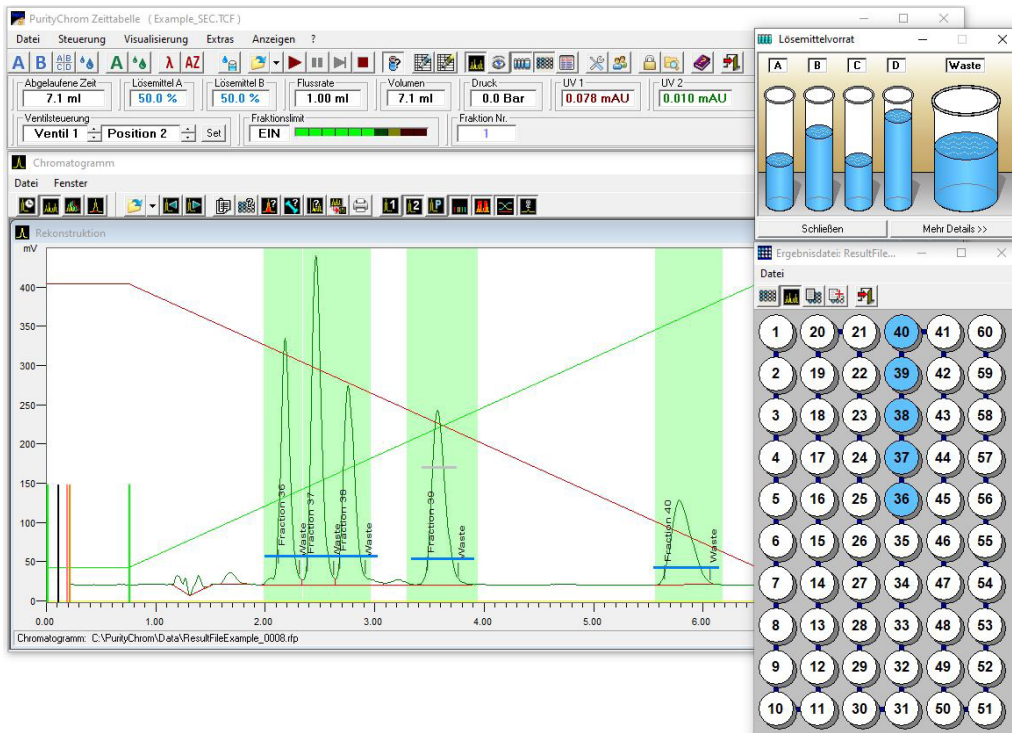


# PurityChrom® & PurityChrom® MCC Plus Software Anleitung



# SOFTWARE

Dokument Nr. V2650



**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

E-Mail: [support@knauer.net](mailto:support@knauer.net)

**Ansprechpartner weltweit:**

Bitte kontaktieren Sie Ihren lokalen KNAUER Partner:

[www.knauer.net/de/Support/Handler-weltweit](http://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](http://www.knauer.net)

E-Mail: [info@knauer.net](mailto:info@knauer.net)

**Versionsinformation:**

Dokument Nummer: V2650

Versionsnummer: 6.1

Datum der Veröffentlichung: 13.02.2023

Originalausgabe

Technische Änderungen vorbehalten.

Die aktuellste Version der Betriebsanleitung finden Sie auf unserer Homepage: [www.knauer.net/bibliothek](http://www.knauer.net/bibliothek).



**Copyright:**

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

© KNAUER Wissenschaftliche Geräte GmbH 2023

Alle Rechte vorbehalten.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Installation</b> .....	<b>1</b>
1.1 PC-Anforderungen .....	1
1.2 Auswahl der Sprache .....	1
1.3 Installation und Benutzung unter Windows.....	1
1.4 Energiesparende Funktionen .....	2
<b>2. Hauptfenster</b> .....	<b>3</b>
2.1 Allgemein .....	3
2.2 Funktionstasten .....	4
2.3 Anzeigen .....	9
<b>3. Programm-Einstellungen (Setup)</b> .....	<b>12</b>
3.1 Kommunikation .....	12
3.2 Voreinstellungen .....	14
3.2.1 Voreinstellungen unter PurityChrom® .....	14
3.2.2 Voreinstellungen unter PurityChrom® MCC Plus .....	15
3.3 Fraktionsbegrenzer (Limiter) .....	16
3.4 Beschriftung .....	17
3.5 Beschreibungen .....	18
3.6 Benutzerdefinierter Kanal .....	19
3.7 Totzeit/Totvolumen .....	20
3.8 Ventileinschränkungen .....	21
3.9 Alarmausgänge .....	22
3.10 Programmfarben .....	23
<b>4. Benutzerverwaltung</b> .....	<b>24</b>
4.1 Allgemein .....	24
4.2 Arbeiten ohne Benutzerverwaltung .....	24
4.3 So aktivieren Sie die Benutzerverwaltung .....	24
4.4 Hinzufügen eines Benutzers .....	25
4.5 Zurücksetzen eines Passworts .....	26
4.6 Gescheiterte Versuche zurücksetzen .....	27
4.7 Anmeldung für Benutzer .....	27

---

4.8	Gesperrtes Konto . . . . .	28
4.9	Drucken der Benutzerverwaltung . . . . .	28
4.10	Funktionsschaltflächen im Audit-Trail-Fenster . . . . .	28
<b>5.</b>	<b>Erstellen von Zeittabellen . . . . .</b>	<b>29</b>
5.1	Allgemein . . . . .	29
5.2	Erstellen von Zeittabellen in PurityChrom® . . . . .	32
5.2.1	Speichern allgemeiner Informationen . . . . .	32
5.2.2	Erstellung einer Checkliste . . . . .	33
5.2.3	Variablen in Zeittabellen . . . . .	34
5.2.4	Optionen . . . . .	35
5.2.5	Optionen für den Ausdruck . . . . .	36
5.2.6	Einstellungen für Diodenarray-Detektoren (DAD) . . . . .	37
5.2.7	Funktionen der Zeittabelle . . . . .	38
5.3	Erstellen von Zeittabellen in PurityChrom® MCC Plus . . . . .	42
5.3.1	Speichern allgemeiner Informationen . . . . .	42
5.3.2	Erstellung einer Checkliste . . . . .	43
5.3.3	Variablen in Zeittabellen . . . . .	44
5.3.4	Optionen . . . . .	45
5.3.5	Optionen für den Ausdruck . . . . .	46
5.3.6	Einstellungen für Diodenarraydetektoren . . . . .	47
5.3.7	Funktionen der Zeittabelle . . . . .	47
5.4	Verwendung der AZURA®-Pumpe P 6.1L (Version mit Hochdruckgradient) in PurityChrom® . . . . .	51
5.5	Fraktionierung mit einem Fraktionssammler . . . . .	51
5.6	Fraktionieren mit einem Multipositionsventil . . . . .	51
5.7	Programmieren von Schwellwerten . . . . .	54
5.8	Schwellwert Programmierung mit logischen Verknüpfungen . . . . .	57
5.9	Programmierung der Peakabtastung . . . . .	59
5.10	Grafischer Editor für eine Zeittabelle . . . . .	63
<b>6.</b>	<b>Erstellen von Sequenztabellen . . . . .</b>	<b>66</b>
6.1	Allgemein . . . . .	66
6.2	Erstellen einer Sequenztafel . . . . .	66
6.3	Ausführung einer Sequenztafel . . . . .	68

---

<b>7. Erstellen von Probengebertabellen</b> .....	<b>69</b>
7.1 Allgemein .....	69
7.2 Erstellen einer Probengebertabelle .....	72
7.3 Gestapelte Injektion (Stacked Injection) .....	75
7.4 Erstellen einer Probenbezeichnungstabelle .....	77
<b>8. Visualisierung der Ablauftabelle</b> .....	<b>78</b>
8.1 Visualisierung der Ablauftabelle in PurityChrom® .....	78
8.2 Visualisierung der Ablauftabelle in PurityChrom® MCC Plus .....	79
<b>9. Datenaufzeichnung (Analyse)</b> .....	<b>80</b>
9.1 Allgemein .....	80
9.2 Datenaufnahme in PurityChrom® .....	80
9.2.1 Statusleiste .....	83
9.3 Datenaufzeichnung in PurityChrom® MCC Plus .....	84
9.3.1 Statusleiste .....	86
9.4 Datenkanal-Einstellungen in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus .....	87
<b>10. Rekonstruktion von Chromatogrammen in PurityChrom® and PurityChrom® MCC Plus</b> .....	<b>89</b>
10.1 Allgemein .....	89
10.2 Funktionstasten .....	90
10.3 Rekonstruktion von DAD Spectra unter PurityChrom® .....	93
<b>11. Vergleich von Chromatogrammen in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus</b> .....	<b>94</b>
11.1 Allgemein .....	94
11.2 Funktionstasten .....	95
<b>12. Reintegration von Chromatogrammen in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus</b> .....	<b>97</b>
12.1 Allgemein .....	97
12.2 Funktionstasten .....	98
<b>13. Systemvisualisierung in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus</b> .....	<b>101</b>
13.1 Allgemein .....	101
13.2 Funktionen zur Systemvisualisierung .....	102
13.3 Erstellen einer Systemvisualisierung .....	102

---

<b>14. Anzeige des Lösemittelvorrates in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus</b> .....	<b>105</b>
14.1 Allgemein .....	105
14.2 Visualisierung der Lösemittelzufuhr .....	105
14.3 Einstellungen für die Anzeige der Lösungsmittelzufuhr .....	106
<b>15. Abfallverwaltung in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus</b> .....	<b>108</b>
15.1 Allgemein .....	108
15.2 Anzeigen .....	108
15.3 Wie man die Abfallverwaltung nutzt .....	109
<b>16. Fraktionsrack in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus</b> .....	<b>110</b>
16.1 Allgemein .....	110
16.2 Funktionen des Fraktionsrack-Fensters .....	111
16.3 Fraktionstabelle .....	112
16.4 Einrichtung des Fraktionsracks .....	113
<b>17. EventBox in PurityChrom® und PurityChrom MCC Plus</b> .....	<b>116</b>
17.1 General .....	116
17.2 Konfiguration der EventBox Signale in PurityChrom® .....	117
17.3 Konfiguration der EventBox Signale in PurityChrom® MCC Plus .....	119
<b>18. Einrichtung spezieller Geräte in PurityChrom®</b> .....	<b>121</b>
18.1 RID 2.1L Einrichtung .....	121
18.2 Massenspektrometer 4000 MiD .....	122
18.2.1 Allgemein .....	122
18.2.2 Steuerung des 4000 MiD / MIDAS-Spektrometers in PurityChrom® .....	123
Status-Anzeigen .....	125
18.2.3 4000 MiD / MIDAS Einrichtung in PurityChrom® .....	126
Midas-Einrichtung .....	126
Einrichtung des Spektrometers .....	126
Massenspektrometer-Parameter in der Zeittabelle .....	127
18.3 Steuerung von Heizgeräten .....	128
18.3.1 CT 2.1 .....	128
18.3.2 Memmert UN 55-Ofen .....	128
18.4 LH 2.1 in PurityChrom® einbinden .....	129
18.4.1 Default IP Adressen und .ini Einträge .....	129
18.4.2 PurityChrom® konfigurieren .....	129
18.4.3 EventBox-Ein- & Ausgänge in PurityChrom® .....	131
18.4.4 Steuerung des LH 2.1 in der PurityChrom® .....	131

---

18.5	AZURA® SMB-Systeme .....	132
18.5.1	Allgemein .....	132
18.5.2	Konfiguration .....	132
18.5.3	Erstellen von Zeittabellen.....	133
18.5.4	SMB-Parameters.....	134
18.5.5	SMB Operating Point Calculator ( SMB Betriebspunkt Kalkulator) .....	134
18.5.6	Visualisierung.....	137
<b>19.</b>	<b>Einrichtung spezieller Geräte in PurityChrom® MCC Plus.....</b>	<b>139</b>
19.1	Erweiterte Funktionalitäten für Durchflussmesser unter PurityChrom® MCC Plus .....	139
<b>20.</b>	<b>Fehlerbehebung .....</b>	<b>140</b>
20.1	Fehlermeldung Lampenlebensdauer.....	140
20.2	Kommunikationsfehler „Interface sends an error“ .....	141
20.3	Fehlermeldungen infolge der Installation von PurityChrom® .....	142
<b>21.</b>	<b>Appendix.....</b>	<b>144</b>
21.1	PurityChrom®: Die Einträge in der Datei PurityChrom.ini.....	144
21.2	PurityChrom® MCC Plus: Die Einträge in der Datei PurityChrom.ini.....	159
21.3	PurityChromfile-Typen.....	173
21.4	Kombination von Autosampler Tray-Typen .....	174

# 1. Installation

## 1.1 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

## 1.2 Auswahl der Sprache

Alle Versionen der PurityChrom® sind in Englisch und Deutsch erhältlich. Einige Fehlermeldungen und Benachrichtigungen können unabhängig von der Sprachauswahl in Englisch angezeigt werden.

## 1.3 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.

## 1.4 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.

## 2. Hauptfenster

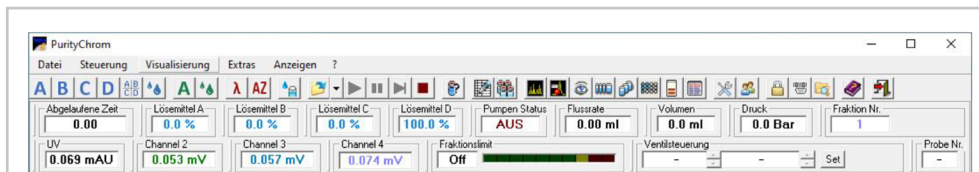


Abb. 1: Hauptfenster

### 2.1 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.

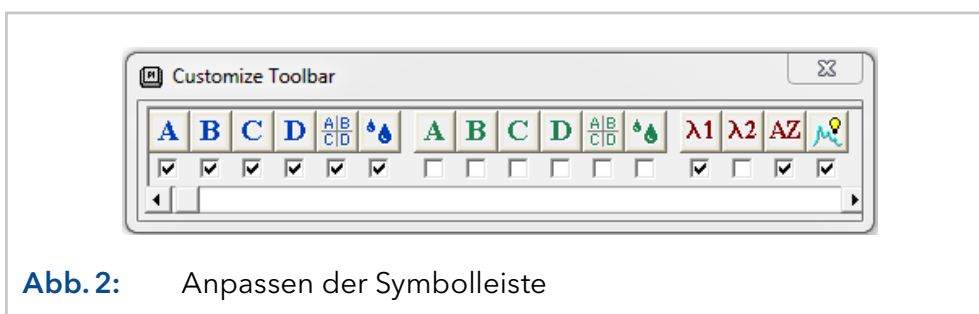


Abb. 2: Anpassen der Symbolleiste

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.

