorratsanzeige dient zur Kontrolle des Füllstandes der Eluenten. Um ein Trockenlaufen einer Säule zu verhindern, haben Sie die Möglichkeit, zwei Volumengrenzen in Prozent einzustellen. Wenn das Volumen unter den ersten Grenzwert fällt, ertönt ein Alarm, und wenn es unter den zweiten Grenzwert fällt, stoppen die Pumpen.

Die angezeigten Werte basieren auf dem berechneten verbrauchten Lösungsmittelvolumen bei der aktuellen Flussrate und der verstrichenen Zeit. Das bedeutet, dass in dieser Berechnung keine Pumptoleranz vorgesehen ist. Aus diesem Grund sollten die Volumengrenzen für die Warnung und das Abschalten der Pumpen einen gewissen Spielraum zulassen. Eine regelmäßige Kontrolle der Vorratsbehälter trägt ebenfalls dazu bei, das Trockenlaufen einer Säule zu verhindern. Beim Auffüllen des Vorrats müssen die Werte für den aktuellen Lösungsmittelstand angepasst werden, um eine sinnvolle Berechnung des Verbrauchs zu gewährleisten.

15.2 Visualisierung von Lösungsmitteln

Die Zufuhr der Lösungsmittel A bis D und der Füllstand des Abfallbehälters sind als Grafik auf der linken Seite des Fensters dargestellt. Sie sollen dem Benutzer eine sofortige Kontrolle ermöglichen.

Auf der rechten Seite werden die Namen der Lösungsmittel angezeigt, daneben die aktuellen Werte als Volumen und Prozentangaben.

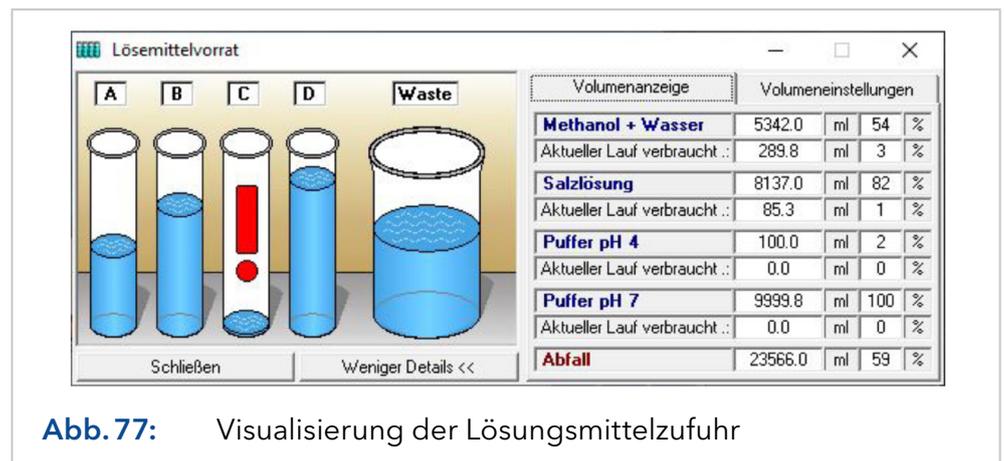
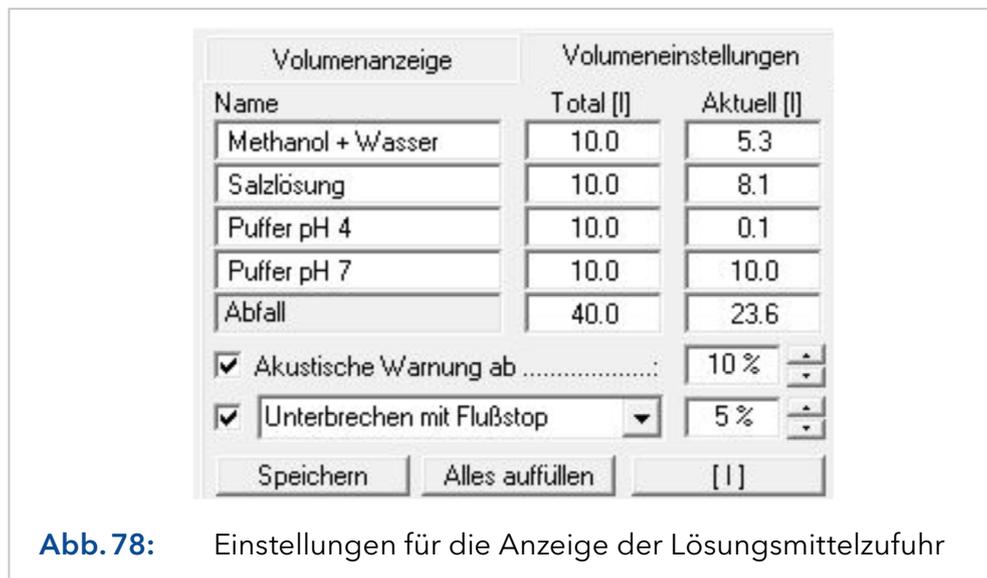


Abb. 77: Visualisierung der Lösungsmittelzufuhr

Ein Lösungsmittel, das unter den festgelegten Mindestprozentsatz gefallen ist, oder ein Abfallvolumen, das den Höchstprozentsatz überschritten hat, wird mit einem roten Ausrufezeichen markiert. Sie können die rechte Seite des Fensters mit der Schaltfläche **MEHR DETAILS** öffnen. Mit dem Button **WENIGER DETAILS** können Sie es dann wieder schließen. Im rechten Teil des Fensters werden die Lösemittelnamen und die numerischen Lösemittelmengen angezeigt. Die Werte neben **AKTUELLER LAUF VERBRAUCHT** zeigen den Lösungsmittelverbrauch der geladenen Zeittabelle als Volumen und in Prozent. Diese Anzeige dient zur Kontrolle, ob die Lösungsmittelvorräte für den aktuellen Lauf ausreichend sind.

Die Werte werden als absolutes Volumen und in Prozent des Gesamtvolumens angezeigt.

15.3 Einstellungen für die Anzeige der Lösungsmittelzufuhr



Im Teil *VOLUMENEINSTELLUNGEN* können Sie unter *NAME* eigene Namen für die Lösungsmittel A bis D eingeben. Geben Sie in den Feldern unter *TOTAL* das Gesamtvolumen der einzelnen Lösemittelbehälter und unter *AKTUELL* den aktuellen Füllstand der Behälter ein. Bei der Eingabe des aktuellen Lösemittelvolumens sollten die Pumpen gestoppt werden, da die Werte in den Feldern bei laufender Pumpe ständig aktualisiert werden, d.h. Ihre Eingaben werden überschrieben.

Verwenden Sie den Button [l] bzw. [ml] in der rechten unteren Ecke des Fensters, um die Volumeneinheit umzuschalten. Die Schaltfläche *ALLES AUFFÜLLEN* setzt alle aktuellen Lösungsmittelvolumina auf das Gesamtvolumen der entsprechenden Behälter und den Abfallbehälter auf Null zurück. Mit der Schaltfläche *SPEICHERN* werden die Einstellungen übernommen und gespeichert.

Die Option *AKUSTISCHE WARNUNG AB* legt einen prozentualen Schwellwert fest, bei dem der Alarm ertönt. Sie können den Ton in der Datei PurityChrom.ini [SolventSupply](s. Kapitel 23 auf Seite 107) definieren. Der zweite Schwellwert mit der Option *ALLES STOPPEN* oder *UNTERBRECHEN MIT FLUSSSTOPP* dient zum Stoppen der Pumpen, um ein Trockenlaufen der Säule zu verhindern.

ALLES STOPPEN stoppt die Zeittabelle und die Pumpen, und *UNTERBRECHEN MIT FLUSSSTOPP* unterbricht die Ausführung der Zeittabelle und stellt die Pumpen auf eine Flussrate von 0 ml ein. Wenn die Lösemittelbehälter wieder gefüllt sind, können Sie die Zeittabelle mit *FORTSETZEN* fortsetzen. Wenn Sie die Funktion Lösungsmittelzufuhr nicht verwenden möchten, müssen Sie die Option *AKUSTISCHE WARNUNG AB* und *ALLES STOPPEN* oder *UNTERBRECHEN MIT FLUSSSTOPP* abwählen.

Zusätzlich haben Sie die Möglichkeit, eine echte Füllstandsanzeige mit analogen Ausgängen zu verwenden, die in der PurityChrom.ini-Datei [SolventSupply] (s. Kapitel 23 auf Seite 107) definiert werden können.

16. Abfallverwaltung

16.1 Allgemein

Die Funktionstaste und der Menüpunkt *ABFALLVERWALTUNG*  im Hauptfenster öffnet das Fenster, in dem Sie die Anzeige der Abfallwirtschaft visualisieren können.

In der PurityChrom.ini-Datei [WasteManagement] (s. Kapitel 23 auf Seite 107) können Sie das Ventil definieren, das als Abfallentsorgungsventil fungieren soll. Die Anzahl der möglichen Behälter richtet sich nach der Anzahl der Ventilstellungen. Zusätzlich haben Sie die Möglichkeit, das Abfallmanagement zu umgehen und Ihre Fraktionen im normalen Abfall in definierten Situationen zu sammeln, indem Sie das Bypassventil in der PurityChrom.ini-Datei [WasteManagement] (s. Kapitel 23 auf Seite 107) konfigurieren. Dieses Ventil sollte zwei Stellungen haben. Die erste kann auf den normalen Abfall und die zweite auf das für die Abfallentsorgung verwendete Ventil umschalten.

16.2 Anzeigen

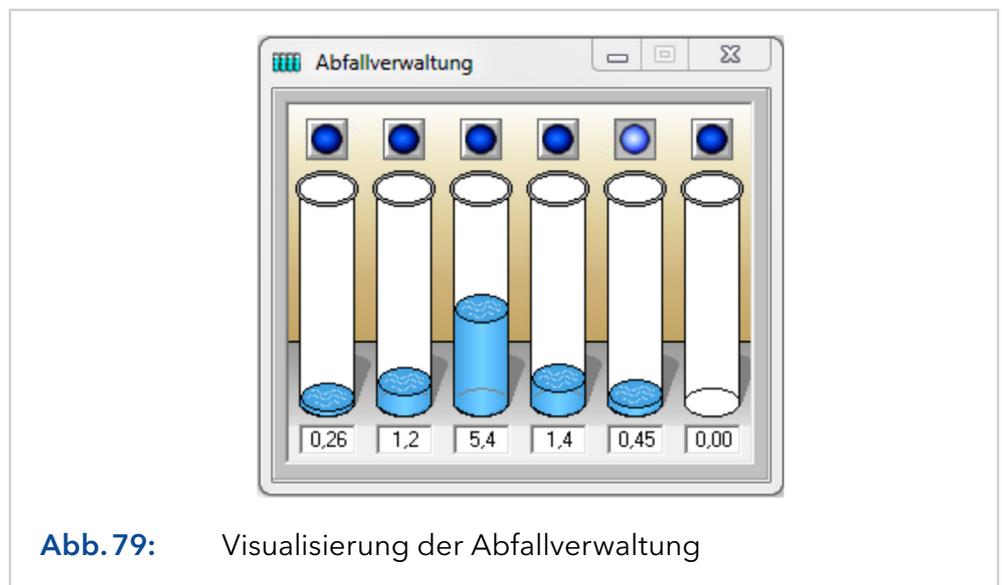


Abb. 79: Visualisierung der Abfallverwaltung

Das Fenster zeigt die Anzahl der Behälter in der Reihenfolge der konfigurierten Ventilstellungen an. Die LED oberhalb der Behälter zeigt an, ob die Position auf dem Ventil gewählt ist. Sie ist gleichzeitig auch ein Knopf zur Einstellung der Ventilstellung. Unterhalb der Behälter zeigt eine Wertanzeige das berechnete Volumen im Inneren des Behälters an. Mit einem Klick mit der rechten Maustaste können Sie den Behälter entleeren (*EMPTY CONTAINER 1*).

16.3 Wie man die Abfallverwaltung nutzt

Eine typische Anwendung der Abfallverwaltung ist die automatische Fraktionierung. In einer solchen Anwendung können Sie die nicht wertvollen Fraktionen jeder Injektion separat sammeln, falls eine Probe nicht an die Säule gebunden hat oder die Elution missglückt ist. Bei einer zyklischen Programmierung der Zeittabelle schaltet die Position nach jedem Durch-

lauf oder bei Erreichen des eingestellten Volumens für den Behälter auf die nächste Position um. Ein neuer Lauf wird nur dann gestartet, wenn der Behälter der vorgesehenen Position als *LEER* markiert ist. Andernfalls schaltet die Methode auf *HALTEN (HOLD)* um. In diesem Fall erhalten Sie eine Fehlermeldung auf dem Bildschirm.

17. Rack-Anzeige des Fraktionssammlers (Fraktionsrack)

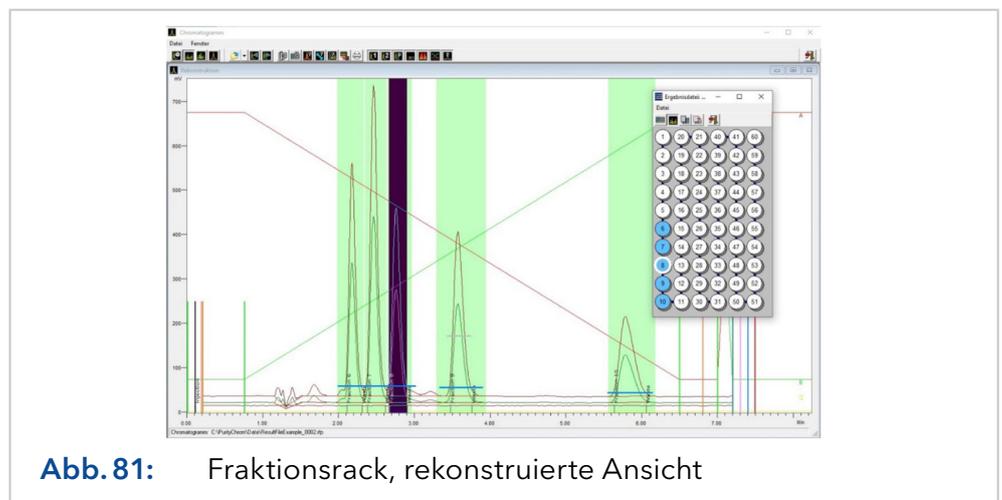
17.1 Allgemein

Der Funktionsknopf oder die Menüoption *FRAKTIONSRACK*  im Hauptfenster öffnet das Fenster mit der Rack-Anzeige des Fraktionssammlers.