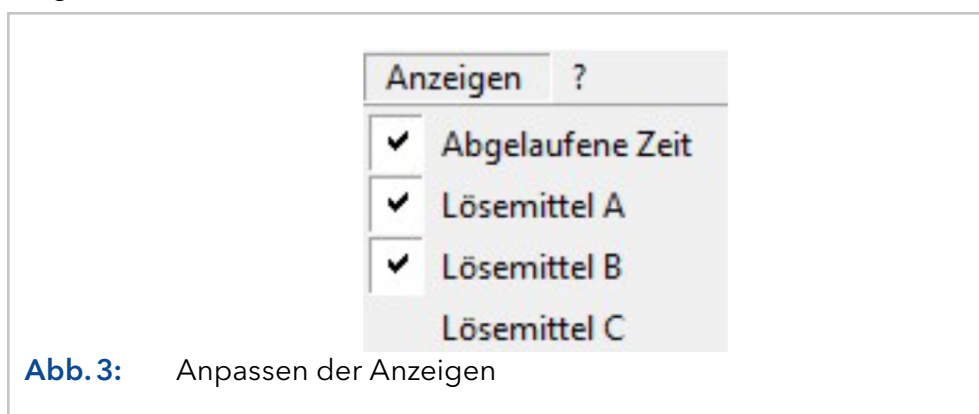
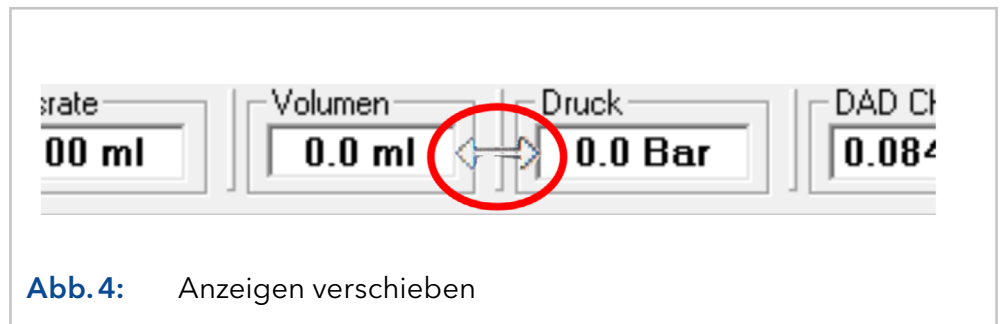


Abb. 3: Anpassen der Anzeigen

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 Farbdialog können Sie eine neue Farbe wählen.



















**Abb. 4:** 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.













## 2.2 Funktionstasten

Taste	Funktion
	<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 (siehe Kapitel „5.2.6 Einstellungen für Diodenarray-Detektoren (DAD)“ auf Seite 37) oder in der Chromatogrammansicht (Analysefenster) wählen.
	<i>AUTOZERO</i> (Nullabgleich) bringt einen seriell gesteuerten Detektor auf Null zurück.  <b>Hinweis:</b> 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>TEMPERATUREINSTELLUNG</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.





Taste	Funktion
	<p><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.</p>
	<p><i>ZEITABELLE/PROBENGEBERTABELLE STARTEN</i> startet die geladene Zeittabelle oder Autosampler-Kontrolldatei. Wurde die Funktion <i>ZEITABELLE/AUTOSAMPLER-KONTROLLDATEI HALTEN</i> zuerst ausgeführt, wird der Lauf fortgesetzt.</p>
	<p><i>ZEITABELLE ODER PROBENGEBERTABELLE ANHALTEN</i> hält den Zeitablauf einer Zeittabelle oder Probengebertabelle 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.</p>
	<p><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.</p>
	<p><i>ALLES STOPPEN</i> stoppt die Pumpen und die Zeittabelle. Es ist nicht möglich, den Lauf an dem Punkt fortzusetzen, an dem er gestoppt wurde.</p>
	<p>Mit <i>MANUELLE PROBENBEZEICHNUNG</i> können Sie beim Start einer Zeittabelle eine Probenkennung eingeben. Diese Option ist bei der Ausführung einer Probengebertabelle nicht möglich, da die Probenbezeichnung aus der zugehörigen Probenabentabelle-Datei abgeleitet wird.</p>
	<p><i>ZEITABELLEN ERSTELLEN/BEARBEITEN</i> öffnet den Zeittabelleneditor zum Erstellen oder Bearbeiten einer Zeittabelle.</p>
	<p><i>SEQUENZTABELLE ERSTELLEN/BEARBEITEN</i> öffnet und steuert die Sequenztafel.</p>





Taste	Funktion
	<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.
	<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. Nach Eingabe des Benutzerkennworts wird das Programm entsperrt.
	<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.

Tasten für  
FPLC-Systeme unter  
PurityChrom®:



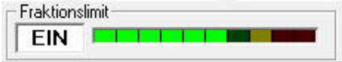

Taste	Funktion
	<i>100% LÖSEMITTEL A HAUPTPUMPE</i> startet das Hauptpumpensystem mit 100% Eluent A und der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>100% LÖSEMITTEL B HAUPTPUMPE</i> startet das Hauptpumpensystem mit 100% Eluent B und der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>100% LÖSEMITTEL C HAUPTPUMPE</i> 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 Nebenspumpensystem mit 100% Eluent A und der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>100% LÖSEMITTEL B NEBENPUMPE</i> startet das Nebenspumpensystem mit 100% Eluent B und der aktuell eingestellten Flussrate.
	<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.

**Tasten für komplexe, präparative Aufbereitungssysteme unter PurityChrom® MCC Plus:**

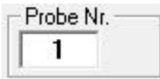
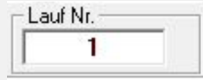


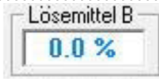
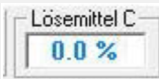






Taste	Funktion
	<i>STARTE PUMPE 1</i> startet die Pumpe 1 mit der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>FLUSSRATE PUMPE 1</i> öffnet ein Fenster zur Anzeige der Durchflussmenge. Eine Änderung der Flussrate schaltet die Pumpen nicht ein, wirkt sich aber sofort aus, wenn die Pumpe 1 bereits in Betrieb ist.
	<i>STARTE PUMPE 2</i> startet die Pumpe 2 mit der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>FLUSSRATE PUMPE 2</i> öffnet ein Fenster zur Anzeige der Durchflussmenge. Eine Änderung der Flussrate startet die Pumpen nicht, wirkt sich jedoch sofort aus, wenn Pumpe 2 bereits läuft.
	<i>STARTE PUMPE 3</i> startet die Pumpe 3 mit der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>FLUSSRATE PUMPE 3</i> öffnet ein Fenster zur Anzeige der Durchflussmenge. Eine Änderung der Flussrate startet die Pumpen nicht, wird jedoch sofort wirksam, wenn Pumpe 3 bereits läuft.
	<i>STARTE PUMPE 4</i> startet die Pumpe 4 mit der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>FLUSSRATE PUMPE 4</i> öffnet ein Fenster zur Anzeige der Durchflussmenge. Eine Änderung der Flussrate startet die Pumpen nicht, wirkt sich jedoch sofort aus, wenn Pumpe 4 bereits läuft.
	<i>STARTE PUMPE 5</i> startet die Pumpe 5 mit der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>FLUSSRATE PUMP 5</i> öffnet ein Fenster zur Anzeige der Durchflussmenge. Eine Änderung der Durchflussmenge startet die Pumpen nicht, wird jedoch sofort wirksam, wenn Pumpe 5 bereits läuft.
	<i>STARTE PUMPE 6</i> startet die Pumpe 6 mit der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>FLUSSRATE PUMPE 6</i> öffnet ein Fenster zur Anzeige der Durchflussmenge. Eine Änderung der Durchflussmenge startet die Pumpen nicht, wirkt sich jedoch sofort aus, wenn Pumpe 6 bereits läuft.
	<i>STARTE PUMPE 7</i> startet die Pumpe 7 mit der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>FLUSSRATE PUMPE 7</i> öffnet ein Fenster zur Anzeige der Durchflussmenge. Eine Änderung der Durchflussmenge startet die Pumpen nicht, wird jedoch sofort wirksam, wenn Pumpe 7 bereits läuft.

Taste	Funktion
	<i>STARTE PUMPE 8</i> startet die Pumpe 8 mit der aktuell eingestellten Flussrate.
	<i>FLUSSRATE PUMPE 8</i> öffnet ein Fenster zur Anzeige der Durchflussmenge. Eine Änderung der Durchflussmenge startet die Pumpen nicht, wird jedoch sofort wirksam, wenn Pumpe 8 bereits läuft.
	<i>SMB PARAMETER</i> öffnet das Fenster für die Einstellungen der Single Moving Bed Chromatography.
	<i>SWITCH</i> ändert die Ventilschaltung der SMB, sodass die Säulen eine Position weiter geschaltet werden.


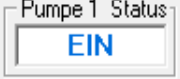
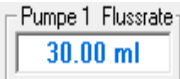
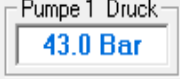
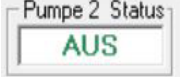
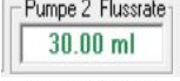

## 2.3 Anzeigen

Anzeige	Bedeutung
	<i>ABGELAUFENE ZEIT/ ABGELAUFENES (SÄULEN-)VOLUMEN</i> zeigt die verstrichene Zeit oder das verstrichene Volumen in einer Zeittabelle an. Wenn sich die Zeittabelle auf <i>HALTEN</i> 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> .
	<i>FRAKTION NR.</i> zeigt die aktuelle Position des Fraktionssammlers an.
	<i>FRAKTIONSLIMIT</i> zeigt den Status des Fraktionsbegrenzers an. <i>AUS</i> = Limiter ist inaktiv, <i>EIN</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.
	<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> .




Anzeige	Bedeutung	
	<i>PROBE NR.</i> gibt die aktuelle Vialnummer der aktuellen Autosampler-Injektion an.	
	<i>LAUF NR.</i> zeigt die Nummer des aktuellen Laufs an.	
	<i>CHANNEL 1 - CHANNEL ...</i> zeigen die Werte des an jedem Analogeingang 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.	
<b>Anzeigen für FPLC-Systeme unter PurityChrom®:</b>		<i>LÖSEMITTEL A</i> zeigt den aktuellen Prozentsatz des gepumpten Eluenten A an.
		<i>LÖSEMITTEL B</i> zeigt den aktuellen Prozentsatz des gepumpten Eluenten B an.
		<i>LÖSEMITTEL C</i> zeigt den aktuellen Prozentsatz des gepumpten Eluenten C an.
		<i>LÖSEMITTEL D</i> zeigt den aktuellen Prozentsatz des gepumpten Eluenten D an.
	<i>PUMPENSTATUS</i> zeigt den aktuellen Pumpenstatus an. <ul style="list-style-type: none"> <li>■ <i>EIN</i> = Pumpe läuft.</li> <li>■ <i>AUS</i> = Pumpe wurde angehalten.</li> <li>■ <i>OVER</i> = Pumpe wurde angehalten, da der Druck zu hoch ist.</li> <li>■ <i>UNDER</i> = Pumpe wurde angehalten, da der Druck zu niedrig ist.</li> </ul>	
	<i>FLUSSRATE</i> zeigt die aktuelle Flussrate der Hauptpumpe an.	
	<i>VOLUMEN</i> gibt das seit Beginn des Pumpens geförderte Volumen an. Wenn die Pumpe gestoppt wird, kehrt die Volumenanzeige auf 0 zurück. Je nach gefördertem Volumen wechselt die Anzeigeeinheit automatisch von µl über ml auf l.	
	<i>FLUSSRATE NEBENPUMPE</i> zeigt die aktuelle Flussrate der Nebenpumpe an.	
	<i>DRUCK NEBENPUMPE</i> gibt den aktuellen Druck der Nebenpumpe an.	

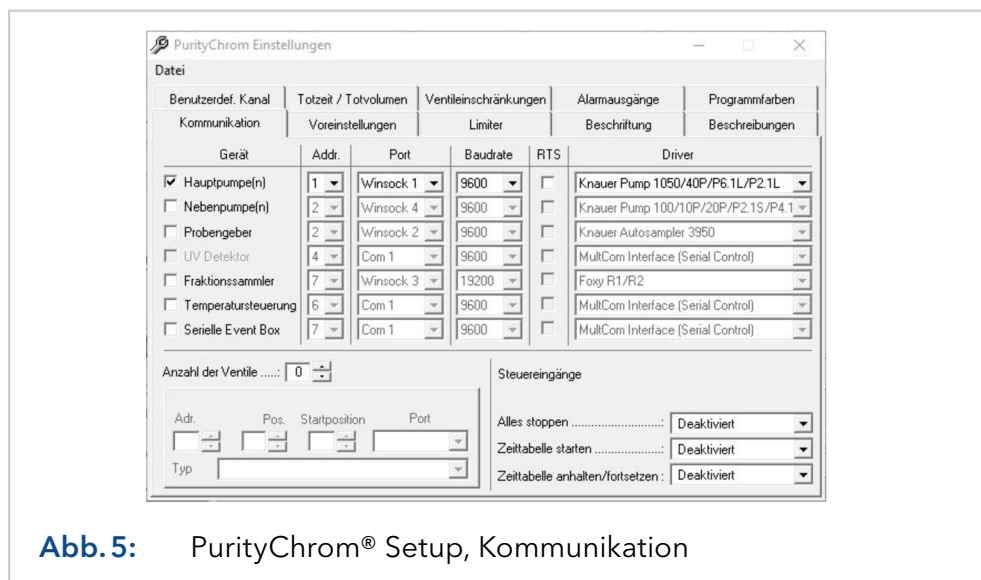
Anzeigen für komplexe,  
präparative Aufberei-  
tungssysteme unter  
PurityChrom® MCC Plus:

Anzeige	Bedeutung
	<p><i>DRUCK</i> gibt den aktuellen Druck der Hauptpumpe an. Sie können den Anzeigewert im Setup unter <i>VOREINSTELLUNGEN</i> mit Hilfe eines Offsets und eines Faktors ändern.</p>
	<p><i>PUMPE 1 STATUS</i> zeigt den aktuellen Zustand der Pumpe 1 an.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ <i>EIN</i>: Pumpe läuft.</li> <li>■ <i>AUS</i>: Pumpe wurde angehalten.</li> <li>■ <i>OVER</i>: Pumpe wurde angehalten, da der Druck zu hoch ist.</li> <li>■ <i>UNDER</i>: Pumpe wurde angehalten, da der Druck zu niedrig ist.</li> </ul>
	<p><i>PUMP 1 FLUSSRATE</i> zeigt den aktuellen Durchfluss von Pumpe 1 an.</p>
	<p><i>PUMPE 1 DRUCK</i> zeigt den aktuellen Druck von Pumpe 1 an.</p>
  	<p><i>STATUS</i>, <i>DRUCK</i> und <i>FLUSSRATE</i> können für jede der 8 Pumpen im System angezeigt werden.</p>

### 3. 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.

#### 3.1 Kommunikation



**Abb. 5:** PurityChrom® Setup, 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 nicht automatisch eingespeist sind. Jedes Modul in einem Assistenten zählt als ein Gerät.

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



**Hinweis:** Ändern Sie die vorkonfigurierte 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 serielle oder LAN-Adresse, die Anzahl der Positionen und den Anschluss für dieses Ventil auswählen können.

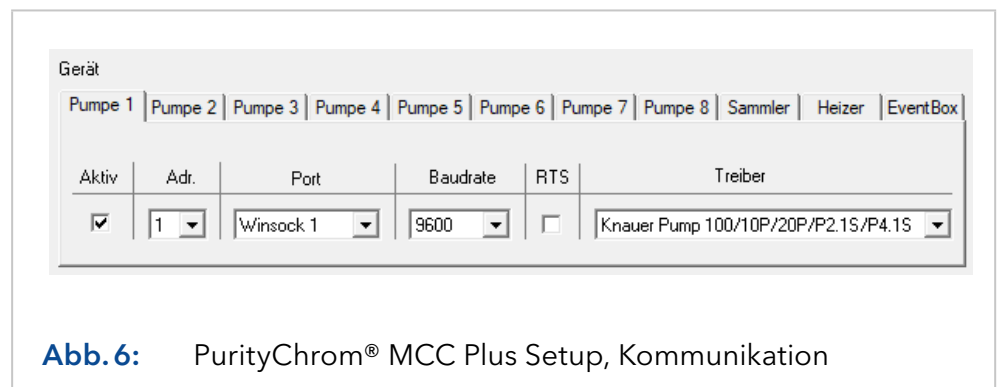
- Bei Verwendung eines Fraktionssammlers müssen Sie das Ventil des Sammlers separat konfigurieren (Adr.: 1, Pos.: 2, Port: „Driver 5“ unter PurityChrom® und „Driver 9“ unter PurityChrom® MCC Plus, Typ: Standardventil).
- Bei Verwendung der P 6.1L (Hochdruckgradientenversion) als Hauptpumpe müssen Sie das Lösungsmittelauswahlventil separat konfigurieren, indem Sie zwei Standardventile (Adr.:1 und 2, Pos.: 2, Port: Driver 1) 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 Port: Driver 2.
- Bei Verwendung des RID 2.1L müssen Sie das Spülventil separat konfigurieren (Adr.:1, Pos.: 2, Port: Driver 3, Typ: Standard Valve).

Im Register *BESCHREIBUNGEN* aus dem Setup (siehe Kapitel „3.5 Beschreibungen“ auf Seite 18) 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 [Pumps → IOcontrol=1] (siehe Kapitel „21.1 PurityChrom®“:

Die Einträge in der Datei PurityChrom.ini“ auf Seite 144) geändert werden, wenn Sie Ihre Pumpe in Abhängigkeit vom Trigger starten wollen.

Unter PurityChrom® MCC Plus sind die Kommunikationseinstellungen für jedes Gerät in verschiedenen Registerkarten organisiert. Klicken Sie auf die jeweilige Registerkarte, um die Kommunikation mit dem Gerät zu aktivieren und um Adresse, Port, Baudrate und Driver wie oben beschrieben einzustellen.



## 3.2 Voreinstellungen

In der Registerkarte Voreinstellungen werden Standardwerte (z. B. für Wellenlängen) sowie Grenzwerte (z. B. maximaler Pumpendruck) für die Gerätesteuerung festgelegt.

### 3.2.1 Voreinstellungen unter PurityChrom®

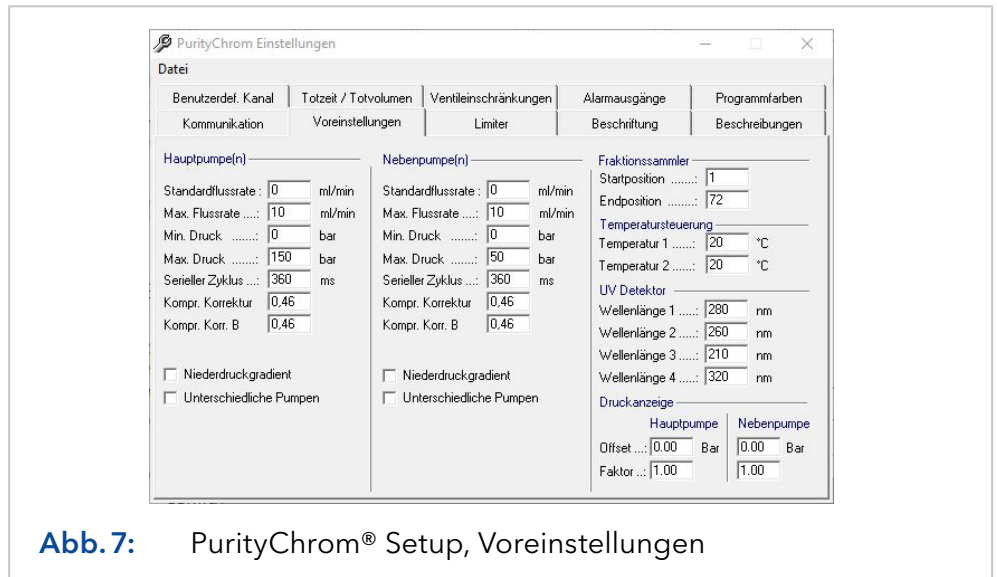


Abb. 7: PurityChrom® Setup, Voreinstellungen

Sie können Standard- und Maximalwerte für die zu steuernden Geräte in der Voreinstellungskonfiguration festlegen. Die folgenden Werte können Sie im *MAJOR PUMP SYSTEM* und im *MINOR PUMP SYSTEM* eingeben:

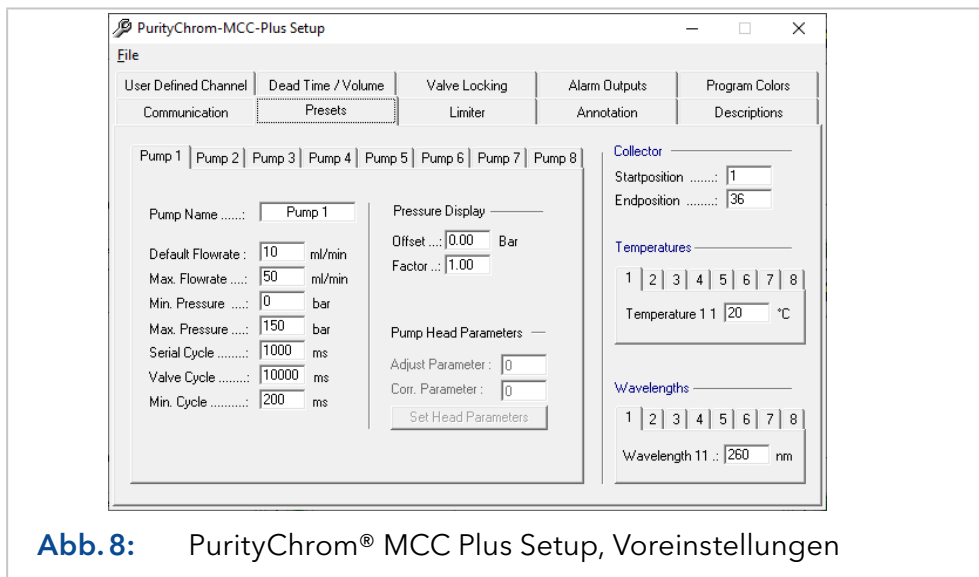
- **STANDARDFLUSSRATE:** Flussrate, die beim Start des Programms an die Pumpen übertragen wird.
- **MAX. FLUSSRATE:** Flussrate, die maximal betrieben werden kann.
- **MAX. DRUCK:** Maximaldruck, bei dem die Pumpen stoppen werden.
- **MIN. DRUCK:** Minimaldruck, bei dem die Pumpen stoppen werden.
- **SERIELLER ZYKLUS:** Zeitintervall 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.



**Hinweis:** Nachdem Sie das Setup-Fenster geschlossen haben, werden die Voreinstellungen an das Gerät geschickt. Wir empfehlen, die *STANDARDFLUSSRATE* auf 0 ml/min zu setzen.

### 3.2.2 Voreinstellungen unter PurityChrom® MCC Plus



**Abb. 8:** PurityChrom® MCC Plus Setup, Voreinstellungen

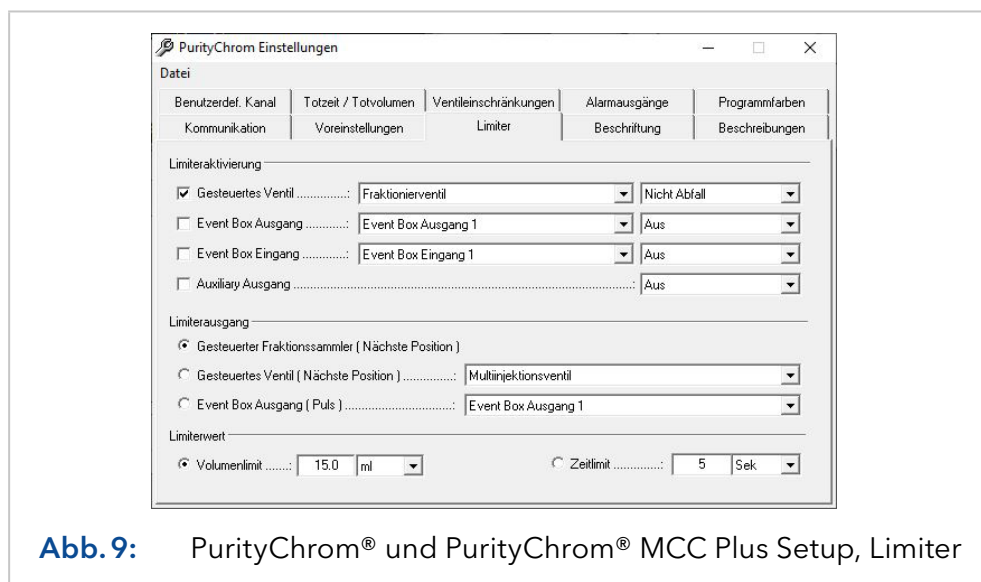
In der Registerkarte Voreinstellungen können Sie Standard- und Maximalwerte für die von PurityChrom® MCC Plus gesteuerten Geräte einstellen. Sie können die folgenden Werte für jede der 8 Pumpen eingeben:

- **PUMPENNAME:** Der Name der Pumpe, der in den Anzeigen des Hauptfensters (Status, Flussrate, Druck) und im Zeittabelleneditor angezeigt wird.
- **STANDARDFLUSSRATE:** Die Durchflussmenge, die beim Start der Software an die Pumpe als Standard übertragen wird.
- **MAX. FLUSSRATE:** Die maximale Durchflussrate, die vom Benutzer gewählt werden kann.
- **MAX. DRUCK:** Die Pumpe wird gestoppt, wenn der Druck den angegebenen Wert erreicht.
- **MIN. DRUCK:** Der Mindestdruck; die Pumpe wird gestoppt, wenn dieser Druck unter den angegebenen Wert fällt.
- **SERIELLER ZYKLUS:** Zeitintervall, in dem der Status der seriell gesteuerten Pumpe 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.
- **DRUCKANZEIGE:** Um den angezeigten Wert für den Pumpendruck zu ändern, können ein *OFFSET* und ein *FAKTOR* verwendet werden.
- **PUMP HEAD PARAMETERS:** Instrument zur Korrektur der Flussrate der gewünschten Pumpe. Dies erfolgt durch Anpassung des Adjust Parameters.

Zusätzlich können einige allgemeine Voreinstellungen für Fraktions-sammler, Heizgeräte und UV-Detektoren vorgenommen werden:

- **STARTPOSITION FRAKTIONSSAMMLER:** Die erste Position des Fraktions-sammlers beim Start der Software (für die Ausgangsposition des Sammlerarms muss 0 gewählt werden).
- **ENDPOSITION FRAKTIONSSAMMLER:** Die letzte Position des Fraktions-sammlers für die Fraktionierung.
- **TEMPERATURSTEUERUNG:** Standardwerte für jede im System verwendete Temperatur, die beim Start der Software eingestellt werden (z. B. Säulenofen und Eluentenheizer).
- **UV-DETEKTOR WELLENLÄNGE:** Standardwerte für jede im System verwendete Wellenlänge, die beim Start der Software sofort an Detektoren übertragen wird.

### 3.3 Fraktionsbegrenzer (Limiter)



**Abb. 9:** PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus Setup, 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 Fraktionsammler 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 Fraktionsammler 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 Eingangstatus 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.