Das Fraktionsrack kann auf zwei Arten angezeigt werden:

- **AKTUELLES RACK ANZEIGEN**  - Diese Ansicht zeigt das Fraktionssammler-Rack im derzeitigen Zustand mit allen Positionen. Die gefüllten Fraktionen werden in blau und die leeren in weiß angezeigt. Die aktuelle Position wird durch einen blauen Punkt dargestellt.
- **REKONSTRUIERTES RACK ANZEIGEN**  - Die rekonstruierte Ansicht zeigt die von der in das Rekonstruktionsfenster geladenen Ergebnisdatei erzeugten Fraktionen.



Wenn Sie mit der linken Maustaste auf eine der gefüllten Fraktionen klicken, wird dieser Teil des Chromatogramms invertiert dargestellt. Wenn Sie mit der linken Maustaste auf einen Peak klicken, sehen Sie die Position dieser Fraktion im Rack. Dadurch erhalten Sie eine grafische

Darstellung der Beziehung zwischen dem Chromatogramm und der im Fraktionssammler-Rack erzeugten Fraktion. Wenn Sie die Maus über eine der gefüllten Fraktionen bewegen, werden die Fraktionsnummer und das fraktionierte Volumen angezeigt.

17.2 Funktionen des Fraktionsrack-Fensters

Menü	Funktion
	<i>AKTUELLES RACK ANZEIGEN</i> wechselt zur gegenwärtigen Ansicht des Fraktionssammler-Racks.
	<i>REKONSTRUIERTES RACK ANZEIGEN</i> stellt die von einer im Rekonstruktionsfenster geladenen Ergebnisdatei gesammelten Fraktionen wieder dar.
	<i>RACKDATEI LADEN</i> öffnet eine Rackdatei zur Anzeige eines Fraktionssammler-Racks. Sie können eine Rack-Datei auch aus einer Ergebnisdatei heraus öffnen. Die Rack-Datei ist die gleiche, die in diesem Lauf verwendet wurde.
	<i>RACKEINSTELLUNGEN</i> öffnet das Fenster zum Erstellen einer Rack-Datei zur Anzeige eines Fraktionssammler-Racks.
	<i>EDITOR FRAKTIONSTABELLE ANZEIGEN</i> öffnet ein Fenster, in dem eine Fraktionstabelle erstellt werden kann.
	<i>ALLE FRAKTIONEN ZUR FRAKTIONSTABELLE HINZUFÜGEN</i> fügt alle Fraktionen der geladenen Ergebnisdatei in die Fraktionstabelle ein.
	<i>BEENDEN</i> schließt die Rack-Anzeige des Fraktionssammlers.

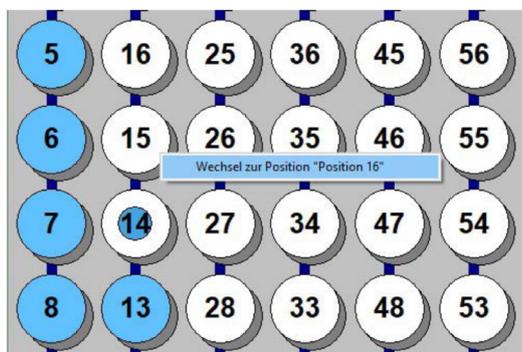


Abb. 82: Fraktionsrack, Ändern der Position des Fraktionssammlers

Die Rack-Anzeige ermöglicht es Ihnen, die Position des Fraktionssammlers direkt zu ändern. Klicken Sie dazu mit der rechten Maustaste auf eine

Fraktion und wählen Sie dann mit der linken Maustaste die Menüoption *WECHSEL ZUR POSITION*

17.3 Fraktionstabelle

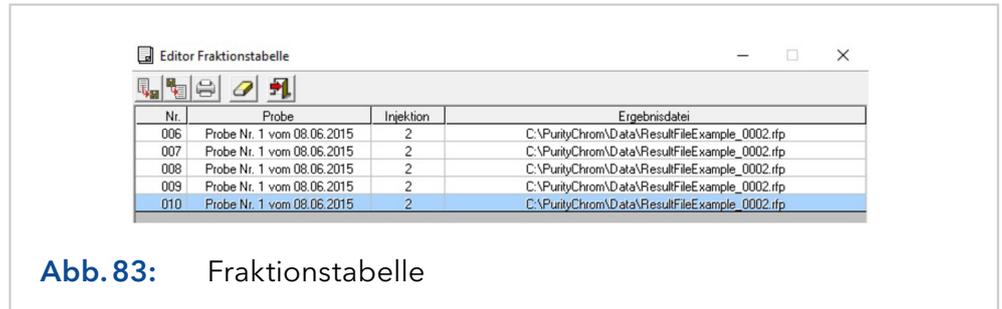


Abb. 83: Fraktionstabelle

Die Fraktionstabelle enthält eine Liste von Fraktionen, die der Benutzer manuell im Fraktionsrack-Fenster ausgewählt hat. Fraktionen können in die Fraktionstabelle eingefügt werden, indem man mit der rechten Maustaste in eine Fraktion der Rack-Anzeige klickt und den Menüpunkt *ZUR FRAKTIONENTABELLE HINZUFÜGEN* wählt. Alle Fraktionen eines Fraktionierungslaufs können in die Fraktionstabelle eingefügt werden, indem man den Button *ALLE FRAKTIONEN ZUR FRAKTIONSTABELLE HINZUFÜGEN* in der Symbolleiste im Fraktionsrack-Fenster wählt. Die Fraktionstabelle enthält die folgenden Spalten: die Fraktionsnummer, eine Probenbeschreibung, die Injektionsnummer, den Namen und den Pfad der entsprechenden Ergebnisdatei.

Die Symbolleiste der Fraktionstabelle enthält die folgenden Funktionsschaltflächen:

Menü	Funktion
	<i>FRAKTIONSTABELLE IMPORTIEREN</i> importiert eine bereits vorhandene Fraktionstabelle.
	<i>FRAKTIONSTABELLE EXPORTIEREN</i> wandelt die Fraktionstabelle in das CSV-Format (Comma Separated Value) um.
	<i>FRAKTIONSTABELLE LÖSCHEN</i> löscht den Inhalt der Fraktionstabelle. Um ein versehentliches Löschen zu vermeiden, wird vor dem Löschen eine Sicherheitsabfrage aktiviert.
	<i>FRAKTIONSTABELLE DRUCKEN</i> öffnet ein Dialogfenster zum Ausdrucken der Fraktionstabelle.
	<i>BEENDEN</i> schließt die Fraktionstabelle.

17.4 Einrichtung des Fraktionsracks

Die Funktionsschaltfläche *EINSTELLUNGEN FRAKTIONSRACK* öffnet das Fenster zum Erstellen oder Bearbeiten einer Rackdatei. Rackdateien enthalten Informationen über die Geometrie des Racks und das Verhältnis

zwischen der Anzahl und den entsprechenden absoluten Koordinaten einer Fraktion.

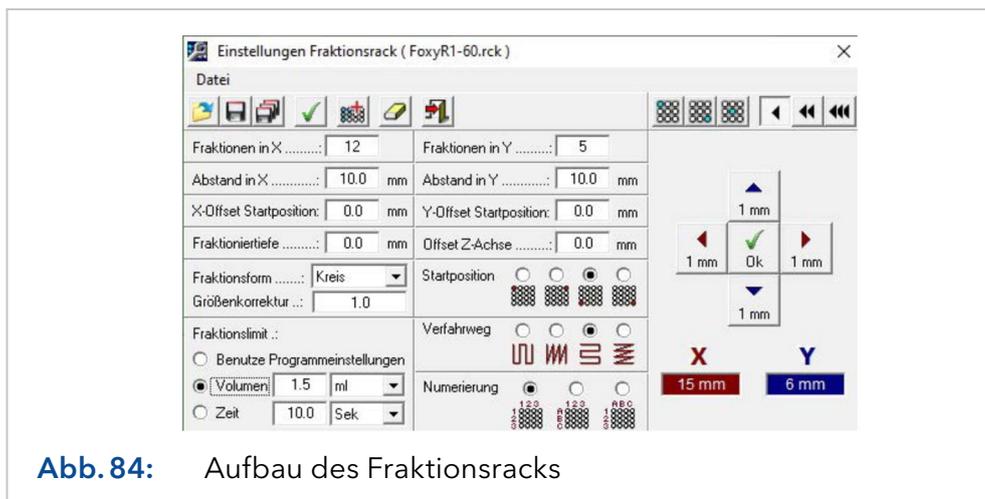


Abb. 84: Aufbau des Fraktionsracks

FRAKTIONEN IN X und *FRAKTIONEN IN Y* geben die Anzahl der Fraktionsbehälter in der x- und y-Achse an. Sie können die Abstände zwischen den Mittelpunkten der Fraktionsfläschchen in der x- und y-Achse in den Feldern *ABSTAND IN X* und *ABSTAND IN Y* eingeben. Mit *X-/Y-OFFSET STARTPOSITION* können Sie den x- und y-Abstand des Mittelpunkts der ersten Fraktion von der Ausgangsposition definieren.

FRAKTIONIERTIEFE bestimmt die Tiefe der Fraktionsfläschchen, wenn eine Z-Achse verwendet wird, wobei *OFFSET Z-ACHSE* den Versatz der Z-Achse während eines Fraktionsschritts festlegt.

STARTPOSITION bestimmt die Lage der ersten Fraktion. *VERFAHRWEG* legt das Verfahren für die Fraktionierung fest. *NUMMERIERUNG* legt die Bezeichnung der Fraktionen fest.

Sie können unter *FRAKTIONSLIMIT* ein maximales Fraktionsvolumen oder eine maximale Fraktionszeit für den Fraktionslimiter hinzufügen. Die Werte aus dem Limiter-Setup werden beim Laden dieser Rackdatei durch die Werte der Rackdatei ersetzt. Wenn die Option *BENUTZE PROGRAMMEINSTELLUNGEN* ausgewählt ist, werden die Werte aus dem Limiter-Setup beibehalten.

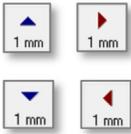
Die Symbolleiste oben links im Fenster enthält die folgenden Funktionsschaltflächen:

Menü	Funktion
	<i>RACKDATEI LADEN</i> , um eine zuvor erstellte Rackdatei zu laden.
	<i>RACKDATEI SPEICHERN</i> , um eine neue oder geänderte Rackdatei zu speichern.
	<i>RACKDATEI SPEICHERN UNTER ...</i> , um eine Rackdatei unter einem neuen Namen zu speichern.
	<i>SYMMETRISCHES RACK ERSTELLEN</i> erstellt mit Hilfe der angegebenen Daten eine symmetrische Anordnung aller Fraktionen im Rack.

Menü	Funktion
	<i>RACKDATEI ANHÄNGEN</i> fügt eine bereits erstellte Rackdatei an die aktuell geladene Datei an.
	<i>RACKEINSTELLUNGEN LÖSCHEN</i> , um den Inhalt der Boxen zu löschen.
	<i>BEENDEN</i> , um das Einrichtungsfenster der Rackdatei zu schließen.

Das Lehrmodul zur Einrichtung des Fraktionssammlers befindet sich auf der rechten Seite des Fensters. Mit diesem Modul können die Positionen der einzelnen Fraktionen Schritt für Schritt bestimmt und korrigiert werden, wenn Fraktionssammler verwendet werden, die über Koordinaten gesteuert werden.

Die Symbolleiste im Lehrmodul enthält die folgenden Funktionsschaltflächen:

Menü	Funktion
	<i>LINKE OBERE POSITION LERNEN</i> wählt den Modus aus, um zur linken oberen Fraktion zu gelangen. Die Koordinaten werden automatisch in die Felder <i>X-/Y-OFFSET STARTPOSITION</i> eingegeben.
	<i>RECHTE UNTERE POSITION LERNEN</i> wählt den Modus aus, mit dem zur rechten unteren Fraktion gewechselt wird. Die Koordinaten drücken die X- und Y-Abstände der Fraktionen zueinander aus. Sie werden automatisch in die Felder <i>ABSTAND IN X</i> und <i>ABSTAND IN Y</i> eingegeben.
	<i>EINZELPOSITION LERNEN</i> wählt den Modus für die Korrektur der Fraktion aus, die in der Rack-Anzeige als aktuelle Fraktion angezeigt wird.
	<i>SCHRITTWEITE 1 MM</i> legt den Schrittabstand bei der Bewegung zu einer Fraktion auf 1 mm fest.
	<i>SCHRITTWEITE 10 MM</i> legt den Schrittabstand bei der Bewegung zu einer Fraktion auf 10 mm fest.
	<i>SCHRITTWEITE 50 MM</i> legt den Schrittabstand beim Übergang zu einer Fraktion auf 50 mm fest.
	Ein Klick auf einen der <i>LERN-BUTTONS</i> bewegt den Arm des Fraktionssammlers um die eingestellte Schrittweite in die entsprechende Richtung.
	Wenn der Arm des Fraktionssammlers die gewünschte Position erreicht hat, können die Koordinaten durch Klicken auf die Schaltfläche <i>OK</i> übernommen werden.

Menü**Funktion**

Die aktuelle Position des Fraktionssammlers wird in den X- und Y-Koordinatenanzeigen wiedergegeben.



Hinweis: Bitte beachten Sie, dass die Funktionen des Rack-Setups für Foxy Fraktionssammler nur eingeschränkt nutzbar sind.

18. RID 2.1L Einrichtung



Hinweis: Zur Steuerung des RID 2.1L muss ein Treiber geändert werden. Kopieren Sie den Treiber RID21L.dll von C:\PurityChrom\DriverDll nach C:\Windows\SysWOW64 (64-Bit-System) oder C:\Windows\System32 (32-Bit-System). Benennen Sie den Treiber in „PrepconLF.dll“ um.



Hinweis: Es ist nicht möglich, die Erfassung CM 2.1S und RID 2.1L zusammen durchzuführen.

Unter dem Menüpunkt *DATEI* im Hauptfenster von PurityChrom finden Sie zur Einrichtung des RID 2.1L das *RI DETECTOR SETUP*:

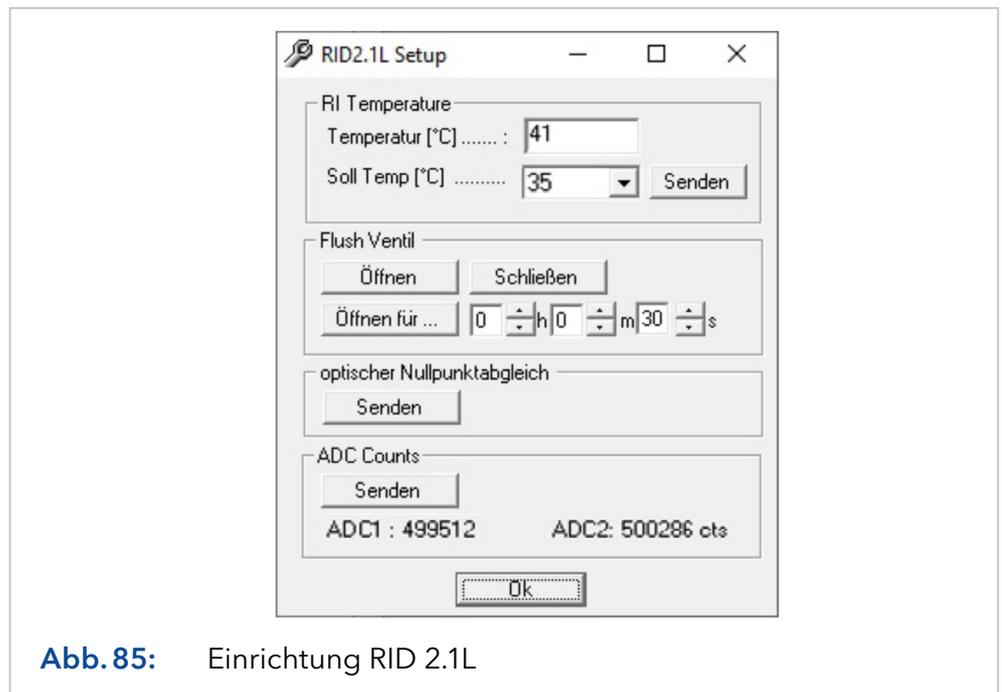


Abb. 85: Einrichtung RID 2.1L

Für die Temperaturkontrolle des AZURA® Detektors RID 2.1L muss die Temperatur in der PurityChrom.ini aktiviert werden. Stellen Sie daher im Abschnitt [KNAUERRID21L] die *TEMPZONE=1* ein. Für die Verwendung der Standardtemperatur des RID 2.1L stellen Sie die Temperatur auf den Standardwert ein (*TEMPERATURE=35* für Analysegerät; *TEMPERATURE=0* für HighFlow-Version). Die Temperatur kann während der Analyse erfasst werden. Stellen Sie daher die Kanäle des RID 2.1L in der .ini-Datei auf *CHANNELS=2*.

Im Abschnitt [Temperature] kann eine Bezeichnung festgelegt werden:

[Temperature] FunctionName1=RID

Um eine Temperatur einzustellen, wählen Sie unter *SOLL TEMP* die Solltemperatur und drücken Sie den Button *SENDEN*. Die aktuelle Temperatur wird unter *TEMPERATUR* angezeigt.

Temperatur [°C]: Aktuelle Temperatur

Soll Temp [°C]: Temperatur der Wahl

Um die Referenz- und Messzelle zu spülen, muss das Spülventil (Flush Ventil) geöffnet werden. Dabei werden die beiden Buttons *ÖFFNEN* und *SCHLIESSEN* verwendet.

Für eine zeitlich begrenzte Spülung können Sie eine Zeit auswählen und den Spülvorgang über den Button *ÖFFNEN FÜR* starten. Nach Betätigen dieses Buttons wird ein Countdown in der oberen rechten Ecke angezeigt.

OPTISCHER NULLPUNKTABGLEICH: Die Position des Nullglases wird bei eingeschaltetem Gerät justiert. Wenn dies nicht automatisch passiert, können Sie das Gerät durch Klicken auf die Schaltfläche *SENDEN* justieren.

ADC COUNTS: Die Lichtintensität muss für beide Kanäle nahezu identisch sein. Bei einem neuen Gerät sollte jeder Kanal etwa 500.000 Counts haben. Nach dem Klicken auf die Schaltfläche *SENDEN* versucht das Gerät, die Balance einzustellen.

19. Steuerung von Massenspektrometern

19.1 Allgemein

Massenspektrometer können in PurityChrom entweder über MS-LC-Kopplung oder über direkte Steuerung mit der PurityChrom-Software implementiert werden. Bisher ist das Massenspektrometer 4000 MiD implementiert.

Die Steuerung des 4000 MiD folgt der Logik der Steuerung innerhalb der Masscape®-Software von Microsaic. Komplexe und wenig genutzte Funktionen wie z.B. die Kalibrierung der Spektrometer sind in PurityChrom 5 nicht verfügbar. Um diese Aufgaben zu erfüllen, besteht die Möglichkeit, von PurityChrom zur Masscape®-Software über TightVNC für die Fernverbindung zu wechseln.

19.2 Steuerung des 4000 MiD / MIDAS-Spektrometers

Die Steuerung des Massenspektrometers kann über den Menüpunkt *MASSENSPEKTROMETER* oder den betreffenden Button  in der Symbolleiste geöffnet werden.

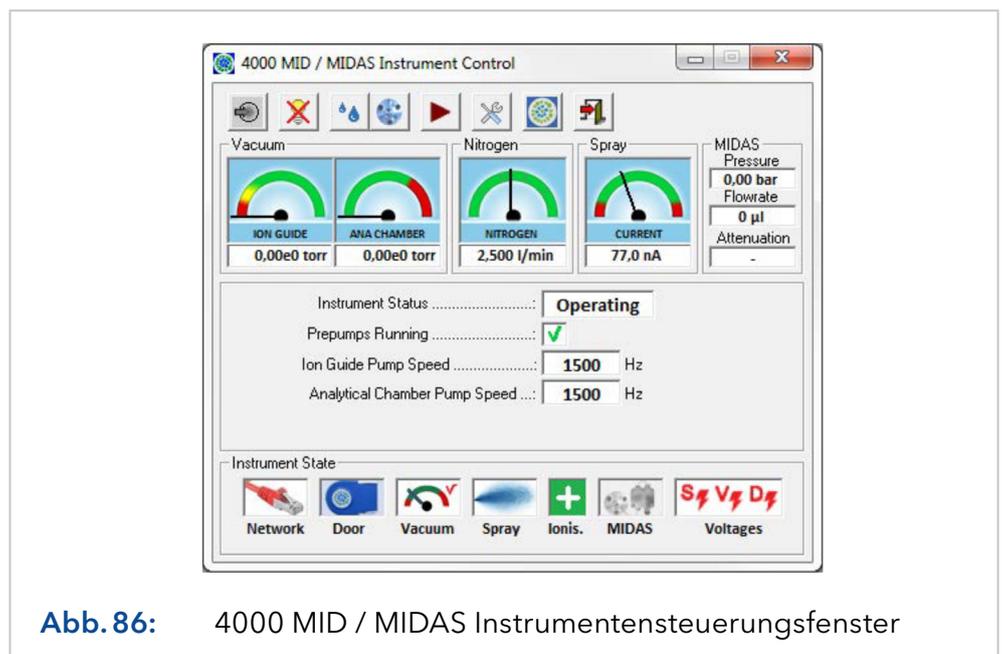


Abb. 86: 4000 MID / MIDAS Instrumentensteuerungsfenster

19.2.1 Funktionstasten

Menü	Funktion
	<p><i>AUSPUMPEN, BELÜFTUNG, BELÜFTUNG DEAKTIVIERT</i>: Wenn das Massenspektrometer belüftet ist, startet bei Betätigung dieses Buttons das Evakuieren durch die Vakuumpumpen. Wenn das Spektrometer evakuiert aber nicht in Betrieb ist, kann das System über den Button belüftet werden.</p> <p>Wenn die Messung mit <i>OPERATE</i> gestartet wird, kann das Spektrometer nicht belüftet werden und diese Funktionstaste ist deaktiviert.</p>
	<p><i>MESSUNG STARTEN (OPERATE), MESSUNG STOPPEN</i>: Die Funktionstaste <i>OPERATE</i> steht zur Verfügung, sobald das Vakuum eine ausreichende Qualität hat. Während des Betriebs kann die Messung mit dieser Funktionstaste gestoppt werden. Falls Makeup Pumpe und/oder Attenuator aktiv sind, werden diese ebenfalls abgeschaltet.</p>
	<p><i>STARTEN UND STOPPEN DER MAKEUP-PUMPE</i>: Diese Funktion ist nur verfügbar, wenn das MIDAS eingeschaltet und mit der Masscape-Software aktiviert ist und die Messung in Betrieb ist.</p>
	<p><i>START- UND STOPP ATTENUATOR</i>: Diese Funktion ist nur verfügbar, wenn das MIDAS eingeschaltet und mit der Masscape-Software aktiviert ist und die Messung in Betrieb ist.</p>
	<p><i>START UND STOPP SCAN</i>: Diese Funktion ist verfügbar, sobald die Messung in Betrieb ist. Beim Starten einer Zeittabelle wird der Scan automatisch gestartet. Der Scan kann während der Ausführung einer Zeittabelle nicht angehalten werden.</p>
	<p><i>SETUP</i>: Öffnet das Fenster für Einstellungen. Diese Funktion ist nur verfügbar, wenn der Scan nicht gestartet ist. (Einzelheiten siehe unten)</p>
	<p><i>MASSCAPE</i>: Beendet die Steuerung des 4000 MiD-Spektrometers durch PurityChrom und ermöglicht eine Remote-Desktop-Verbindung über TightVNC zum internen Linux-PC des MiD, auf dem die Masscape®-Software läuft. Diese Funktion ist nicht verfügbar, während die Messung in Betrieb ist.</p>

19.2.2 Anzeigen

Anzeige für Vakuum, N-Verbrauch, Spraystrom sowie Druck und Durchfluss der Makeup-Pumpe und die Dämpfung sind verfügbar, solange der Scan nicht gestartet wird.

Darüber hinaus sind Anzeigen verfügbar für:

- Spektrometer-Status
- Vorpumpenstatus (ein/aus)
- Ionen Optik Pumpen Drehzahl
- Trennkammer Pumpen Drehzahl
- Warnmeldungen

Während der Scanvorgang aktiv ist, werden die numerischen Messwerte (z.B. Anzahl der detektierten Ionen) für die ausgewählten Massenaufnahmekanäle (definiert im Setup, siehe unten) sowie der Gesamtionenstrom (TIC) angezeigt.

Status-Anzeigen

Menü	Funktion
	<i>NETZWERK</i> : Gibt an, ob eine Verbindung zum Massenspektrometer hergestellt werden konnte.
	<i>TÜR</i> : Zeigt den Status der Abdeckung der Sprühquelle an - offen oder geschlossen. Wenn die Tür geöffnet wird, wird die Sprühspannung abgeschaltet und die Messung kann nicht gestartet werden.
	<i>VACUUM</i> : Zeigt an, ob die Drücke für die Messung ausreichend niedrig sind.
	<i>SPRAY</i> : Gibt den Status der Sprühquelle wieder.
	<i>IONISIERUNG</i> : Zeigt an, welche Ionisierung im Setup ausgewählt ist.
	<i>MIDAS</i> : Zeigt an, ob Makeup-Pumpe und Attenuator laufen.
	<i>SPANNUNGEN</i> : Gibt an, ob die Sprayspannung, die Spannung der Ionenoptik und die Hochspannung des Detektors mit den voreingestellten Werten übereinstimmen. Während des Betriebs müssen alle drei Spannungen eingeschaltet sein.

19.2.3 4000 MiD / MIDAS Einrichtung

Die im Setup-Fenster eingegebenen Parameter können teilweise durch Parameter in der Zeittabelle überschrieben werden.

Midas-Einrichtung

Auf der Registerkarte MIDAS Setup können die Flussrate der Makeup-Pumpe und die Parameter für den MRA Splitter eingegeben werden.