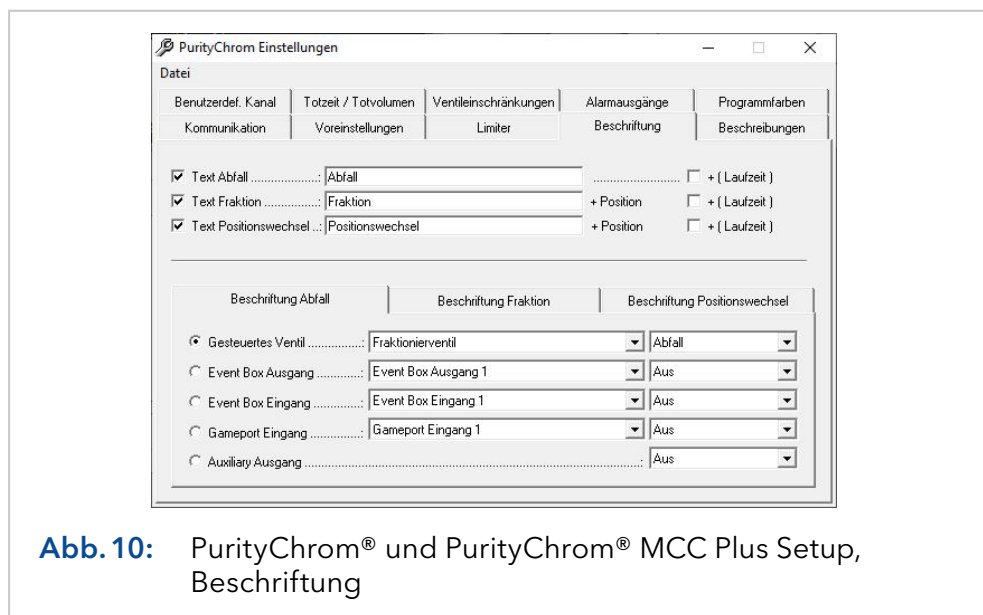
Geben Sie unter *LIMITER-AUSGANG* ein, was der Limiter tun soll, wenn das Fraktionslimit erreicht ist.

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

- *SERIELL GESTEUERTER FRAKTIONSSAMMLER* sollte aktiviert werden, wenn Sie einen seriellen oder LAN-gesteuerten Fraktionsssammler verwenden. Wenn das Fraktionslimit erreicht ist, wird ein *POSITIONSWECHSEL* ausgeführt.
- *SERIELL 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.
- *EVENT BOX-AUSGANG* sollte aktiviert werden, wenn Sie einen Fraktionsssammler 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.

### 3.4 Beschriftung



**Abb. 10:** PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus Setup, Beschriftung

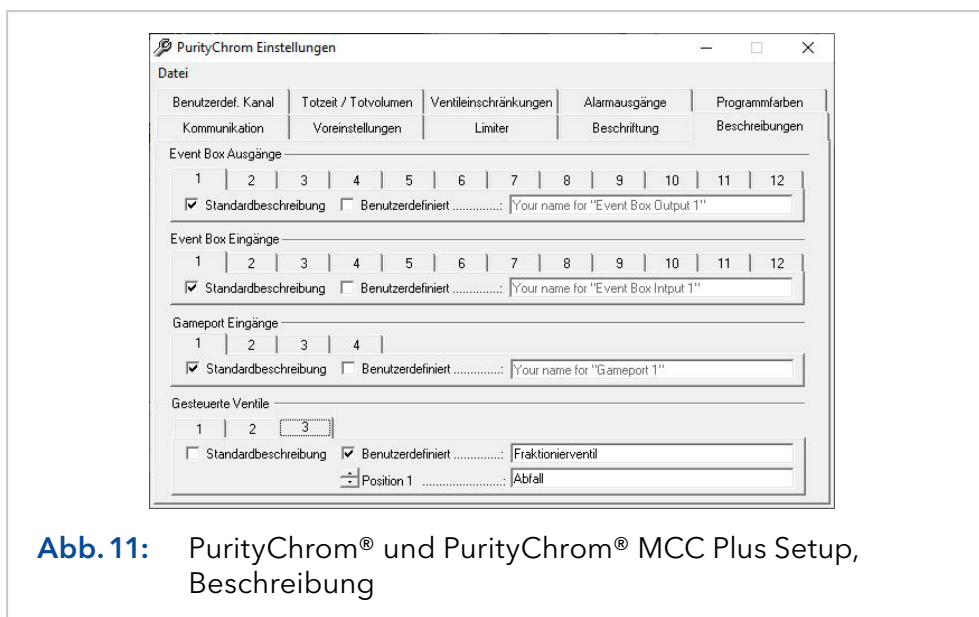
Die automatischen Beschriftungen in den Chromatogrammen werden im Setup *BESCHRIFTUNG* konfiguriert.

- *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.

### 3.5 Beschreibungen



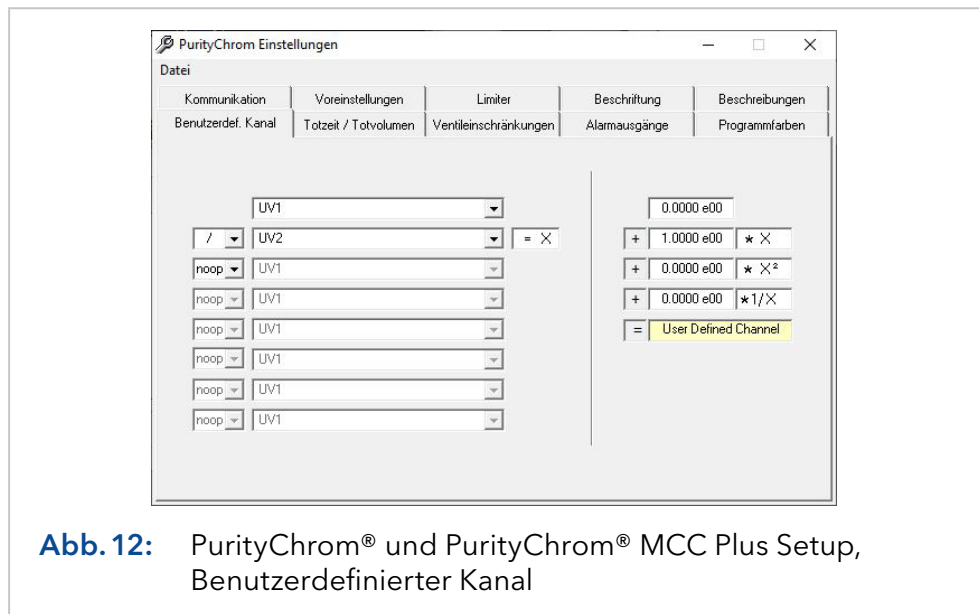
**Abb. 11:** PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus Setup, Beschreibung

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

### 3.6 Benutzerdefinierter Kanal



**Abb. 12:** PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus Setup, 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*.

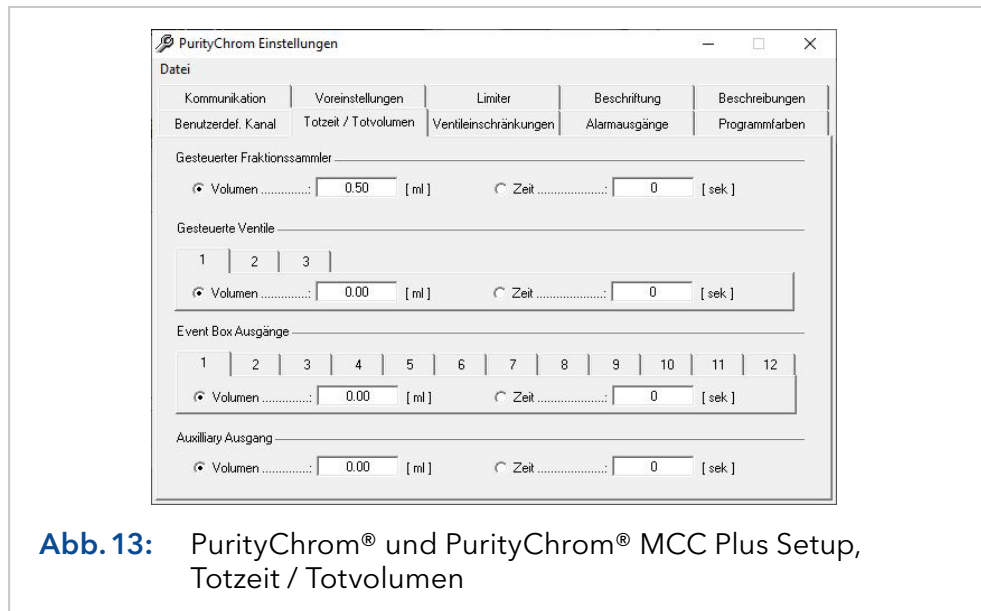
Auf der linken Seite können Sie eines oder mehrere Ihrer Analogsignale als Datenquelle aktivieren. Zwischen diesen Kanälen haben Sie eine Auswahl an möglichen Operationen:

Signal	Beschreibung
<i>NOOP</i>	Kein Betrieb
+	Addieren 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.

### 3.7 Totzeit/Totvolumen



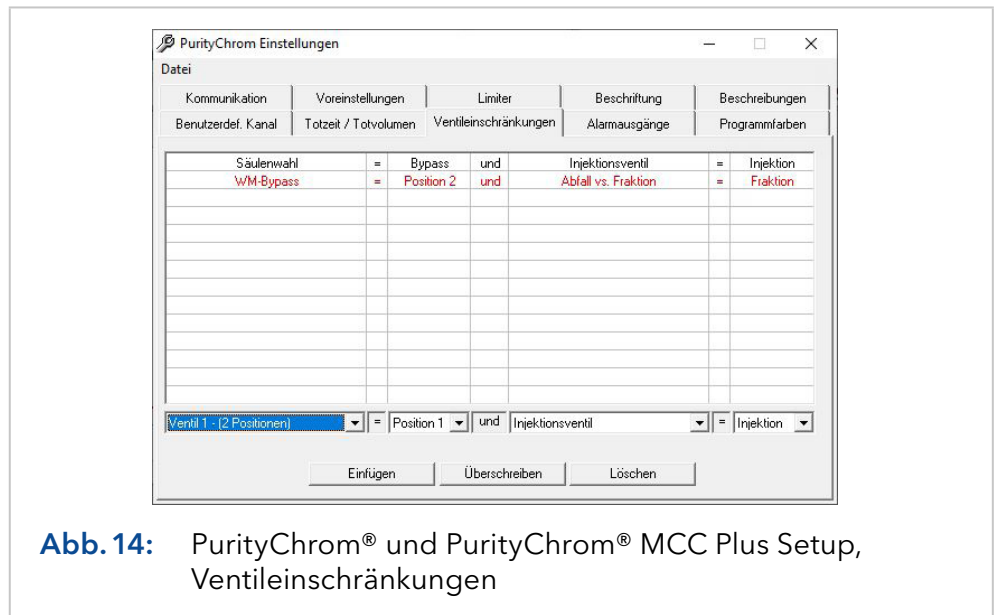
**Abb. 13:** PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus Setup, Totzeit / Totvolumen

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 in den Abschnitten *SERIELL GESTEUERTER FRAKTIONSSAMMLER* und *SERIELL GESTEUERTE VENTILE* definieren.

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 Gesamtlauzeit 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.

### 3.8 Ventileinschränkungen

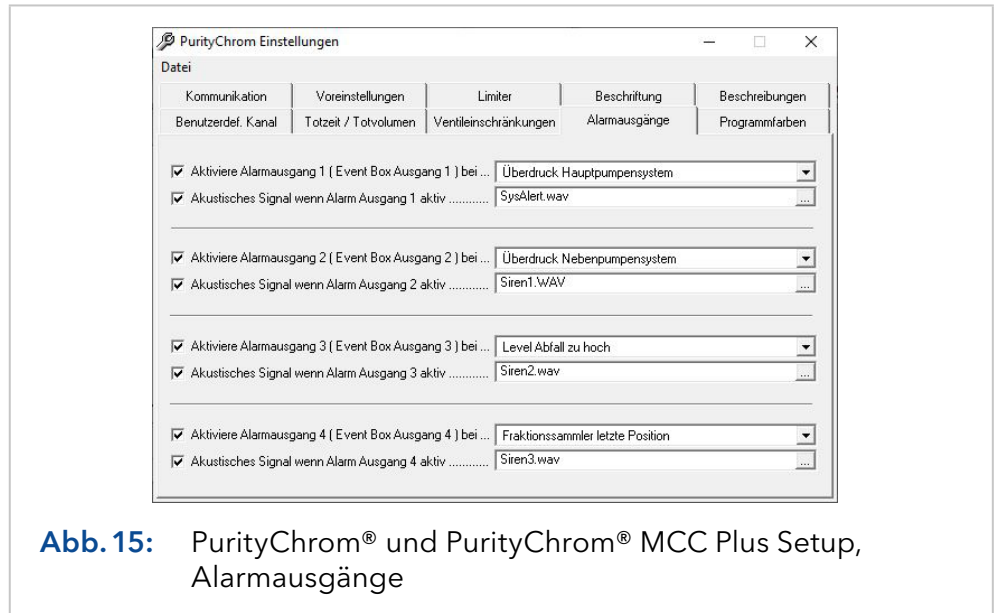


**Abb. 14:** PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus Setup, Ventileinschränkungen

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.

## 3.9 Alarmausgänge

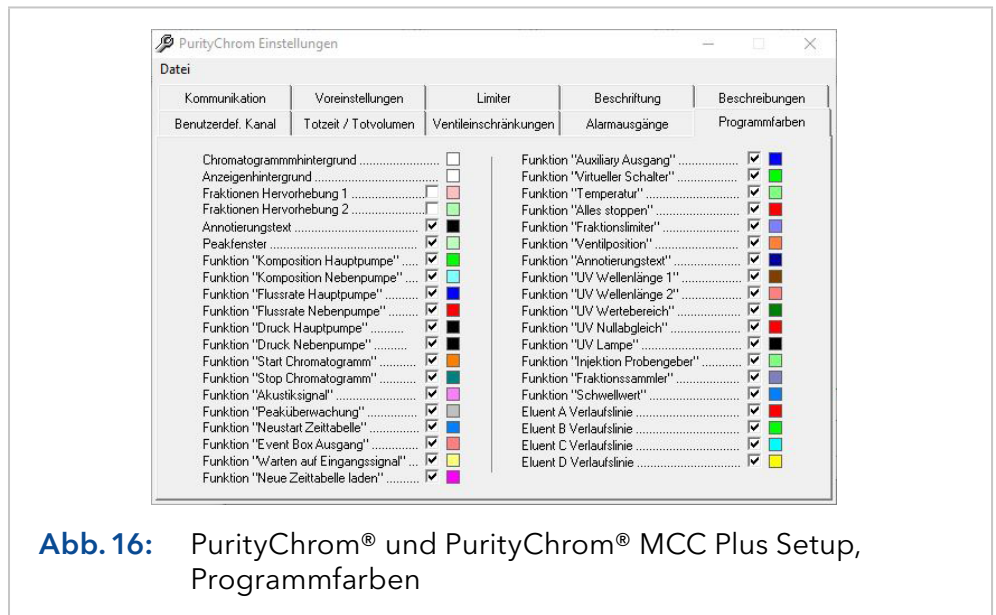


Bei der Einrichtung der Alarmausgänge können bis zu 4 Alarmausgänge aktiviert werden. Die Alarmausgänge 1 bis 4 werden über Event Box Ausgänge eingestellt.

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.

### 3.10 Programmfarben




**Abb. 16:** PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus Setup, Programmfarben

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

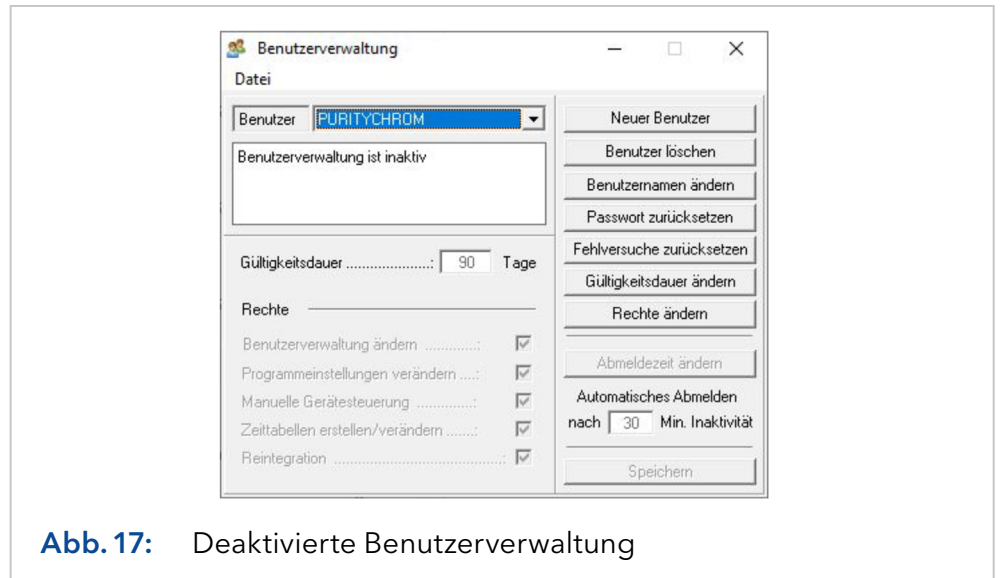
Für jedes Grafikelement oder jede Funktion bestimmt ein angrenzendes Kontrollkästchen, ob das Element oder die Funktion angezeigt wird. Durch Anklicken der farbigen Kästchen öffnet sich ein Farbdialogfenster, in dem die entsprechenden Anzeigefarben ausgewählt werden können.

## 4. Benutzerverwaltung

### 4.1 Allgemein

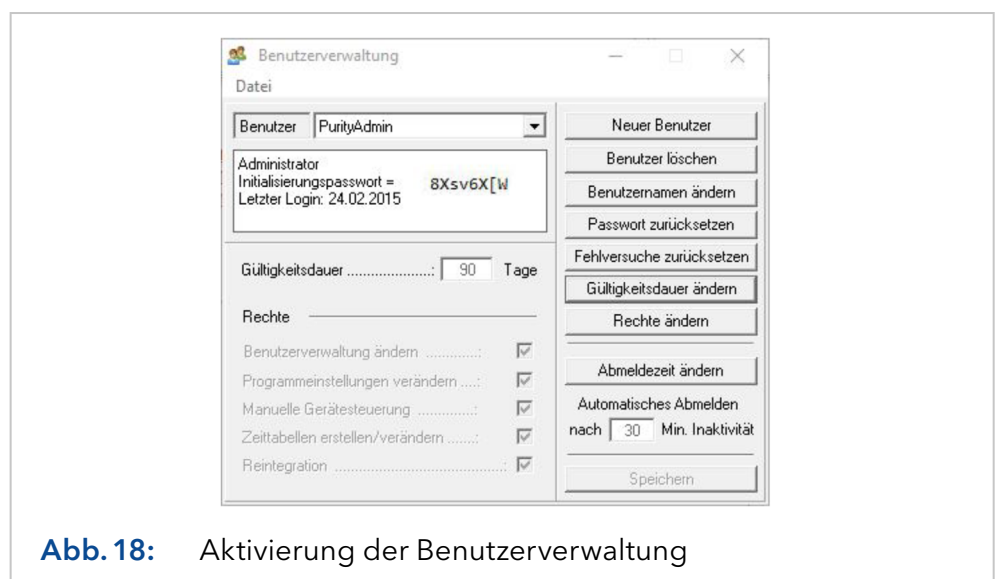
Die Benutzerverwaltung  ermöglicht es Ihnen, Administratoren und Benutzer einzurichten, denen Benutzerberechtigungen zugewiesen werden können.

### 4.2 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.

### 4.3 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

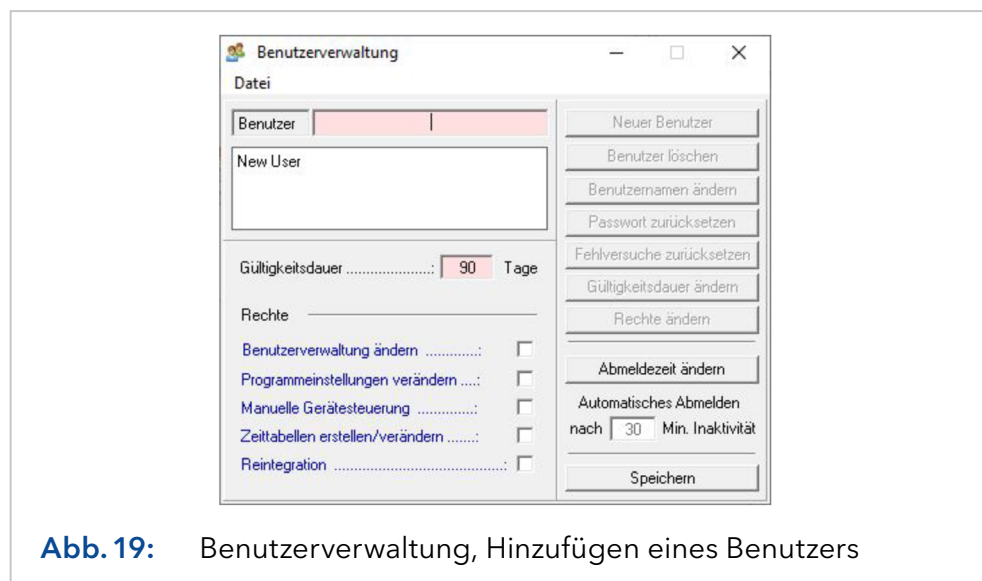
Um die Eingabe des neuen Benutzernamens zu bestätigen, drücken Sie die Schaltfläche *SPEICHERN*. Im Statusfenster erhalten Sie ein *INITIAL-PASSWORT*, das Sie bei der ersten Anmeldung verwenden müssen.

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

## 4.4 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.

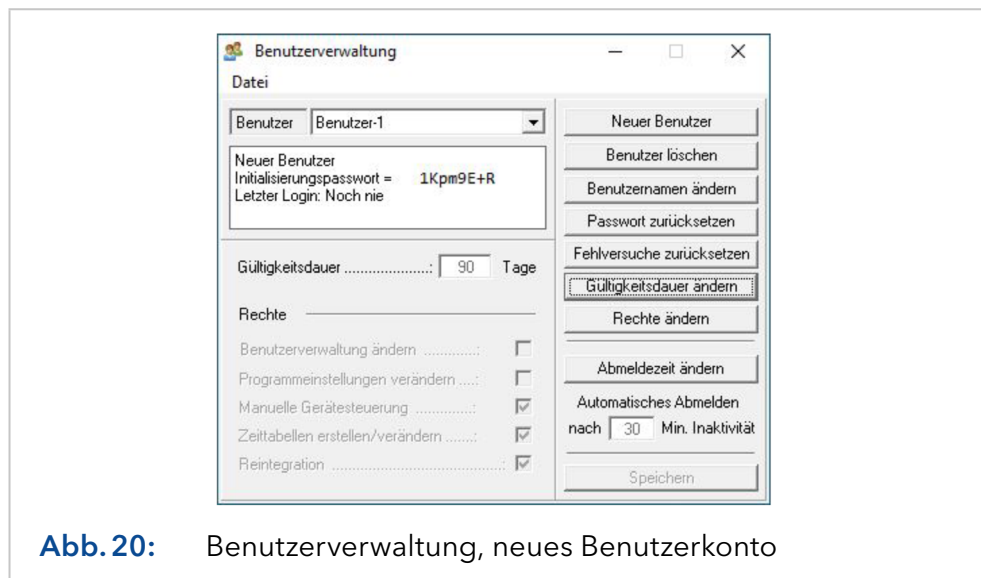
Um die Eingabe zu bestätigen, klicken Sie auf die Schaltfläche *SPEICHERN*.



**Abb. 19:** 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. 20:** 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 Sequenztabelle
- *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).

## 4.5 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.

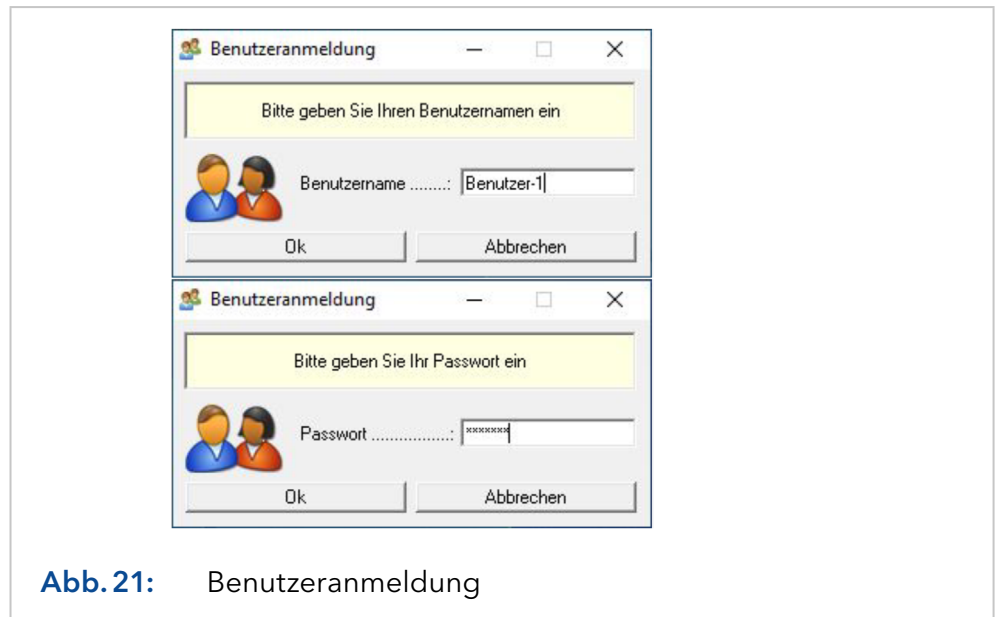
Der Betreiber muss dieses Passwort bei der nächsten Anmeldung verwenden.

## 4.6 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.

## 4.7 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: ! „ # \$ % & , ( ) \* + - . / : ; < = > ? @ [ \ ] ^ \_ { | } ~

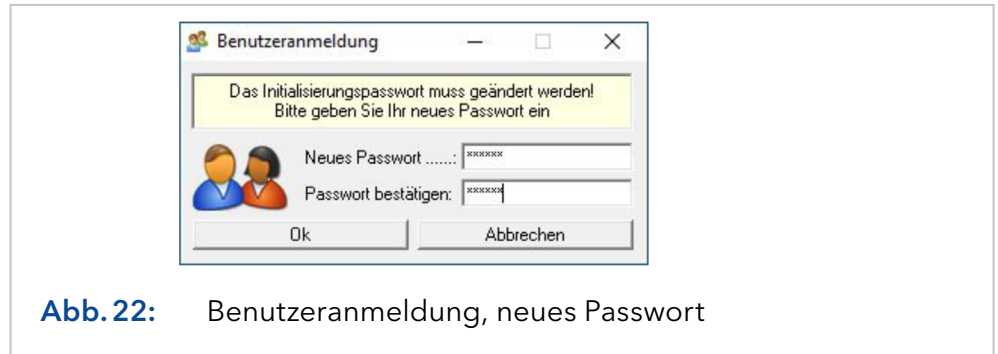
Nach der erfolgreichen Eingabe des Initialpasswortes wird der Betreiber aufgefordert, ein neues Passwort zu definieren und einzugeben.

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.

## 4.8 Gesperrtes Konto



**Abb. 22:** 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.

## 4.9 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.

## 4.10 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 (siehe Kapitel „4.3 So aktivieren Sie die Benutzerverwaltung“ auf Seite 24).

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.