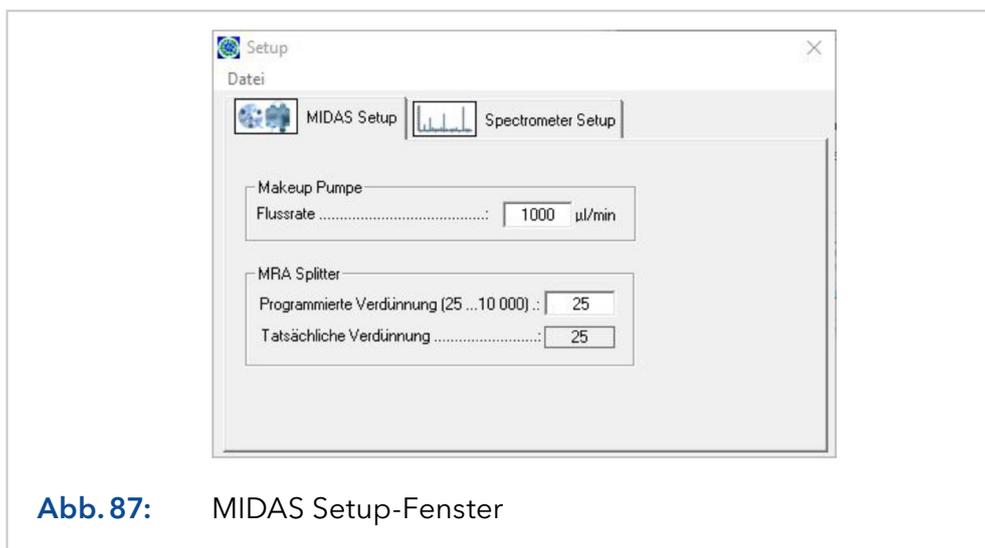


Abb. 87: MIDAS Setup-Fenster

Einrichtung des Spektrometers

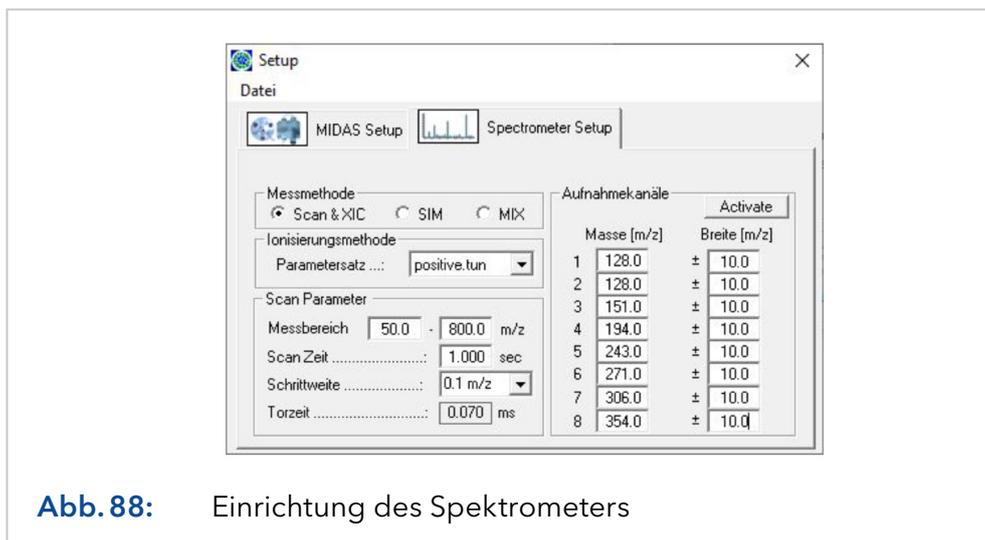


Abb. 88: Einrichtung des Spektrometers

Messverfahren Es gibt drei Möglichkeiten der Datenerfassung: Scan & XIC, SIM oder MIX. Der Standard-Erfassungsmodus ist Scan & XIC. Im Modus Scan & XIC erfasst PurityChrom komplette Massenspektren und einzelne Massendaten Spuren werden als Chromatogramme extrahiert. PurityChrom kann das komplette Spektrum in der Ergebnisdatei speichern. Im SIM-Erfassungsmodus werden nur ausgewählte Ionenmassen gemessen, es können keine Spektren gespeichert werden. Der MIX-Modus kann in der .ini-Datei (siehe Anhang) aktiviert werden und zeichnet wie der SIM-Modus ausgewählte Ionenmassen auf, zeichnet aber auch das gesamte Spektrum auf.

Ionisierungsmethode Abhängig von den chemischen Eigenschaften der Proben kann der positive oder negative Ionisationsmodus verwendet werden. Die Auswahl des Ionisationsmodus erfolgt über Parameterdateien (tune-Dateien), z.B. positive.tun und negativ.tun. Die Tune-Dateien können nur mit der Software Microsaic Masscape eingestellt werden.

Messbereich: Es können Bereiche zwischen 50 und 800 m/z gewählt werden. Massen unter 50 können nicht gemessen werden.

Scan Zeit: Gesamtzeit für ein vollständiges Spektrum

Schrittweite: Kann auf 0,1 oder 0,2 m/z eingestellt werden und gibt den Abstand zwischen zwei Datenpunkten und damit die Genauigkeit der Daten an.

Torzeit: Zeit, die für einen einzelnen Datenpunkt benötigt wird. Diese wird automatisch aus Messbereich, Scan Zeit und Schrittweite berechnet.

Aufnahmekanäle: Für die Chromatogrammkanäle können bis zu acht Massen definiert werden. Diese Parameter werden beim Laden einer Zeittabelle durch die Einträge für MS-Kanäle (siehe unten) überschrieben.

Massenspektrometer-Parameter in der Zeittabelle

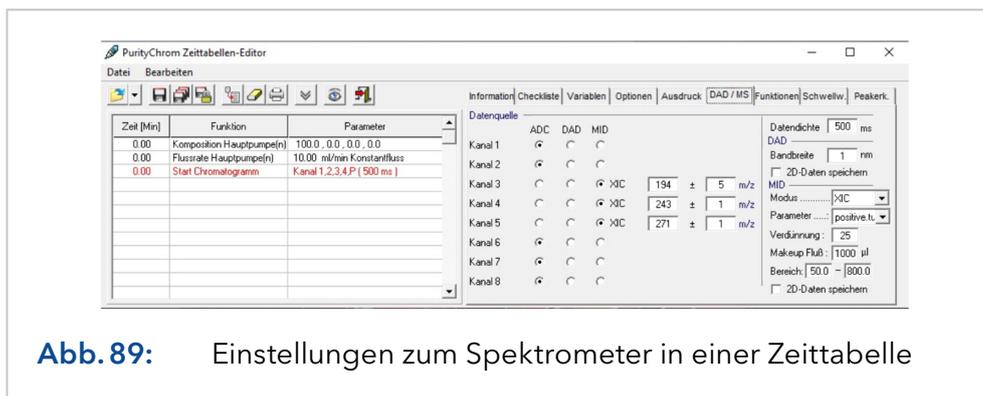


Abb. 89: Einstellungen zum Spektrometer in einer Zeittabelle

Die folgenden Parameter für die Steuerung des Massenspektrometers sind auf der Registerkarte DAD/MS des Zeittabelleneditors verfügbar:

- **Datenquelle:** Für bis zu 8 Kanäle können Sie wählen, ob ein AD-Wandler als Datenquelle verwendet wird (wählen Sie diese Option auch für die Kanäle eines UV-Detektors), welcher Wellenlängenbereich für die Kanäle eines Diodenarray-Detektors verwendet wird oder welche Massenspuren vom Massenspektrometer erfasst werden sollen.
- **Datendichte:** Datenpunktdichte, Slicewidth in Millisekunden. Hier sollte der gleiche Wert gewählt werden wie unter dem Reiter *FUNKTIONEN* bei dem Befehl *START CHROMATOGRAMM*.
- **Modus:** Erfassungsmodus des Massenspektrometers: XIC oder SIM oder MIX (siehe MS-Setup, oben)
- **Verdünnung:** Einrichtung der MIDAS-Dämpfung (Verdünnung, Attenuator)
- **Makeup Fluß:** Durchflussrate der MIDAS Makeup-Pumpe
- **Bereich:** Massenbereich für den Scan (siehe MS-Setup, oben)
- **2D-Daten speichern:** Wenn diese Option gewählt ist, werden alle während der Datenerfassung aufgenommenen Massenspektren in der Ergebnisdatei gespeichert. Gespeicherte Spektren können im Rekonstruktionsfenster betrachtet werden.

20. Steuerung von Heizgeräten

20.1 CT 2.1



Hinweis: Zur Steuerung des CT 2.1 muss ein Treiber geändert werden.

- Kopieren Sie den Treiber CT21A.dll von C:\PurityChrom\DriverDll nach C:\Windows\SysWOW64 (64-Bit-System) oder C:\Windows\System32 (32-Bit-System).
- Benennen Sie den Treiber in „thermocontrol.dll“ um
- In der ini-Datei kann im Abschnitt [Temperatur] ein Name angegeben werden: [Temperatur] FunktionsName1=CT 2.1
- IP-Adresse des Säulenofens unter [Winsock-Port] in der Datei PurityChrom.ini einfügen
- Im Setup-Menü von PurityChrom, wählen Sie „Temperatursteuerung“, den Winsock-Port und als Treiber „MultComDll“ im Tab „Kommunikation“.

Die Steuerung des Säulenofens kann manuell über den Menüpunkt bzw. den Button *TEMPERATURSTEUERUNG*  im Hauptfenster vorgenommen werden.

20.2 Memmert UN 55-Ofen



Hinweis: Zur Steuerung des Memmert UN 55-Ofens aktivieren Sie bitte den entsprechenden Eintrag in der .ini-Datei (siehe Anhang). Die IP-Adresse muss direkt am Schrank eingestellt werden und der Fernzugriff muss im Schranksetup erlaubt sein.

- In der ini-Datei im Abschnitt [Temperatur] kann ein Name angegeben werden: [Temperatur] FunktionsName1=UN 55
- Dieser Ofen kann ebenso wie der CT 2.1 über die Schaltfläche Temperatureinstellungen gesteuert werden.

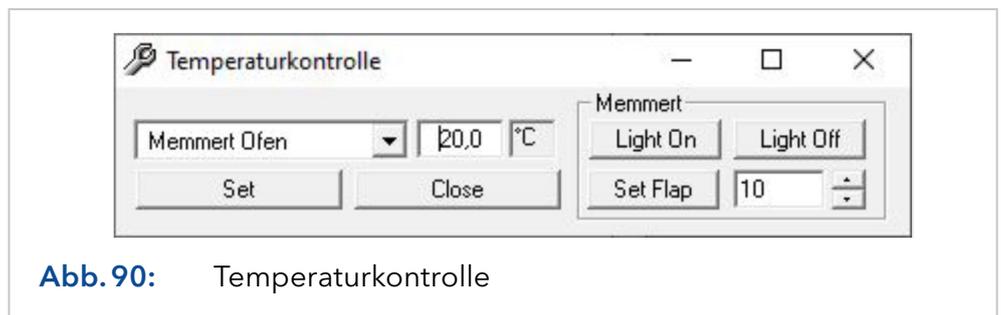


Abb. 90: Temperaturkontrolle

21. Event-Box

21.1 Manuelle Steuerung der Event Box

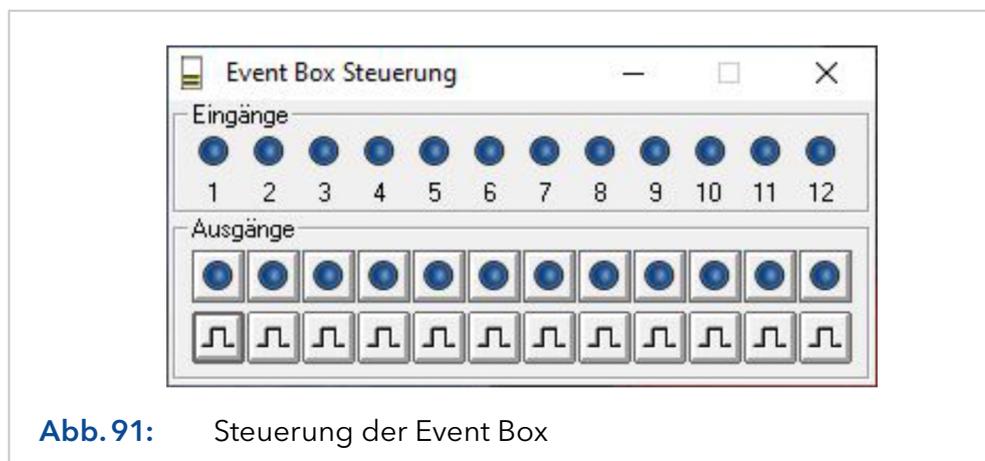


Abb. 91: Steuerung der Event Box

Die Funktionstaste oder der Menüpunkt *EVENT BOX*  im Hauptfenster öffnet das Fenster der Event Box. Die obere LED-Reihe stellt die Eingänge dar. Ein aktiver Eingang wird durch eine leuchtende LED angezeigt. Die Schaltflächen im unteren Teil des Fensters dienen zum manuellen Schalten der Ausgänge. Die obere Reihe von Schaltflächen schaltet die Ausgänge statisch ein oder aus. Die LEDs in den Schaltflächen zeigen den Status der einzelnen Ausgänge an. Die untere Reihe von Tasten schaltet die Ausgänge mit einem Impuls von einer Sekunde Dauer.

Bei Standard-KNAUER-Systemen empfangen die Ein- und Ausgänge der Eventbox entweder ein Signal oder geben ein Signal an die Stiftleiste der Systempumpen (P6.1L oder P2.1L) aus. Die entsprechenden Ein- und Ausgänge und die entsprechenden Funktionen auf der Stiftleiste entnehmen Sie bitte der Tabelle.

21.1.1 Eventbox-Eingang

	Gerät	Funktion
Eingang 1	Hauptpumpe	Start In
Eingang 2	Hauptpumpe	Error In
Eingang 3	Hauptpumpe	Lecksensor
Eingang 4	Hauptpumpe	Aktivierung bei Motorausfall
Eingang 5	Nebpumpe	Start In
Eingang 6	Nebpumpe	Error In
Eingang 7	Nebpumpe	Lecksensor

	Gerät	Funktion
Eingang 8	Nebenspumpe	Aktivierung bei Motorausfall

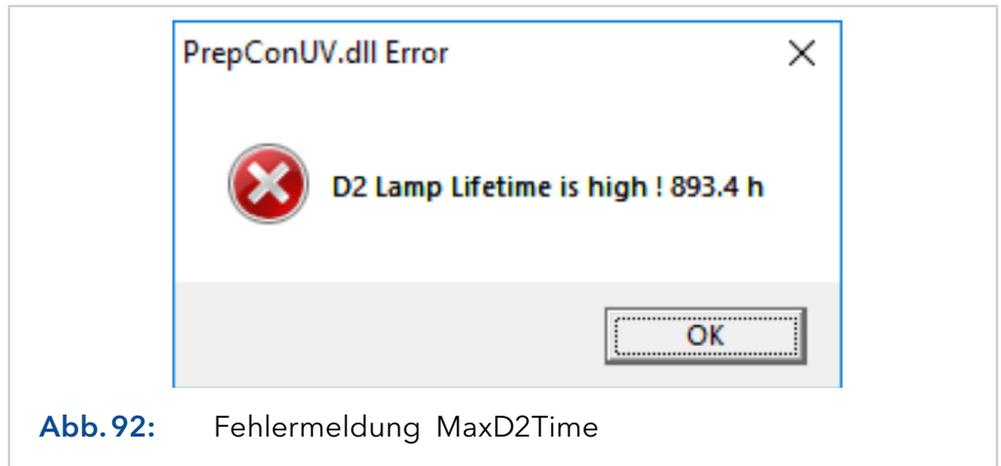
21.1.2 Eventbox-Ausgang

	Gerät	Funktion
Ausgang 1	Hauptpumpe	1TTL
Ausgang 2	Hauptpumpe	1TTL
Ausgang 3	Hauptpumpe	3OC
Ausgang 4	Hauptpumpe	4TTL
Ausgang 5	Nebenspumpe	1TTL
Ausgang 6	Nebenspumpe	1TTL
Ausgang 7	Nebenspumpe	3OC
Ausgang 8	Nebenspumpe	4TTL

22. Fehlerbehebung

22.1 Fehlermeldung Lampenlebensdauer

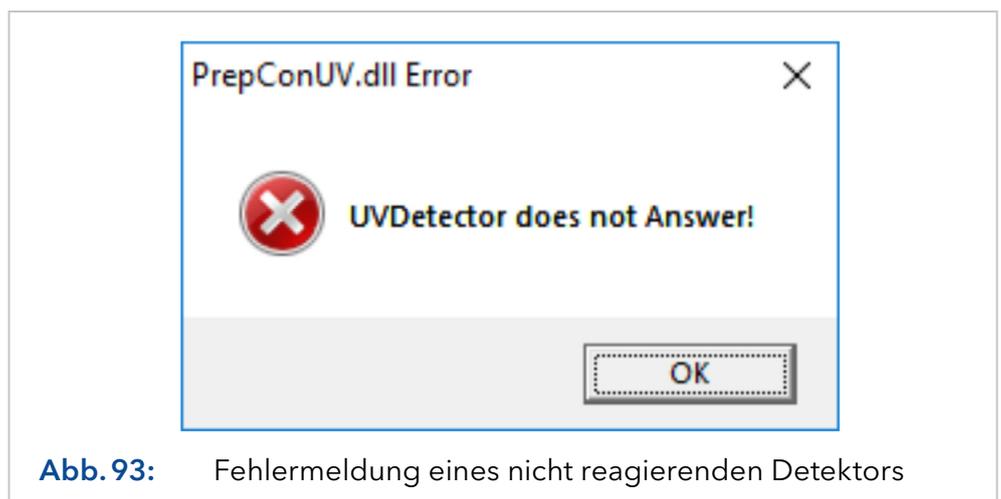
Nach dem Start von PurityChrom mit einer eingestellten MaxD2Time=XXXX (1-2000) in der .ini-Datei erscheint ein Popup-Fenster, wenn der eingestellte Wert für die Lampenlebensdauer überschritten wird.



Der Fehler kann mit *OK* quittiert werden. Danach ist ein normales Arbeiten mit dem System möglich.



Hinweis: Wenn die Meldung nicht sofort bestätigt wird, reagiert der Detektor nicht und es wird kein UV-Signal ausgegeben. Starten Sie die Software neu und bestätigen Sie die Meldung sofort oder setzen Sie MaxD2Time = 0 in der .ini-Datei, damit die Lampenlebensdauer nicht mehr beim Starten der Software abgefragt wird.



22.2 Kommunikationsfehler „Interface sends an error“

Wenn ein Fenster mit „Interface sends an error“ erscheint, drücken Sie bitte die Schaltfläche „Show Error“, um eine detaillierte Fehlermeldung zu erhalten.

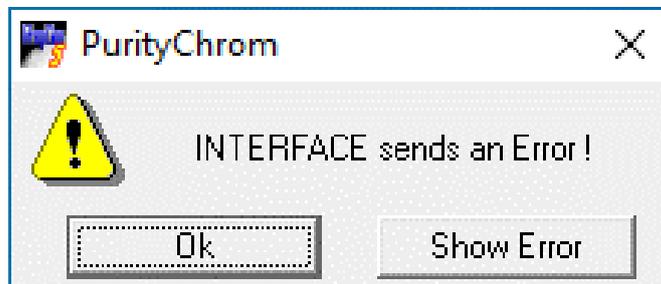


Abb. 94: Allgemeine Fehlermeldung, Interface sends an Error

Die detaillierte Fehlermeldung enthält das Zeichen #, gefolgt von einer Zahl. Diese Nummer bezieht sich auf die Rangfolge der Geräte im Setup-Menü. Dementsprechend steht „#1“ für die Hauptpumpe, „#2“ für die Nebenpumpe und „#6“ für die Temperatursteuerung und so weiter.

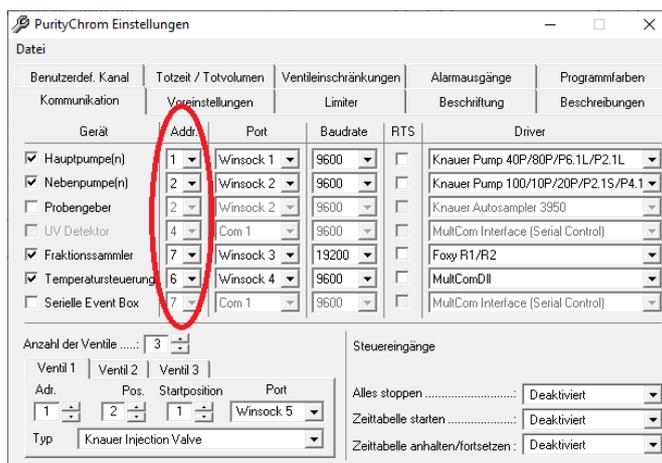
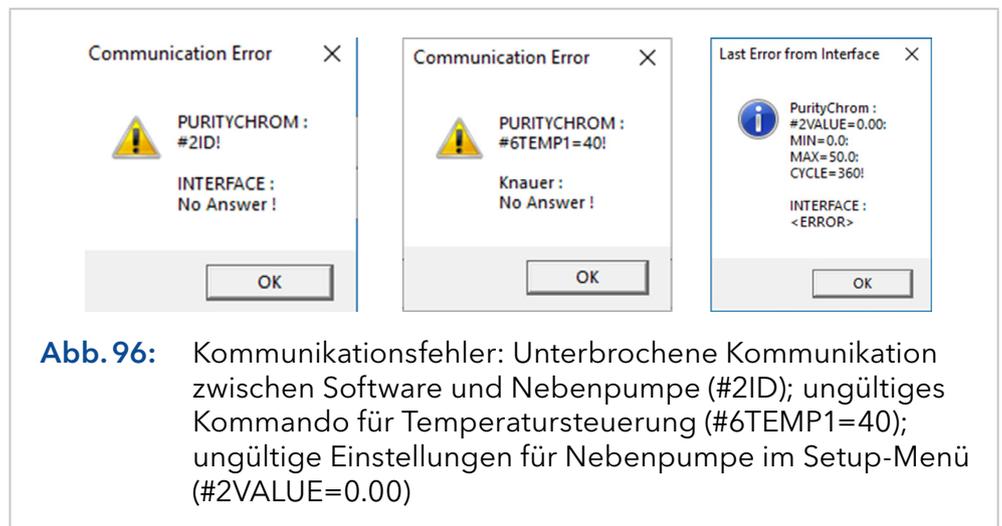


Abb. 95: Setup-Menü mit ID-Nummern von Geräten, die in Fehlermeldungen verwendet werden

„No Answer“ innerhalb einer Fehlermeldung zeigt an, dass die Kommunikation nicht zustande kommen kann. Der Grund dafür kann ein ungültiger Befehl, ein Problem mit der LAN-Verbindung oder die Notwendigkeit eines Neustarts der Software oder/und des Geräts sein. Wenn auf die ID-Nummer Werte folgen, weisen diese auf falsche Einstellungen im Setup-Menü hin, z. B. kann #2VALUE einen ungültigen Maximaldruck der Nebenpumpe anzeigen.



23. Anhang

23.1 Die Einträge in der Datei PurityChrom.ini

Sie finden die Datei PurityChrom.ini im Verzeichnis C:\Windows.

	Eintrag		Bedeutung
[MainWindow]	AlwaysOn- Top=0	[0/1]	Das Hauptfenster ist immer im Vordergrund.
	SolventCon- firm=0	[0/1]	Das Starten der Pumpe mit den Eluenten-Tasten muss immer vom Benutzer bestätigt werden.
	DataPathSe- lection=0	[0/1]	Nach dem Laden einer Zeittabelle kann der Benutzer einen Ordner für die Ergebnisdateien auswählen.
	MultiLingu- al=1	[0/1]	Das Programm ist entsprechend dem Betriebssystem mehrsprachig. (0 = Englisch, 1 = Deutsch)
	DateFor- mat=YYYY. MM.DD	[0/1]	Datumsformat des Programms
	Waveleng- thRequest=0	[0/1]	Bevor eine Zeittabelle gestartet wird, wird der Benutzer nach einer UV-Wellenlänge gefragt.
[Boards]	MCMonitor- Mode=1	[0/1]	Wenn Mobile Control beim Start von PurityChrom ausgeführt wird, ist der Zugriff auf die Geräte eingeschränkt. Wenn PurityChrom beendet wird, erhält die Mobile Control den Zugriff zurück.
	Order=PCI- FIRST	[PCIFIRST /ISAFIRST]	Reihenfolge der analogen Kanäle, wenn ISA- und PCI-Karten kombiniert eingesetzt werden.

	Eintrag		Bedeutung
[WinsockPorts]	Port1=	[IP/PORT]	<ul style="list-style-type: none"> ■ IP-Adresse und Portnummer des verwendeten Winsock-Ports. Die Portnummer wird mit einem Komma hinter der IP-Adresse angehängt. Winsock-Ports, die nicht benutzt werden, sollten keine Parameter haben. ■ Freistehende Geräte haben die Portnummer 10001. ■ Assistenten repräsentieren maximal drei Geräte mit drei individuellen Winsock-Ports, mit derselben IP-Adresse, die sich nur im IP-Port unterscheiden. Den korrekten IP-Port entnehmen Sie bitte dem Firmware-Assistenten oder den Benutzeranweisungen ASM 2.1L/ASM 2.2L. ■ Die Fraktionssammler Foxy R1 oder R2 haben die Portnummer 23. ■ Die Autosampler AS 3950/AS 6.1L haben die Portnummer 2101.
	Port2=		
	Port3=		
	Port4=		
	Port5=		
	Port6=		
	Port7=		
	Port8=		
[AutomaticDataFiles]	CSVFile=0	[0/1]	Eine Chromatogrammdatei im *.csv-Format wird am Ende eines Laufs automatisch gespeichert.
	FractionTable=0	[0/1]	Eine Fraktionstabelle im ASCII-Format wird am Ende eines Laufs automatisch gespeichert.
	SaveResult-WithSequence=1	[0/1]	Während der Ausführung einer Sequenztafel speichern Sie Ergebnisdateien (.rfp) im gleichen Ordner (1) wie die Sequenzdateien (.seq) oder (0) wie die Zeittabelle (.tcf)
[User Company]	Name=KNAUER	[Text]	Benutzerdefinierter Firmenname für alle Ausdrücke.
	FontName=Arial	[Text]	Name der Schriftart für den Firmennamen.
	FontSize=18	[Value]	Schriftgröße für den Firmennamen.
	FontBold=0	[0/1]	Fettschrift für den Firmennamen.

	Eintrag	Bedeutung
	FontItalic=0	[0/1] Kursivschrift für den Firmennamen.
	FontColor=128	[Value] Schriftfarbe für den Firmennamen.
[Pumps]	ConstantModeMajor=0 ConstantModeMinor=0	[0/1] Das Pumpensystem unterstützt einen konstanten Druckmodus, d.h. eine Flussratenregelung für das Arbeiten bei konstantem Druck.



Hinweis: Der konstante Druckmodus wird von KNAUER-Pumpen nicht unterstützt.

	PumpStopRequest=1	[0/1] (0) „stop all“ in einer Zeittabelle stoppt die Pumpen; „stop all“-Schaltfläche im Hauptfenster stoppt die Pumpen sofort (1) „stop all“ in einer Zeittabelle stoppt die Pumpen nicht; „stop all“-Schaltfläche im Hauptfenster stoppt die Pumpen erst nach zusätzlicher Bestätigung
	OnlineMoving=1	[0/1] Das Pumpensystem unterstützt die Online-Gradientenverschiebung.
	Autozero=0	[0/1] Die Pumpenschnittstelle unterstützt einen potentialfreien Schalter für eine UV-Autozero-Funktion.
	MaxPressFactor=1	[0/1] Der maximale Druckwert wird entsprechend dem Druckbereich skaliert.
	PressureChannel=0	[0/1-8] Das Pumpendrucksignal wird über den angegebenen A/D-Wandlerkanal erfasst.
	ParameterChange=0	[0/1] Die Schaltflächen 100% Lösemittel A-D und Flussrate werden während eines Zeitkontrolllaufs aktiviert.
	FlowDimension=ml	[µl/ml/l] Dimension der Pumpenfördermenge (Flussrate).
	IOControl=0	[0/1] Pumpenschnittstelle unterstützt eine Emulation einer Eventbox

	Eintrag		Bedeutung
	SoftwareHPG=0	[1/2/3] [0]	Das Hochdruck-Gradientenpumpensystem wird isokratisch oder als binärer oder ternärer Gradient eingesetzt. Es wird ein LPG-System verwendet.
	SoftwareHPGPort2=	[IP/Port]	Für einen binären Gradienten wird eine freistehende Pumpe verwendet.
	MixingChamber	[µl]	Das Volumen der angeschlossenen Mischkammer
	PreciseMixing	[0/1]	Nur wichtig bei niedrigem Druckgradienten P 6.1L. Nicht von 0 auf 1 wechseln.
	LimitervolumenMinor=0	[0/1]	0 = Limiter-Volumen der Hauptpumpe 1 = Limiter-Volumen der Nebpumpe
	MinorPumpPressure=0	[0/1]	0 = Druck der Hauptpumpe ist dargestellt 1 = Druck der Nebpumpe wird angezeigt Is shown in toolbar.
	LPGType=0	[0/2/3]	0 = P 2.1L auf isokratisch setzen 2 = P 2.1L auf LPG binär setzen 3 = P 2.1L auf ternäres LPG einstellen
	 Hinweis: Nur für P2.1L!		
[Autosampler]	TempPrecision=3	[°C]	Genauigkeit der eingestellten Temperatur
	MaximumSamples=100	[Value]	Maximale Probenkapazität des Autosamplers
	VolumeDimension=µl	[µl]	Dimension des Injektionsvolumens. Ändern Sie diesen Eintrag nicht.
	AS3000=0	[0/1]	Der Autosampler ist ein Labomatic AS 3000.
	VarioPrep=0	[0/1]	Der Autosampler ist ein SCPA VarioPrep.