## 5. Erstellen von Zeittabellen

### 5.1 Allgemein

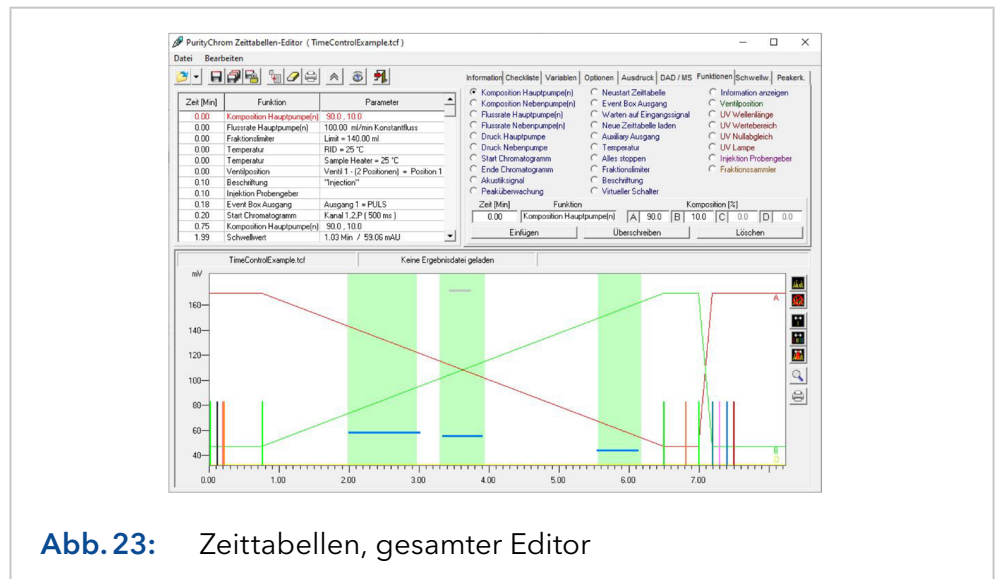




Abb.23: Zeittabellen, gesamter Editor

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 unter PurityChrom®, sorgt für eine erhöhte Übersichtlichkeit bei der Programmierung und hilft Ihnen so, Fehler zu vermeiden. In der speziellen Version PurityChrom® MCC Plus können keine Gradientensysteme genutzt werden.

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.

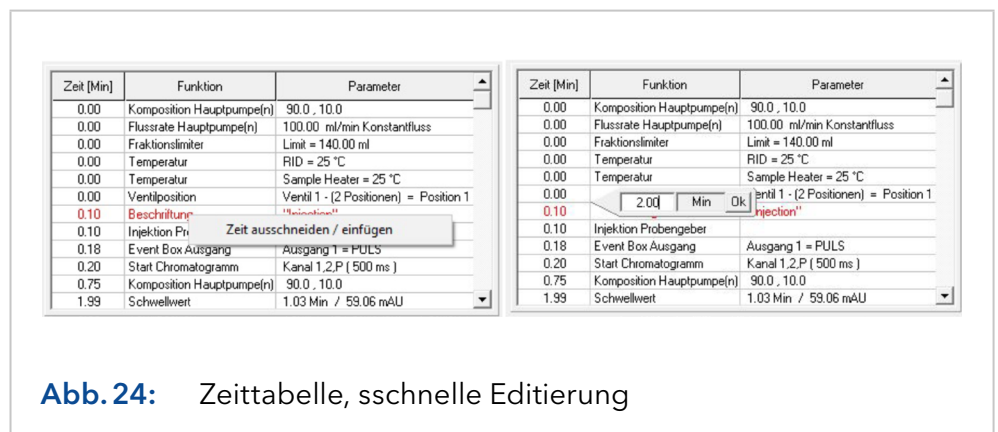


Abb.24: Zeittabelle, schnelle Editierung

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 AUSSCHNEIDEN/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.

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

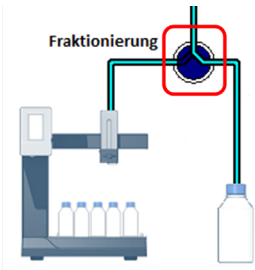
Menü	Funktion
	<i>ZEITABELLE LADEN</i> lädt eine verfügbare Zeittabelle in den Editor. Die Dateitypen, die Sie zum Laden auswählen können, sind <i>ZEITABELLE (*.tcf)</i> oder <i>ERGEBNISDATEI (*.rfp)</i> . Mit der Option <i>ERGEBNISDATEI</i> können Sie eine Zeittabelle aus Ergebnisdaten laden.
	<i>ZEITABELLE SPEICHERN</i> speichert die Zeittabelle unter ihrem bestehenden Namen.
	<i>ZEITABELLE SPEICHERN UNTER ...</i> speichert die Zeittabelle unter einem neuen Namen.
	<i>ZEITABELLE 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>ZEITABELLE DRUCKEN</i> öffnet einen Druckerdialog zum Ausdrucken der Zeittabelle

Menü	Funktion
	<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

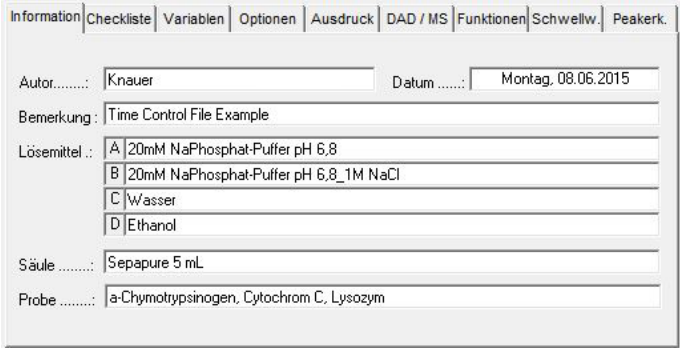


**Abb. 25:** Zeittabellen-Editor, Simulationsmodus

## 5.2 Erstellen von Zeittabellen in PurityChrom®

### 5.2.1 Speichern allgemeiner 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.



The screenshot shows the 'Information' tab in the PurityChrom software interface. The fields are filled with the following data:

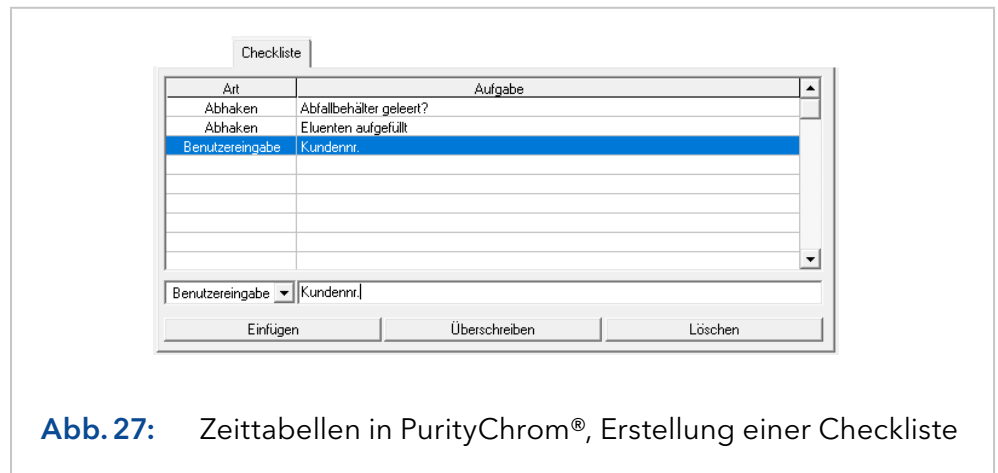
Field	Value
Autor.....	Knauer
Datum .....	Montag, 08.06.2015
Bemerkung :	Time Control File Example
Lösemittel.:	A   20mM NaPhosphat-Puffer pH 6,8 B   20mM NaPhosphat-Puffer pH 6,8_1M NaCl C   Wasser D   Ethanol
Säule .....	Sepapure 5 mL
Probe .....	a-Chymotrypsinogen, Cytochrom C, Lysozym

**Abb. 26:** Zeittabellen in PurityChrom®, allgemeine Informationen

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

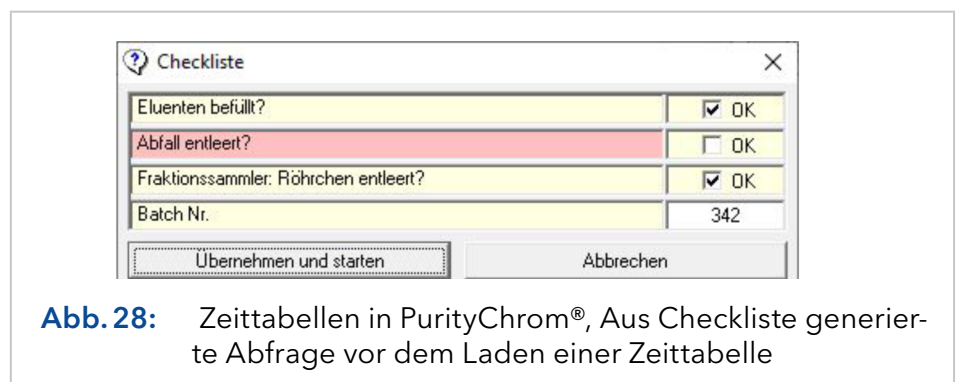
## 5.2.2 Erstellung einer Checkliste

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 in PurityChrom®, 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.
- *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.



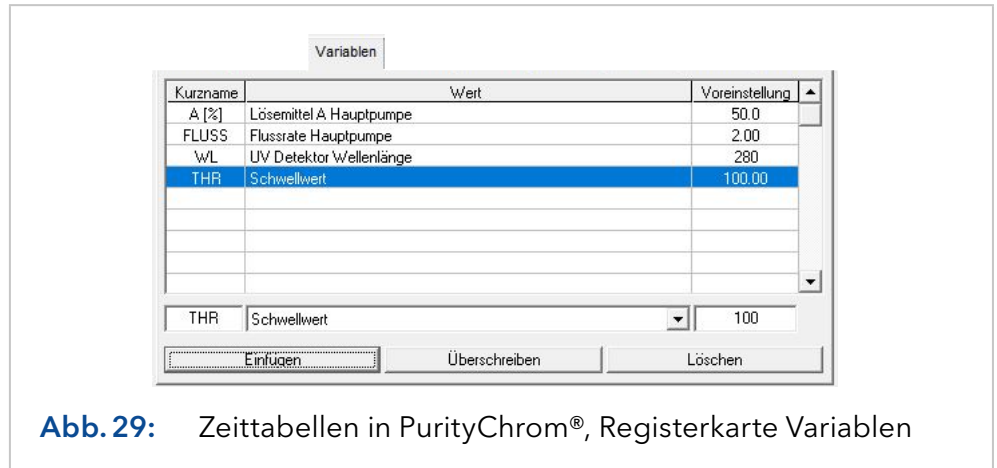
**Abb. 28:** Zeittabellen in PurityChrom®, Aus Checkliste generierte Abfrage vor dem Laden einer Zeittabelle

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.



### 5.2.3 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 in PurityChrom®, Registerkarte Variablen

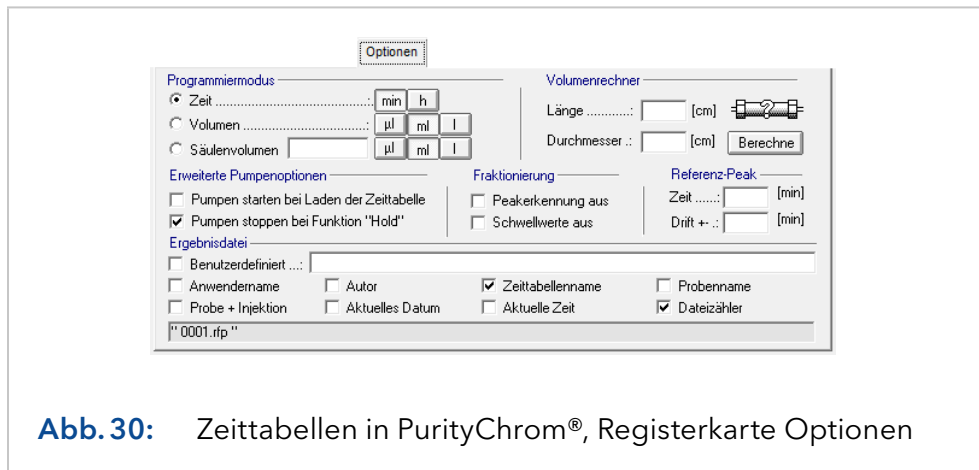
Die folgenden Variablen können definiert werden:

- Zusammensetzung Hauptpumpe: Lösemittel A-C Hauptpumpe
- Flussrate Hauptpumpe
- Zusammensetzung Nebepumpe: Lösemittel A-C Nebepumpe
- Flussrate Nebepumpe
- 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 die linke Maustaste im Parameter-Textfeld gedrückt. Es erscheint ein Auswahlménü 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.

## 5.2.4 Optionen



**Abb. 30:** Zeittabellen in PurityChrom®, 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 Einstellungen zur Fraktionierung deaktivieren, ohne dass Sie die Schwellwerte oder Peakabtastung aus einem wertvollen Programm löschen müssen, die Sie später eventuell wieder benötigen.

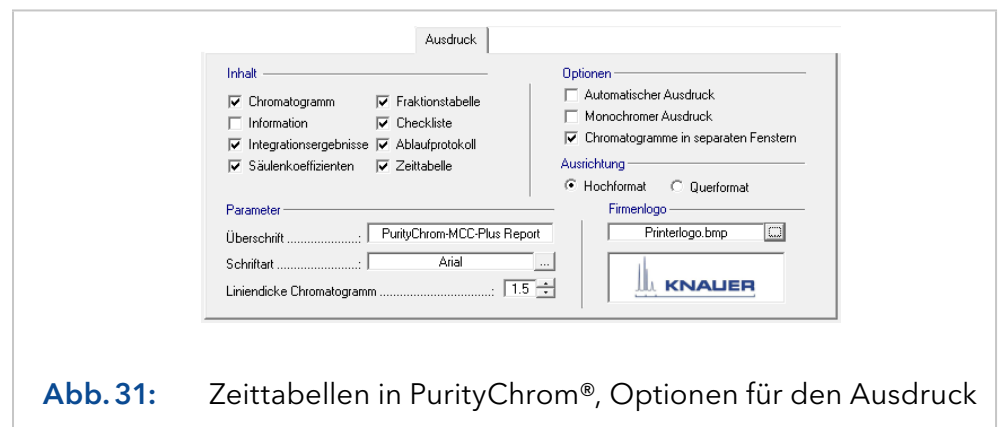
Für die Funktion *REFERENCE PEAK* benötigen Sie ein Referenzchromatogramm mit einem Referenzpeak, der zu einem bestimmten Zeitpunkt eluiert. Diesen Zeitpunkt können Sie hier einstellen. Wenn Sie einen Schwellwert für diesen Peak programmieren, können Sie die Funktion *REFERENCE PEAK* wählen. Falls der 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. *ZEITABELLENNAME* 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.