	Eintrag	Bedeutung
	Alias=0 [0/1]	Der Autosampler ist ein Spark Alias.
	KNAUER 3950=0 [0/1]	Der Autosampler ist ein KNAUER 3950 oder AS 6.1L.
	Wash=0 [0/1]	1= Waschzyklus beginnt beim Start- die Software 0= Waschzyklus nach Start der Soft- ware ist deaktiviert
	TubingVolumen=15 [µl]	Standard-Volumen der Kapillaren (Volumen zwischen Nadel und Ventil)
	FlushVolumen=30 [µl]	Standard-Spülvolumen (2x TubingVolume)
	PrepMode=0 [0/1]	Schalten Sie den PrepMode ein, wenn Sie den präparativen Auto- sampler AS 6.1L mit 10 ml Proben- schleife und 2,5 ml Spritzenvolumen steuern.
	TransportLiquid=1 [0/1]	0= Waschlösung aus Waschflasche 1= Waschlösung aus der Transport- flasche, oder Vial 85, wenn 84+3 gewählt wurde
	TransportVolumen=1 [1-9]	Anzahl der Spritzenfüllungen zum Waschen
[SequenceTable]	MinSample- Position=0 [0 - ...]	Eingabegrenze in Sequenztabelle
	MaxSample- Position=100 [0 - ...]	Eingabegrenze in Sequenztabelle
	MinInjecti- ons=0 [0 - ...]	Eingabegrenze in Sequenztabelle
	MaxInjecti- ons=1 [0 - ...]	Eingabegrenze in Sequenztabelle
	MinVolume=0 [0 - ...]	Eingabegrenze in Sequenztabelle
	MaxVolumen=10000 [0 - ...]	Eingabegrenze in Sequenztabelle

	Eintrag		Bedeutung
	DefaultVolume=100	[0 - ...]	Voreinstellung in Sequenztabelle.
	OLBImport=0	[0 or 1]	Importsequenz aus MassLynx-.olb-Datei ermöglichen
	EnableInit=0	[0 or 1]	Aktiviert ein Dialogfenster beim Start einer Sequenz, das die Initialisierung ermöglicht
	AdditionalFields=0	[0 or 1]	Zusätzliche Textfelder in der Sequenztabelle und im Berichtsausdruck
[Collector]	Cetac=0	[0/1]	Aktiviert die direkte Steuerung des Cetac-Fraktionssammlers
	StepAtWaste=0	[0/1]	Automatischer Fraktionssammler-Schritt beim Umschalten auf Abfall.
	HomeOutput=0	[1-12]	Event Box Ausgang für den „HOME“-Befehl für den Fraktionssammler.
	CollectorArray=0	[0/1]	Serienschaltung mehrerer Fraktionssammler.
	Collectors=0	[2- ...]	Anzahl der Fraktionssammler in der Serie.
	CollectorValve=0	[1- ...]	Nummer des Abfall-/Fraktionsventils, wenn mehrere Sammler in Reihe geschaltet werden.
	Autozero=0	[0/1]	Der Kollektor unterstützt einen potentialfreien Schalter für eine UV-Autozero-Funktion.
[FractionCleaning]	Enabled=0	[0/1]	Automatische Fraktionsreinigung aktiviert/deaktiviert.
	WashTime=2	[Value]	Waschzeit in der Waschstation.
	XOffset=71	[Value]	X-Versatz, um die Koordinate der Fraktion zu erreichen.
	YOffset=-20	[Value]	Y-Versatz zum Erreichen der Koordinate der Fraktion.
	ZOffset=0	[Value]	Z-Versatz, um die Koordinate der Fraktion zu erreichen.
[Aliquotation]	Enabled=0	[0/1]	Automatische Aliquotierung aktiviert/deaktiviert.

	Eintrag		Bedeutung
[Detector]	AutozeroAn- notation=1	[0/1]	Bei jedem Autozero wird eine Annotation in das Chromatogramm geschrieben.
	CheckLampS- tatus=0	[0/1]	0 = Lampenstatus wird nicht überprüft, 1= Lampenstatus wird überwacht
	CheckforLe- ak=1	[0/1]	Lecksensor kann hier aktiviert werden
	Leakage- Message= ...	[Text]	Bitte nicht ändern
[ShimdazuRF20A]	Enabled=1	[0/1]	UV ist deaktiviert/aktiviert
	Port=	[Port]	Portnummer
	Channels=1	[Value]	Anzahl der Kanäle
	Gain=1	[Value]	1=x1, 2=x4, 3=x16
	Sensitivity=0	[Value]	0=Hoch, 1=Mittel, 2=Niedrig
	DataRate=2	[Value]	Datenrate des Detektors
	AnswerT- imeOut=1	[Value]	Nicht ändern
	ConnectionTi- meOut=1	[Value]	Nicht ändern
[KnauerUVD]	Enabled=1	[0/1]	UV ist deaktiviert/aktiviert
	IP=	[IP]	IP-Adresse
	Port=	[Port]	Portnummer
	BaudRa- te=9600	[Wert]	Baudrate
	Wave- length1=254	[Wert]	Voreingestellte Wellenlänge
	DataRate=2	[Wert]	Datenrate des Detektors
	Channels=1	[Wert]	Anzahl der Kanäle

	Eintrag	Bedeutung
	Integrati- on=100	[Wert] Integrationszeit
	OptimiseIT=1	[0/1] Aktivieren/Deaktivieren der Integrationszeitoptimierung
	Type= UVD2.1S	[Typ] Ihr Detektortyp (UVD 2.1S, UVD 2.1L oder MWD 2.1L)
	MaxD2Time=	[0-2000] Überwachung der Lebensdauer der UV-Lampe: 0= aus, 1-2000 = Stunden Wenn der Maximalwert überschritten wird, tritt eine Fehlermeldung auf. Die Arbeit kann jedoch nach Bestätigung der Meldung fortgesetzt werden (siehe Kapitel „Fehlerbehebung“ Seite 104).
[KnauerRID21L]	Enabled=	[0/1] RID ist deaktiviert/aktiviert
	IP=	[IP] IP-Adresse
	Port=	[Port] Portnummer
	DataRate=2	[Value] Datenrate von CM2.1S
	Channels=1/2	[Value] 1=RID-Signal 2=RID-Signal und Temperatur
	Time- Const=2000	[Value] Zeitkonstante
	SignalMode=	[Value] Signal-Modus, 0=+, 1=-
	AnswerT- imeOut=	[Value] Nicht ändern
	ConnectionTi- meOut=	[Value] Nicht ändern
	Temperatu- re=0 /30-55	[Value] 0 = Aus 30-55 = Temperatur wird nach dem Start eingestellt

	Eintrag	Bedeutung
	TempZone=1 [1-8]	1= [Temperatur] FunktionName1=... ... 2= [Temperatur] FunktionName2=... ...
[KnauerDAD61L]	Enabled=1 [0/1]	DAD ist deaktiviert/aktiviert
	IP= [IP]	IP-Adresse
	Port = [Port]	Portnummer
	Integra- tion=100 [Value]	Voreingestellter Wert für die DAD-Integrationszeit.
	OptimiseIT=1 [0/1]	Aktivieren/Deaktivieren der Integrationszeitoptimierung
[DAD]	Enabled=0 [0/1]	Aktiviert die Funktionen des DAD-Programms.
	Diodes= 1024/256 [Value]	Anzahl der Dioden in der Diodenzeile. 256=DAD 2.1L 1024=DAD 6.1L
	ScanStart=200 [Value]	Beginn des DAD-Spektrums.
	ScanEnd=600 [Value]	Ende des DAD-Spektrums.
	Slice- Width=100 [Value]	Voreingestellter Wert für die DAD-Slice Width.
	IntegrationTi- me=100 [Value]	Voreingestellter Wert für die DAD-Integrationszeit.
	Integration- Bandwidth=1 [Value]	Voreingestellter Wert für die DAD-Integrationsbandbreite.
	AutomaticRe- ference=1 [0/1]	Automatisches Referenzspektrum nach dem Start einer Zeittabelle.

	Eintrag		Bedeutung
	Lambert-Beer=1	[Value]	Dieser Wert ist erforderlich. Nicht ändern!
[KnauerIFU21]	Enabled=1	[0/1]	IFU ist deaktiviert/aktiviert
	IP=	[IP]	IP-Adresse (nur für IFU 2.1 LAN)
	Port=	[Port]	Portnummer
	DataRate=2	[Value]	Datenrate der IFU
	Channels=1	[Value]	Anzahl der Kanäle
[KnauerCM21S]	Enabled=1	[0/1]	CM ist deaktiviert/aktiviert
	IP=	[IP]	IP-Adresse
	Port=	[Port]	Portnummer
	DataRate=2	[Value]	Datenrate von CM 2.1S
	Channels=1/2/3	[Value]	Anzahl der Kanäle 1=nur Leitfähigkeit 2=Leitfähigkeit und pH-Wert 3=Leitfähigkeit, pH-Wert und Temperatur
[Smartline2600]	Integration=20	[Value]	Integrationszeit von KNAUER Smartline DAD.
[Calibration]	p0=1.900000 000E+002	[Value]	Kalibrationsfaktor 0 des DAD.
	p1=2.000000 000E+000	[Value]	Kalibrationsfaktor 1 des DAD.
	p2=0.000000 000E+00	[Value]	Kalibrationsfaktor 2 des DAD.
	p3=0.000000 000E+000	[Value]	Kalibrationsfaktor 3 des DAD.
	p4=0.000000 000E+000	[Value]	Kalibrationsfaktor 4 des DAD.

	Eintrag		Bedeutung
[Eventbox]	Pulse-length=0.5	[0.1- ...]	Pulslänge der Ausgänge der Event Box in Sekunden
[SignalInverting]	EventBox=0 Gameport=0	[1-12] [1-4]	Aufgelistete EventBox- oder Gameport-Eingänge werden invertiert.
[Temperature]	FunctionName1=...	[Text]	Benutzerdefinierter Name der Funktion "Temperatur 1".
	FunctionName2=...	[Text]	Benutzerdefinierter Name der Funktion "Temperatur 2".
	Stirrer-Speed=150	[Value]	Drehzahl des Heizungsrührers.
[MultiSystem]	Enabled=0	[0/1]	Mehrmalige Ausführung der Software auf einem Computer. Dies wird von PurityChrom nicht unterstützt.
	DataChannel1=1	[1-8]	Nummer des Datenkanals, der in einem Mehrfachsystem dem ersten System zugeordnet ist.
	DataChannel2=2	[1-8]	Nummer des Datenkanals, der in einem Mehrfachsystem dem zweiten System zugeordnet ist.
	DataChannel3=3	[1-8]	Nummer des Datenkanals, der in einem Mehrfachsystem dem dritten System zugeordnet ist.
	DataChannel4=4	[1-8]	Nummer des Datenkanals, der bei einem Mehrfachsystem dem vierten System zugeordnet ist.
[IntegrationPresets]	IntegrateInhibit=0	[0/ ...]	Datenkanäle, die nicht automatisch integriert werden sollen, sind durch Komma getrennt anzugeben.
	MaxBaselineLevel=250 FilterFactor=5	[...] [5-15]	Voreingestellte Werte für die Integration außerhalb Peakfenster (s. Kapitel 13 auf Seite 76).
	SlopeSensitivity=500	[...]	
	AreaDelay=0	[0/1]	Aktiviert ein Eingabefeld in der Schwellwertprogrammierung, in das eine Verzögerungszeit für die Ausführung eingegeben werden kann.

	Eintrag	Bedeutung
	TailingFactor=0	[0/1] Anstelle der Asymmetrie wird der Tailing-Faktor berechnet.
[SolventSupply]	AnalogA=0	[1-8] Nummer des Kanals, der das Füllstands-signal von Lösungsmittel A aufzeichnet.
	AnalogB=0	[1-8] Nummer des Kanals, der das Füllstands-signal von Lösungsmittel B aufzeichnet.
	AnalogC=0	[1-8] Nummer des Kanals, der das Füllstands-signal von Lösungsmittel C aufzeichnet.
	AnalogD=0	[1-8] Nummer des Kanals, der das Füllstands-signal des Lösungsmittels D aufzeichnet.
	AnalogWaste=0	[1-8] Nummer des Kanals, der das Füllstands-signal des Abfalls aufzeichnet.
	SoundfileWaste=*.wav	[*.wav] Audio-Datei, die automatisch abgespielt wird, wenn der Abfallpegel das obere Maximum erreicht hat.
	SoundfileSolvents=*.wav	[*.wav] Audio-Datei, die automatisch abgespielt wird, wenn ein Lösungsmittel-pegel unter dem Minimum liegt.
[WasteManagement]	ValveNo=1	[1- ...] Nummer des Abfall-/Fraktionsventils bei Verwendung der Abfallwirtschaft.
	BypassValve=0	[1- ...] Nummer des Bypass-Ventils bei Verwendung der Abfallwirtschaft.
	Volume=10000	[...] Volumen von Abfallbehältern bei der Abfallwirtschaft.
	ErrorInput=0	[1- ...] Nummer des Event Box-Eingangs für ein Fehlersignal.
	Soundfile=Fehler.wav	[*.wav] Audio-Datei, die beim Auftreten eines Fehlers automatisch abgespielt wird.