## 5.2.5 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 in PurityChrom®, 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 (*AUTOMATISCHER AUSDRUCK*)
- Ob das Chromatogramm in schwarz-weiß gezeichnet werden soll (*MONOCHROMER AUSDRUCK*)
- Ob jeder Datenkanal in einem separaten Fenster angezeigt werden soll

- Sowie, ob die Fraktionen im Chromatogramm hervorgehoben werden sollen.

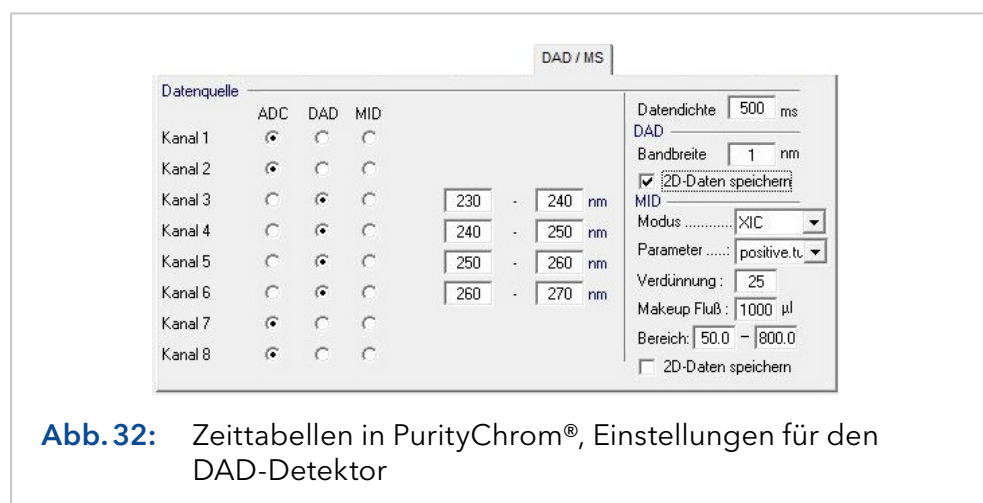
Im Abschnitt *PARAMETER* und *FIRMENLOGO* können Sie Ihr individuelles Design mit einer individuellen Überschrift, Schriftart, Liniendicke von Chromatogrammen und einem Firmenlogo anpassen.

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

## 5.2.6 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 *DATENQUELLE* die Quelle des Datenkanals aus. Sie können entweder die A/D-Wandlertarte 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.



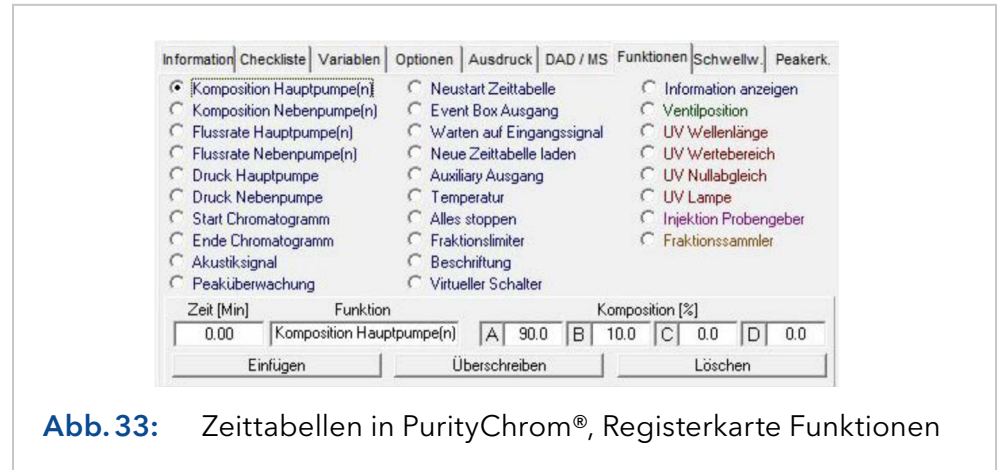
Geben Sie im Eingabefeld *DATENDICHTE* die Datenrate der DAD-Kanäle in ms ein.

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.

## 5.2.7 Funktionen der Zeittabelle

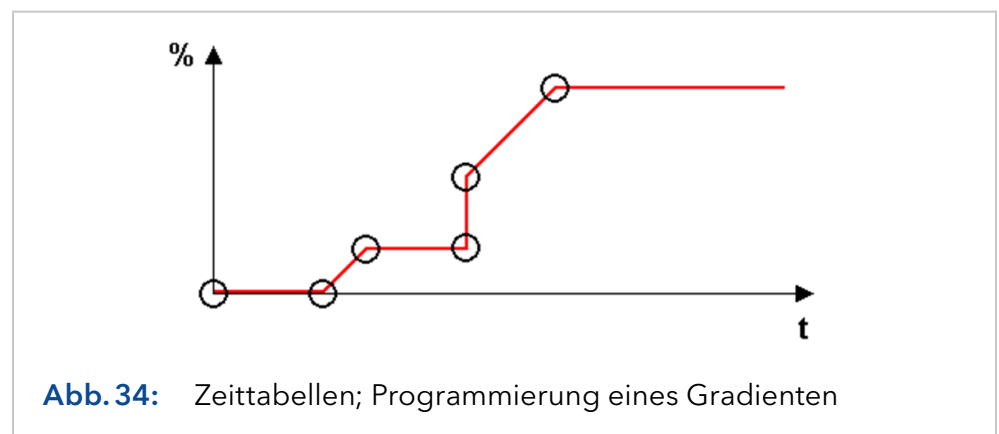
In der Registerkarte *FUNKTIONEN* finden Sie eine Liste aller programmierbaren Funktionen der Zeittabelle. Am unteren Ende des Registers befindet sich die Editorleiste, in der alle Funktionen mit Zeit und Parametern einzugeben sind. Die Parameterfelder in der Editorleiste ändern sich je nach gewählter 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 in PurityChrom®, 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 Nebepumpen im System (z. B. für Säulenkonditionierung, Probenapplikation etc.). Die Angaben erfolgen ebenfalls in Prozent.



**Abb. 34:** Zeittabellen; Programmierung eines Gradienten

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 der Pumpe 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.

*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 Nebepumpen im System. Die Eingabe erfolgt ebenfalls in ml/min. Es ist auch möglich, einen konstanten Druck für die Nebepumpe 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 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 erreicht wird.
- *DRUCKLIMIT* (von KNAUER-Pumpen nicht unterstützt): Die automatische Flussratenregelung beginnt zu arbeiten, wenn der festgelegte Wert erreicht ist.

*START CHROMATOGRAMM* startet die Chromatogrammaufzeichnung für die ausgewählten Kanäle mit der unter *SLICE WIDTH* (max. 60 ms) eingegebenen Datenpunktdichte (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 CHROMATOGRAMM* 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 Peaküberwachung ermöglicht den Neustart der Zeittabelle nur dann, wenn ein oder mehrere Signale den Grenzwert überschreiten und dann während der Zeitdauer der Zeittabelle wieder unter diesen Wert fallen. Wenn eine oder mehrere Peaksignale 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 (*EIN*, *AUS* oder *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 *EIN*, *AUS* oder *PULS* programmiert hat.

- *EIN*: Die Zeittabelle wird fortgesetzt, wenn der Auslöser ausgeschaltet bleibt.
- *AUS*: 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* den entsprechenden Event Box Eingang bzw. Gameport Eingang aktivieren (siehe Kapitel „3.1 Kommunikation“ auf Seite 12).

Wenn Sie ein Triggerkabel verwenden, müssen Sie den Event Box-Eingang 1 wählen. Außerdem muss die PurityChrom.ini-Datei [Pumps → IOcontrol=1] (siehe Kapitel „21.1 PurityChrom®: Die Einträge in der Datei PurityChrom.ini“ auf Seite 144) 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 *ON* oder *OFF* 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.

*FRAKTIONLIMITER* 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. Diese Funktion muss vom jeweiligen Detektor unterstützt sein.

*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 Sequenztafel verwendet werden.



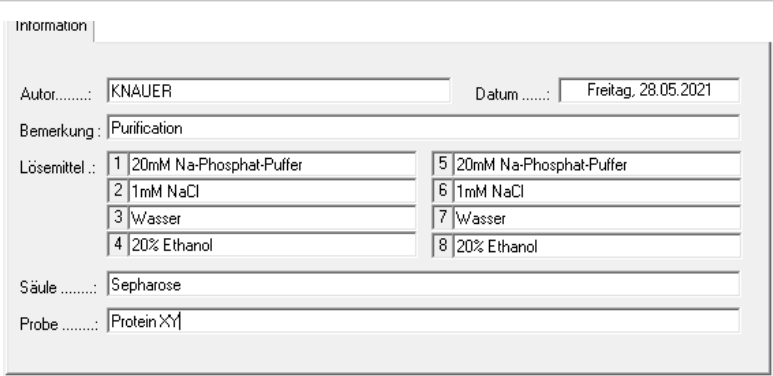
Der Ablauf der Zeittabelle wird während der Injektionsphase angehalten und die Anzeige der abgelaufenen Zeit im Hauptfenster zeigt abwechselnd die verstrichene Zeit und die Injektion an.

*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.

## 5.3 Erstellen von Zeittabellen in PurityChrom® MCC Plus

### 5.3.1 Speichern allgemeiner Informationen

Auf der Registerkarte *INFORMATION* können Sie Informationen über den Autor der Datei, die verwendeten Eluenten und Säulen eingeben sowie eine Probenkennung und einen allgemeinen Kommentar angeben. Das Datum wird automatisch generiert, wenn Sie die Datei speichern.



The screenshot shows the 'Information' dialog box with the following data:

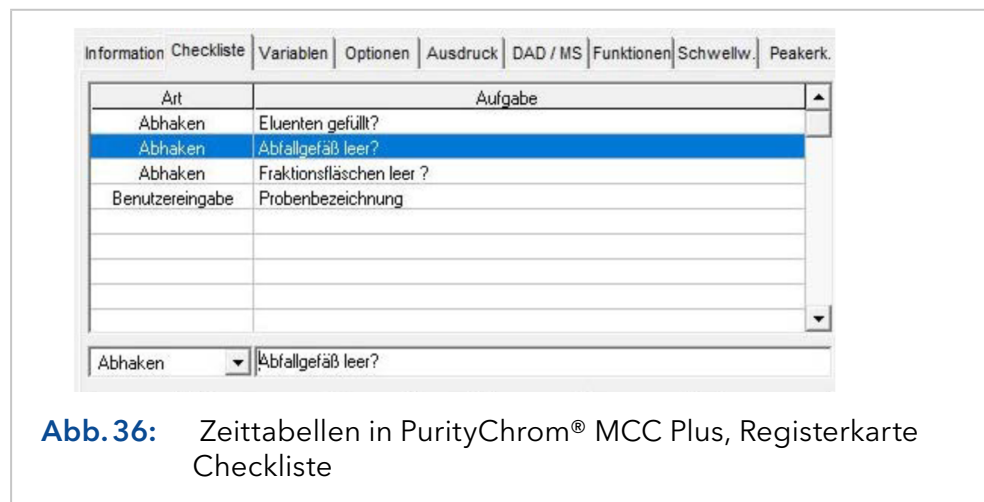
Autor.....:	KNAUER	Datum .....	Freitag, 28.05.2021
Bemerkung:	Purification		
Lösemittel ..:	1   20mM Na-Phosphat-Puffer	5   20mM Na-Phosphat-Puffer	
	2   1mM NaCl	6   1mM NaCl	
	3   Wasser	7   Wasser	
	4   20% Ethanol	8   20% Ethanol	
Säule .....	Sephacrose		
Probe .....	Protein XY		

**Abb. 35:** Zeittabellen in PurityChrom® MCC Plus, allgemeine Information

Die hier eingegebenen Informationen werden in den nach der Ausführung der Methode erzeugten Ergebnis- und Berichtsdateien gespeichert und können später wieder geöffnet werden. Die Probenbezeichnung wird nicht verwendet, wenn die Option *MANUELLE PROBENBEZEICHNUNG* (über den Button im Hauptfenster) aktiviert ist.

### 5.3.2 Erstellung einer Checkliste

Auf der Registerkarte *CHECKLISTE* können Sie eine Liste mit Anweisungen oder Erinnerungen erstellen. Die Editorleiste befindet sich unten auf der Registerkarte, wo Sie zwischen *ABHAKEN* und *BENUTZEREINGABE* wählen können:

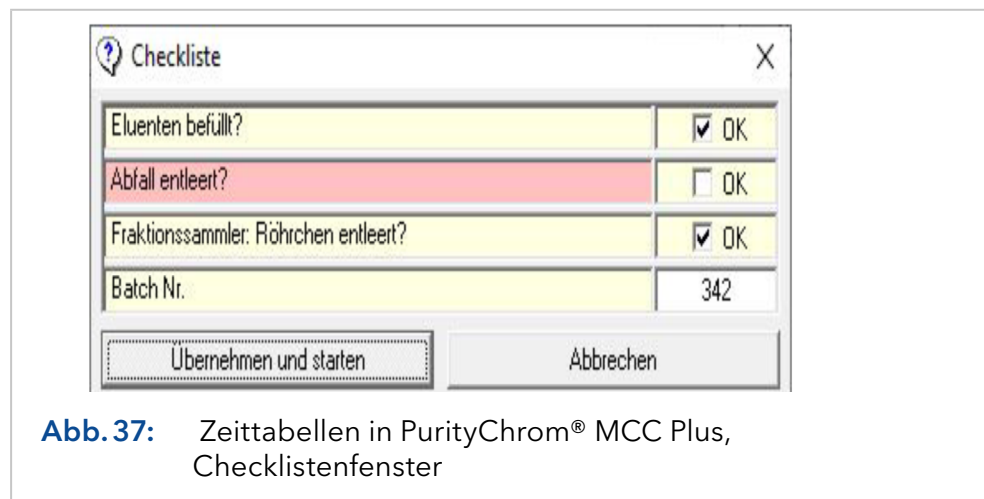


**Abb. 36:** Zeittabellen in PurityChrom® MCC Plus, Registerkarte Checkliste

Die Option *ABHAKEN* ermöglicht eine Anweisung oder eine Kontrollbestätigung. Geben Sie den Text der Anweisung in das Eingabefeld auf der rechten Seite ein. Dieser Punkt muss vom Benutzer angekreuzt werden, bevor er die Zeittabelle starten kann.