	Eintrag		Bedeutung
[LeakageInput]	LeakageInput=0	[1-12]	Event Box-Eingang für Leckagesensoren. 3 = Leckagesensor der Hauptpumpe, wenn P 6.1L oder P 2.1L 7= Leckagesensor der Nebpumpe, wenn P 6.1L oder P 2.1L
	LeakageCountdown=120	[0- ...]	Countdown in Sekunden, bis das System nach der Entdeckung eines Lecks gestoppt wird.
	Soundfile=Fehler.wav	[*.wav]	Audio-Datei, die automatisch abgespielt wird, wenn ein Leck entdeckt wurde.
	WindowsShutdown=0	[0/1]	Aktivieren/Deaktivieren des Schließens von Fenstern
	EluentValveA=2	[1- ...]	Ventilnummer zum Abdichten des Eluenten A.
	EluentValveB=3	[1- ...]	Ventilnummer zum Abdichten des Eluenten B.
	EluentValveC=4	[1- ...]	Ventilnummer zum Abdichten des Eluenten C.
	EluentValveD=5	[1- ...]	Ventilnummer zum Abdichten des Eluenten D.
[LeakageKnauerASM]	Enabled=0	[0/1]	Leckagesensor eines ASM kann aktiviert werden.
	IP=	[IP]	IP-Adresse vom ASM
	Port=	[Port]	Portnummer für den gesamten ASM.
		Hinweis: Es kann nur ein ASM-Lecksensor eingebaut werden, bitte stellen Sie sicher, dass es sich um das unterste Gerät im AZURA-Turm handelt.	
[KnauerASM21L]	Enabled=1	[0/1]	Aktivieren/Deaktivieren vom Fehlermanagement des ASM
	IP=	[IP]	IP-Adresse des ASM
	Port=	[Port]	Portnummer des ASM

	Eintrag		Bedeutung
[DemoMode]	Chromatogram=* .rfp	[*.rfp]	Ergebnisdatei für ein simuliertes Chromatogrammsignal im Demo-Modus.
[Visualisation]	ValvePartitioning=0	[1- ...]	Nummer des Fraktionsventils, das in horizontale Segmente unterteilt werden soll. Ein Doppelklick auf ein Segment schaltet das Ventil auf die passende Positionsnummer statt auf die nächste Position.
[TandemValve]	Index=0	[1- ...]	Nummer des Tandemventils
	SecondWinsockPort=1	[1- ...]	Nummer des Winsock-Anschlusses des 2. Ventils
	PositionRequest=0	[0/1]	Bevor die Zeittabelle gestartet wird, wird der Benutzer nach einer Ventilstellung gefragt
[Recycling]	Solvent=A	[A/B/C/D]	Zum Recycling verwendetes Lösungsmittel
	ValveIndex=0	[1- ...]	Nummer des Recycling-Ventils
	ValvePosition=2	[0/1]	Ventilposition für das Recycling
[SedexLC]	Enabled=0	[0/1]	SedexLC ist deaktiviert/aktiviert
	Port=2	[Value]	Port-Nummer
	TempZone=1	[Value]	TempZone=1 [1-8] 1= [Temperatur] FunktionName1=... ... 2= [Temperatur] FunktionName2=... ...
[PressureSensor]	Enabled=0	[0/1]	Aktiviert externen Drucksensor über LAN
	IP=192.168.1.126	[IP]	IP-Adresse des ersten externen Drucksensors

	Eintrag	Bedeutung
	Port=10001 [Value]	Portnummer des ersten externen Drucksensors
	IP2=192.168.1.127 [IP]	IP-Adresse des zweiten externen Drucksensors
	Port2=10001 [Value]	Portnummer des zweiten externen Drucksensors
	Channels=0 [Value]	Anzahl der Kanäle der externen Drucksensoren
[Memmert]	Enabled= [0/1]	Der UN-55-Ofen ist deaktiviert/aktiviert.
	IP= [IP]	IP-Adresse
	Tmax= [Value]	Max. Temperatur
[Microsaic]	Enabled= [0/1]	MS-Detektion aktivieren/inaktivieren.
	IP= [IP]	IP-Adresse
	Factor= [Value]	Faktor, der mit der Anzahl der counts multipliziert wird
	StopScan= [0/1]	Am Ende der Zeittabelle wird der MS-Scan angehalten oder fortgesetzt
	Logfile= [0/1]	Es wird eine konstante Logdatei für den 4000 MiD erstellt.

23.2 PurityChromfile-Typen

- *.tcf - PurityChrom-Zeittabellen-Steuerdatei.
- *.acf - PurityChrom-Probengebertabellen-Datei.
- *.rfp - PurityChrom-Ergebnisdatei. Enthält die Ergebnisdaten eines Laufs.
- *.dad - PurityChrom-DAD-Datei. Enthält die Spektren eines DAD-Laufs.
- *.rck - PurityChrom-Fraktionssammler-Rackdatei. Enthält die geometrischen Daten eines Fraktionssammlergestells (Racks).
- *.vis - PurityChrom-Visualisierungsdatei. Enthält die Darstellung einer Anlage.
- *.cfg - PurityChrom-Konfigurationsdatei. Enthält die Grundeinstellungen des Programms.

23.3 Kombination von Autosampler Tray-Typen

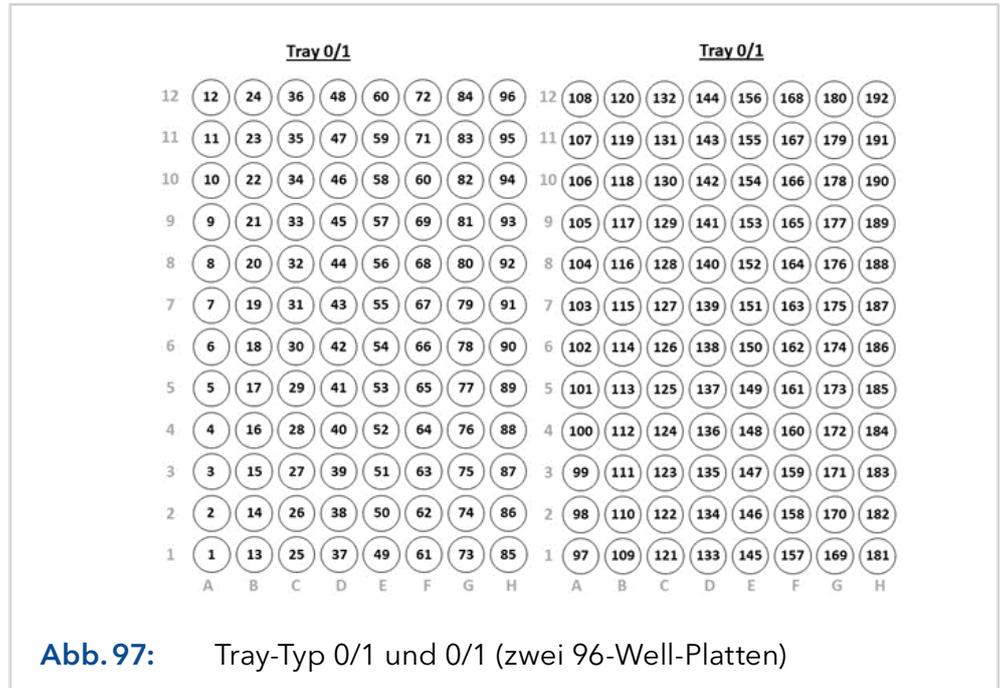


Abb. 97: Tray-Typ 0/1 und 0/1 (zwei 96-Well-Platten)

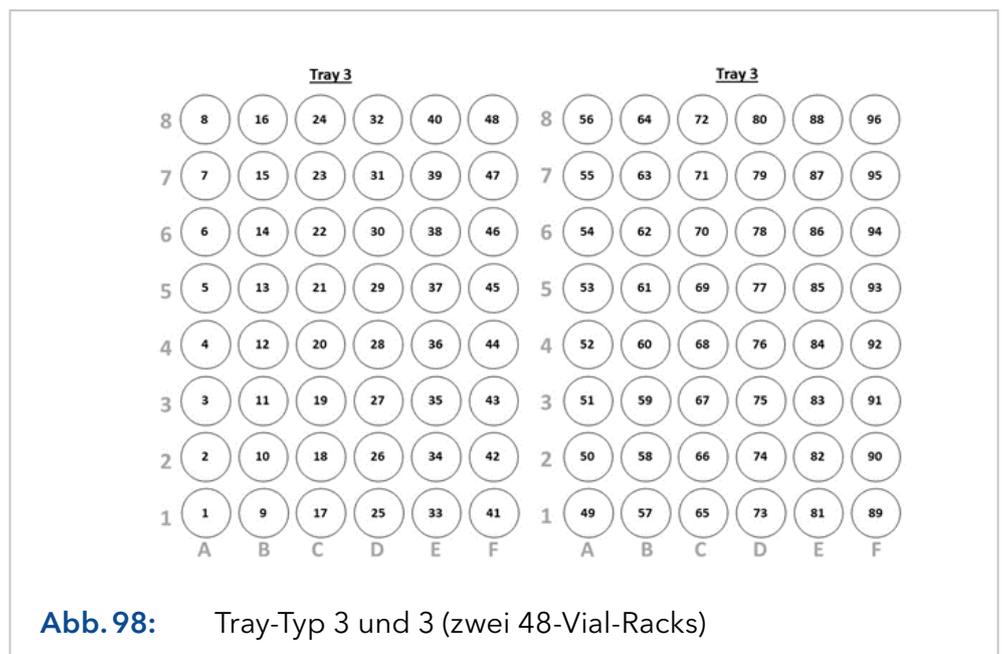


Abb. 98: Tray-Typ 3 und 3 (zwei 48-Vial-Racks)

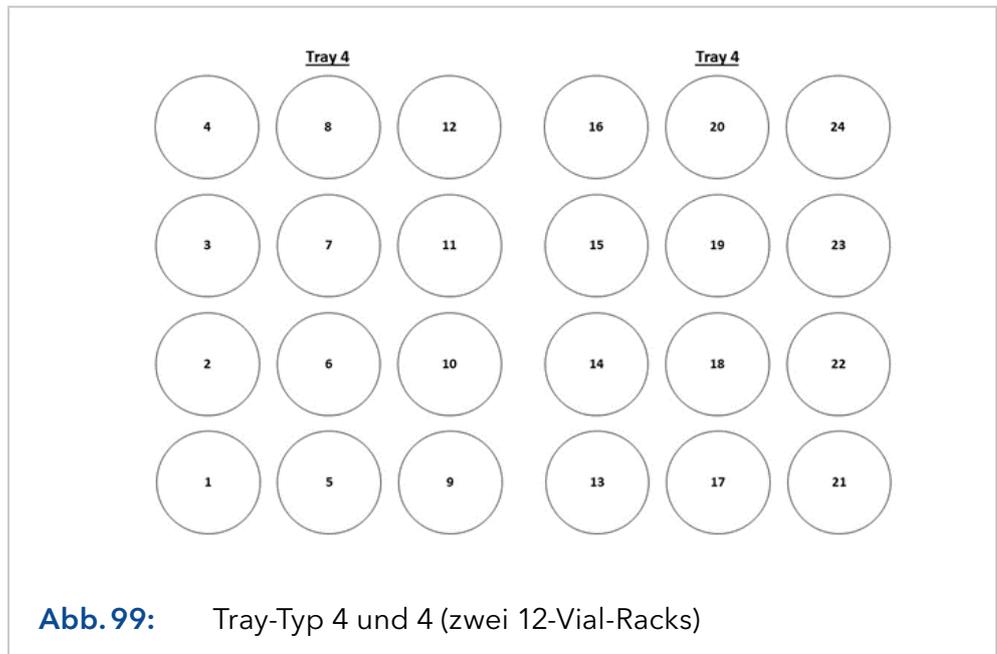


Abb. 99: Tray-Typ 4 und 4 (zwei 12-Vial-Racks)

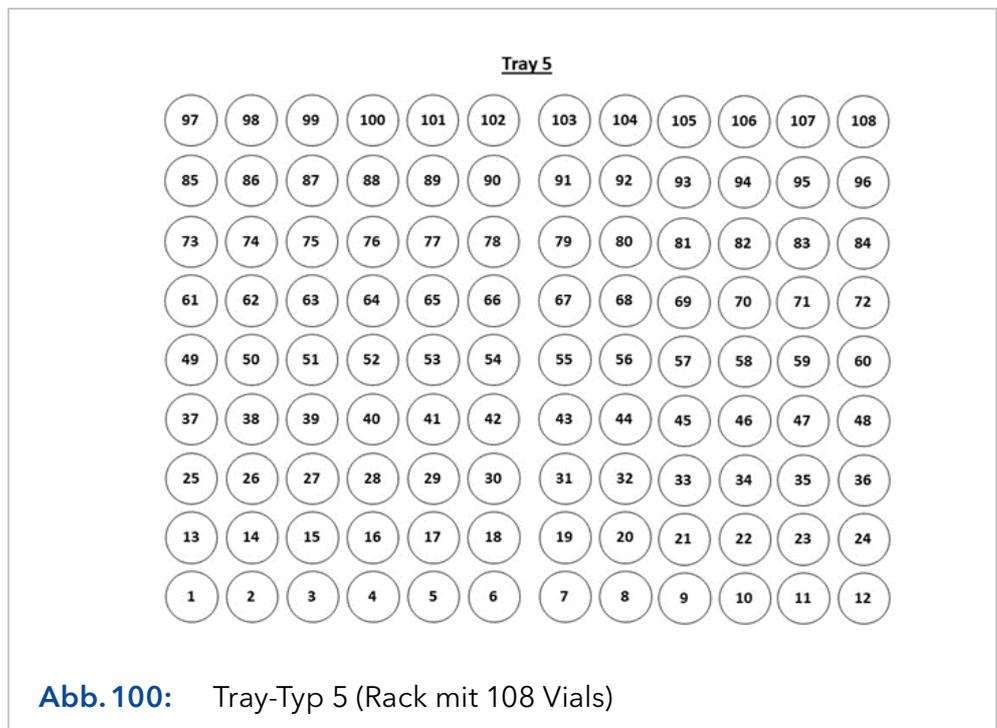


Abb. 100: Tray-Typ 5 (Rack mit 108 Vials)

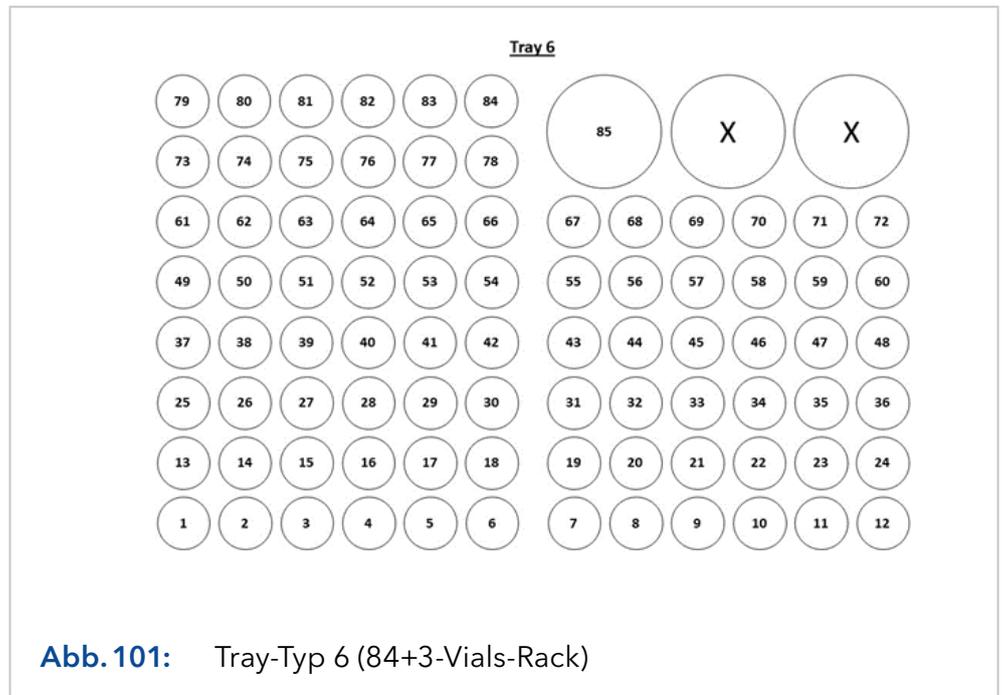


Abb. 101: Tray-Typ 6 (84+3-Vials-Rack)

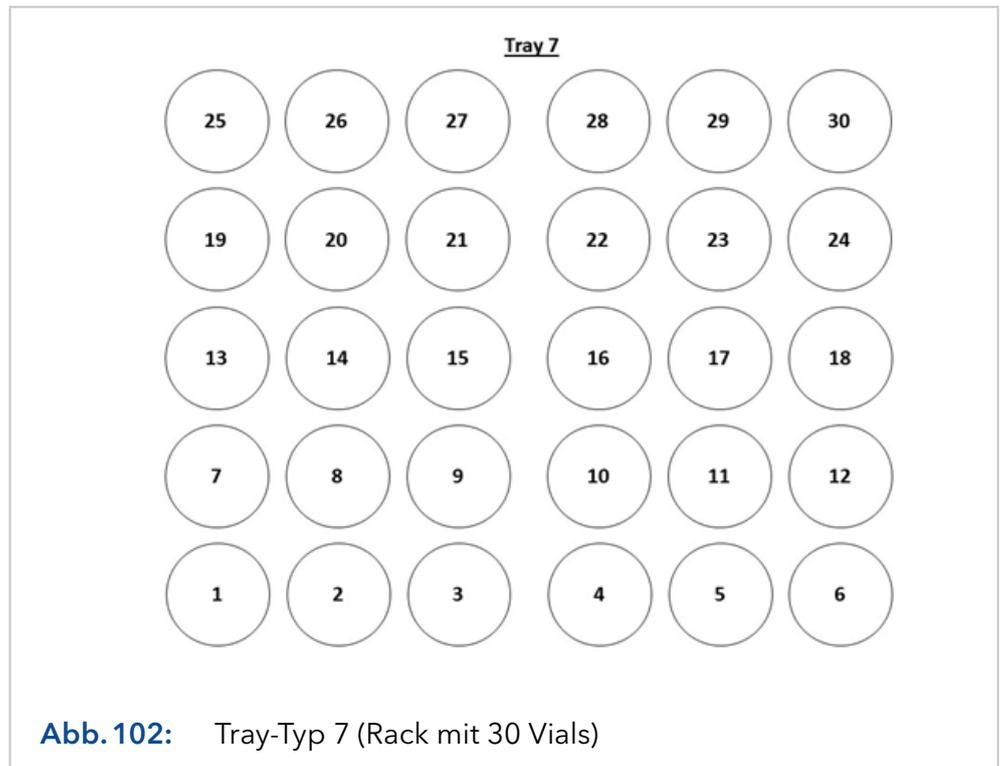
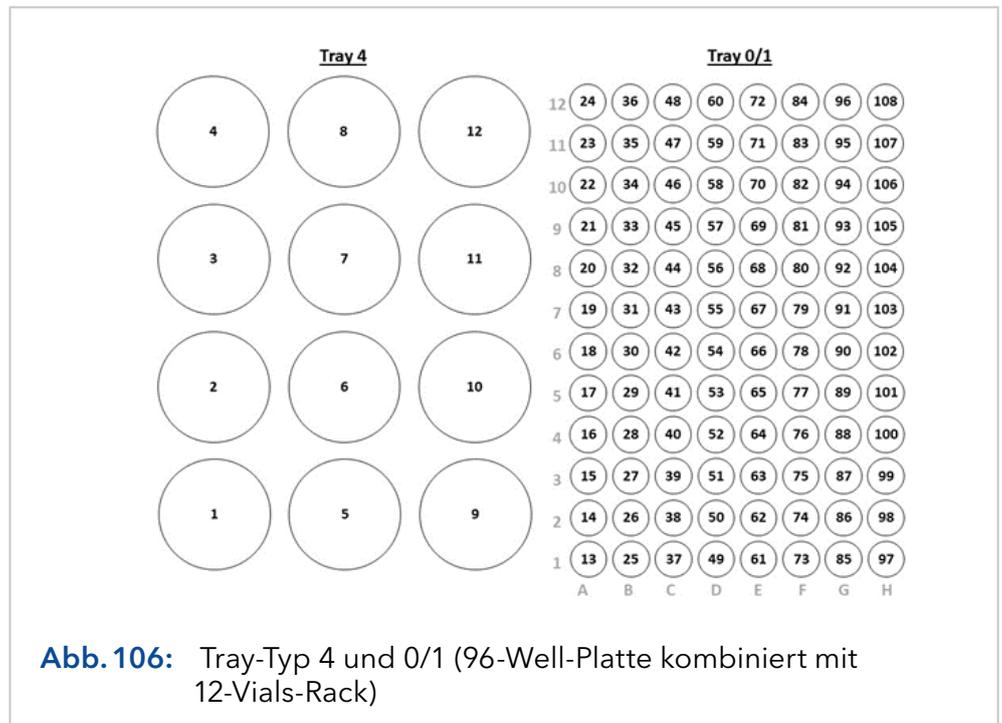
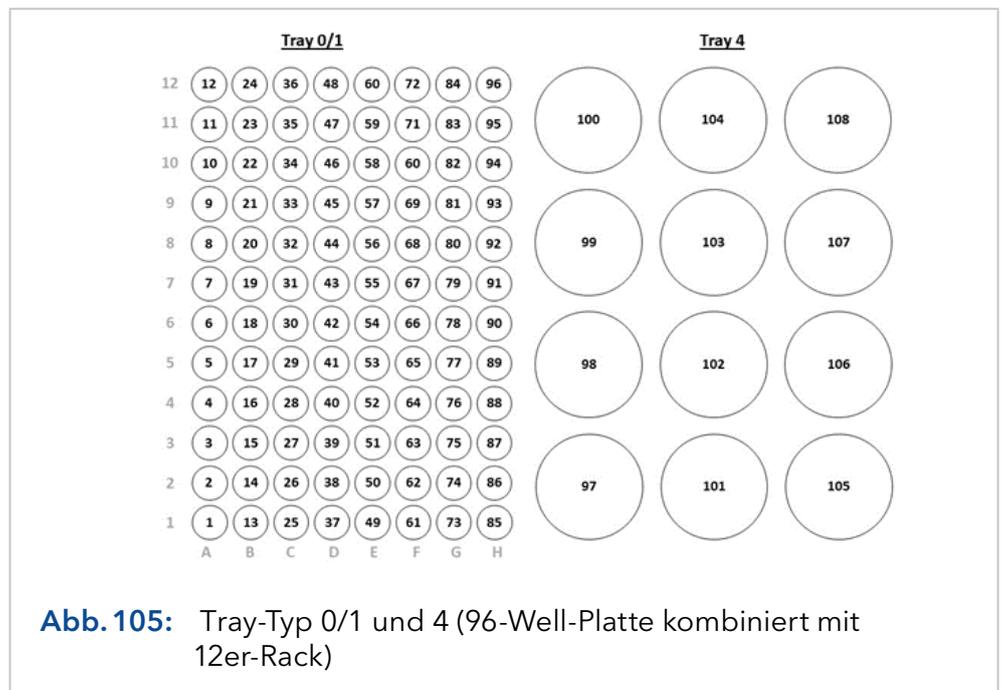
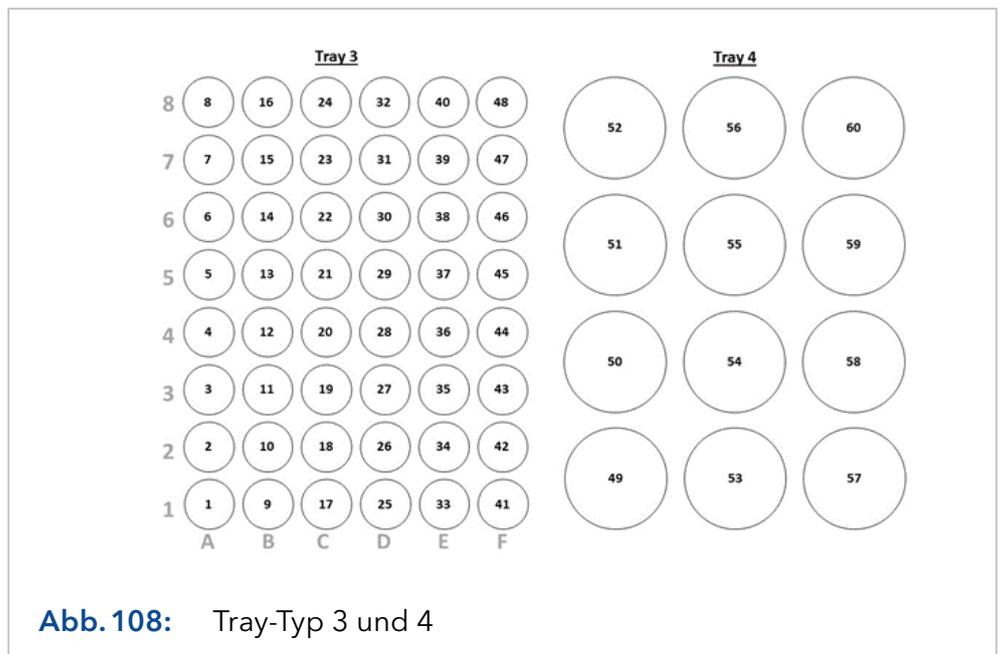
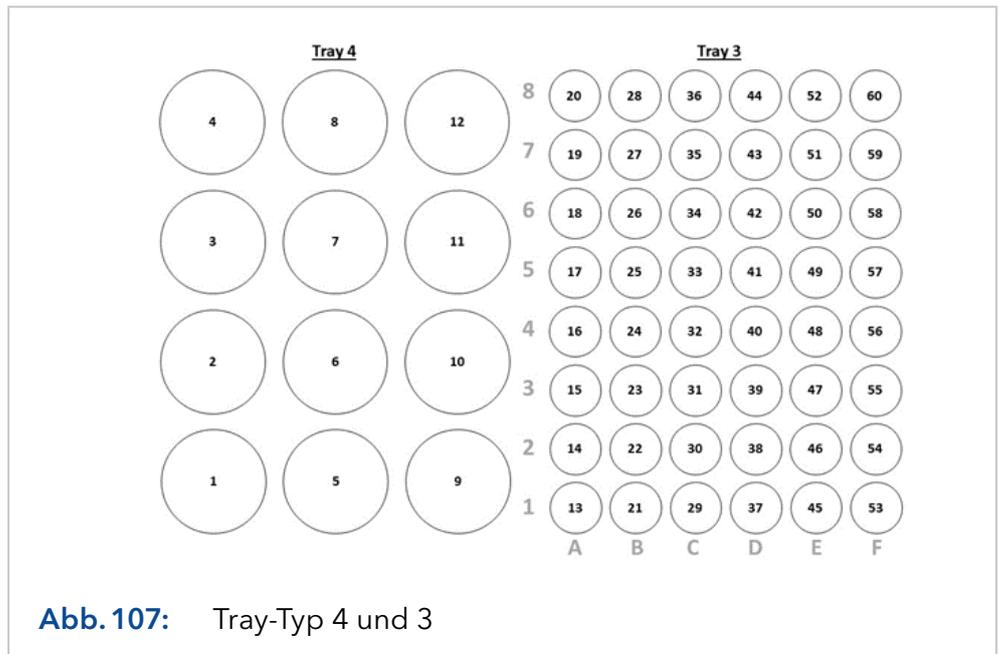


Abb. 102: Tray-Typ 7 (Rack mit 30 Vials)





Science Together



Aktuelle KNAUER Betriebsanleitungen online:
www.knauer.net/bibliothek

KNAUER
Wissenschaftliche Geräte GmbH
Hegauer Weg 38
14163 Berlin

Phone: +49 30 809727-0
Fax: +49 30 8015010
E-Mail: info@knauer.net
Internet: www.knauer.net