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

Die Schaltfläche *EINFÜGEN* fügt den Inhalt der aktuellen Editorleiste in die Checkliste ein. Die Schaltfläche *ÜBERSCHREIBEN* überschreibt den Inhalt der markierten Zeile mit dem Inhalt der Editorleiste. Mit der Schaltfläche *LÖSCHEN* können Sie die markierte Zeile aus der Checkliste entfernen. Um die Reihenfolge der Zeilen zu ändern, klicken Sie mit der linken Maustaste auf eine Zeile und verschieben Sie sie bei gedrückter Maustaste an die gewünschte Stelle.

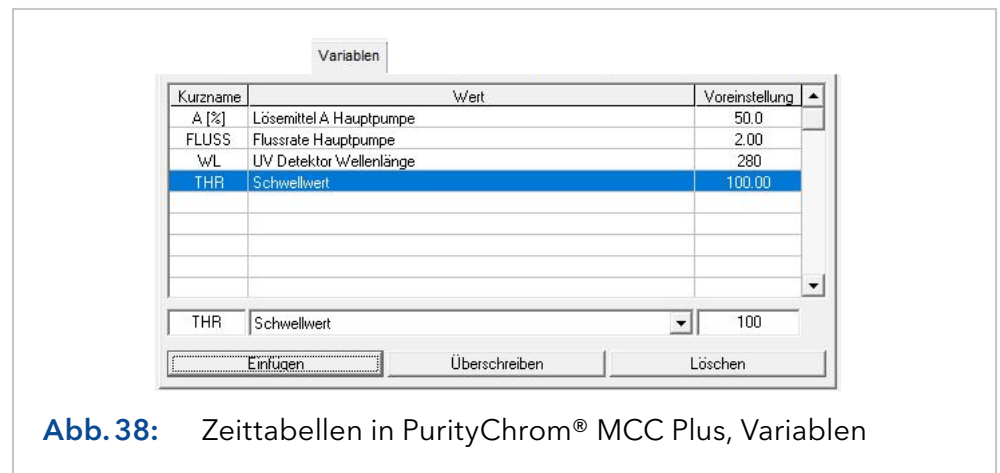


**Abb. 37:** Zeittabellen in PurityChrom® MCC Plus, Checklistenfenster

Wenn die Checkliste einer Zeittabelle Zeilen enthält, wird das Checklistenfenster vor dem Start dieser Datei geöffnet. Der Benutzer muss alle Checkboxen ankreuzen und alle Abfragen beantworten, bevor der Lauf beginnt. Eine vergessene Zeile wird rot markiert und verhindert den Start. Die Checkliste wird in der Ergebnisdatei protokolliert.

### 5.3.3 Variablen in Zeittabellen

Die Registerkarte *VARIABLES* 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. 38:** Zeittabellen in PurityChrom® MCC Plus, Variablen

Die folgenden Variablen können definiert werden:

- Flussrate der Pumpe 1-8
- UV-Detektor-Wellenlängen
- Kanalnummer
- Schwellenwert
- Ventilstellung
- Limiter-Wert
- Position des Fraktionssammlers
- Temperatur
- Funktionszeit (einschließlich Endzeit eines Schwellwertes)
- Zeitverschiebung

Um bei der Programmierung einer Zeittabelle eine der definierten Variablen einzufügen, halten Sie die linke Maustaste im Parameter-Textfeld gedrückt. Es erscheint ein Auswahlménü 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 eingegeben wurde.

### 5.3.4 Optionen

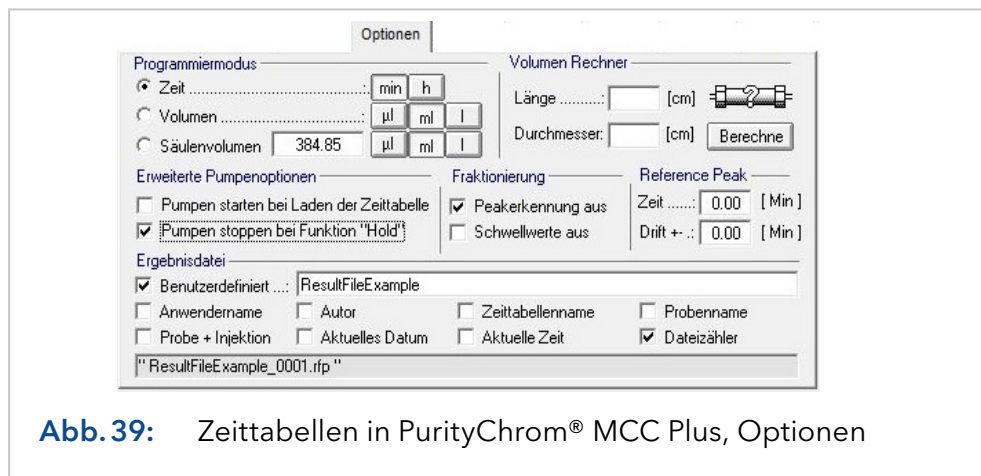


Abb. 39: Zeittabellen in PurityChrom® MCC Plus, Optionen

Auf der Registerkarte *OPTIONEN* können Sie die Abmessungen der x-Achse im *PROGRAMMIERMODUS*. 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 Ihrer Säule ein und klicken Sie auf die Schaltfläche *BERECHNE*. Das Säulenvolumen erscheint dann im Feld *SÄULENVOLUMEN*.



**Hinweis:** Volumina und Säulenvolumina werden als Summe des geförderten Volumens aller 8 in PurityChrom® MCC Plus verwendeten Pumpen berechnet.

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

Unter *FRAKTIONIERUNG* können Sie die programmierte Peakabtastung deaktivieren, indem Sie die Option *PEAKERKENNUNG AUS* wählen. *SCHWELLWERTE AUS* deaktiviert die für diese Zeittabelle programmierten Schwellwerte. Mit diesen Optionen können Sie die Fraktionierung bzw. die verknüpften Funktionen deaktivieren, ohne dass Sie die Schwellwerte oder Peakabtastung 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 zu definieren, die von dieser Zeittabelle erzeugt werden sollen. Sie können die Dateinamen mit Hilfe der folgenden 9 Namenssegmente festlegen:

*BENUTZERDEFINIERT* fügt dem Dateinamen einen benutzerdefinierten Text hinzu. Er sollte kurz genug sein, um in das Textfeld zu passen.

*ANWENDERNAME* fügt dem Dateinamen den Namen des aktuellen Benutzers hinzu.

*AUTOR* fügt dem Dateinamen den Namen des Autors der Zeittabelle hinzu.

*ZEITABELLENNAME* fügt dem Dateinamen den Namen der Zeittabelle hinzu.

*PROBENNAME* fügt dem Dateinamen die Probenbezeichnung hinzu.

*PROBE + INJEKTION* fügt dem Dateinamen die Nummer des aktuellen Probenfläschchens und der aktuellen Injektion hinzu.

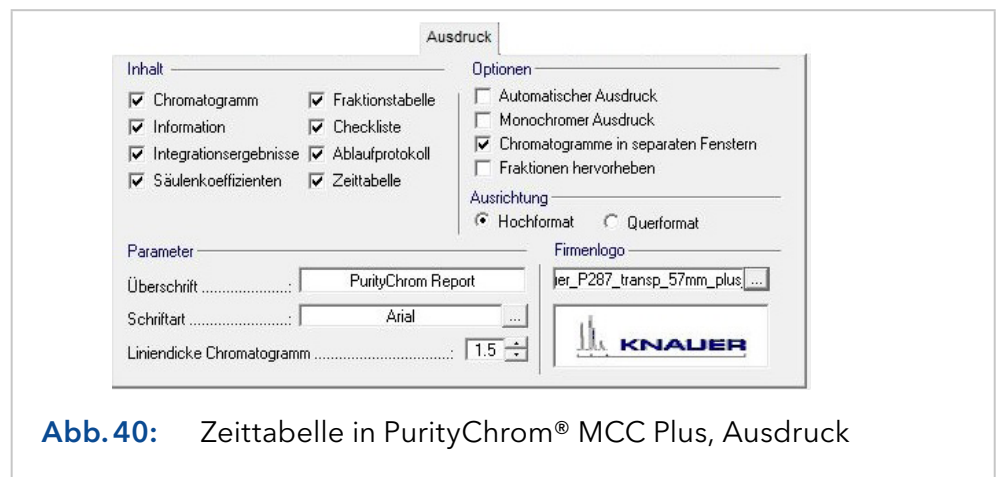
*AKTUELLES DATUM* fügt dem Dateinamen das aktuelle Datum hinzu.

*AKTUELLE ZEIT* fügt die aktuelle Zeit zum Dateinamen hinzu.

*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.

### 5.3.5 Optionen für den Ausdruck

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



**Abb. 40:** Zeittabelle in PurityChrom® MCC Plus, Ausdruck

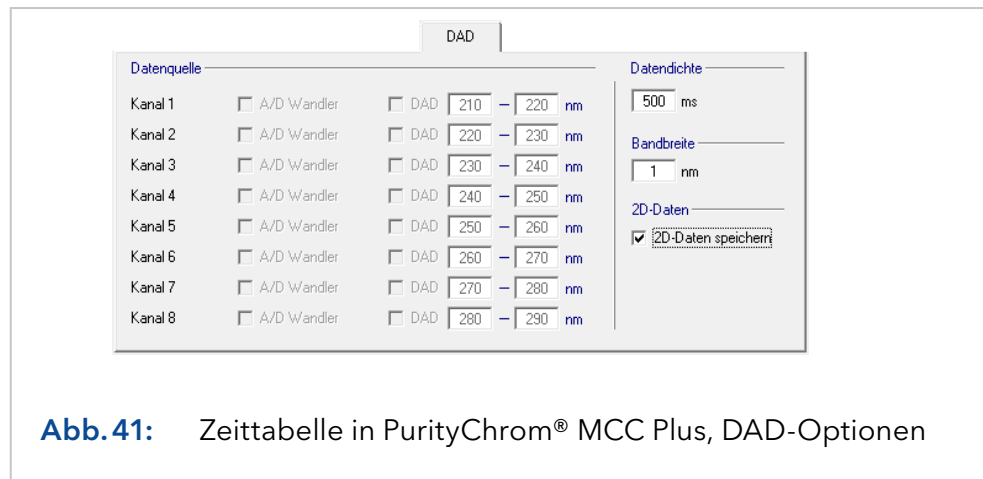
Im Abschnitt *INHALT* können Sie festlegen, welche Daten Sie in Ihren Ausdruck aufnehmen möchten. Neben dem Chromatogramm können Sie verschiedene Daten, Tabellen und Protokolle auswählen. Im Abschnitt *OPTIONEN* können Sie ankreuzen:

- Ob der Ausdruck nach jedem Lauf automatisch ausgeführt werden soll (*AUTOMATISCHER AUSDRUCK*),
- Ob ein monochromer Ausdruck erstellt werden soll (*MONOCHROMER AUSDRUCK*), und
- Ob jeder Datenkanal in einem separaten Fenster angezeigt sowie die Fraktionen hervorgehoben werden sollen.

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.

### 5.3.6 Einstellungen für Diodenarraydetektoren

Die Parameter des Diodenarraydetektors werden auf der Registerkarte DAD festgelegt.



**Abb. 41:** Zeittabelle in PurityChrom® MCC Plus, DAD-Optionen

Die Parameter des Diodenarray-Detektors werden in der Registerkarte DAD definiert. Wählen Sie unter *DATENQUELLE* entweder A/D converter board 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 eines DAD können Sie die Wellenlänge nicht über den Funktionsknopf "Wavelength" aus dem Hauptfenster auswählen. Die Auswahl der Kanäle erfolgt in diesem Fenster oder in der Chromatogrammansicht (siehe Data Channel Setting). Die Auswahl der Datenkanäle wird beim Laden der Zeittabelle automatisch übernommen. Wählen Sie die Datendichte (Slicewidth) und Bandbreite, ansonsten werden die voreingestellten Werte aus der Datei PurityChrom.ini übernommen. Eine maximale Datenrate von 10 Hz (100 ms) wird unterstützt.

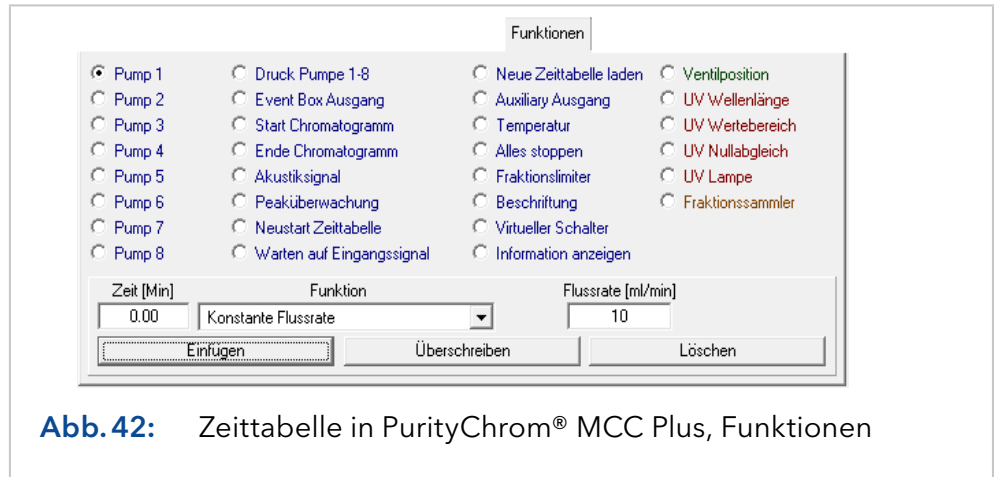
Geben Sie im Eingabefeld *DATENDICHTE* die Datenrate der DAD-Kanäle in ms ein. Der Parameter *BANDBREITE* wird zur Mittelwertbildung der Messwerte verwendet, um das Signalrauschen zu reduzieren. Bei einer Bandbreite von beispielsweise 5 nm wird das Signal jeder Wellenlänge über einen Bereich von +/- 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.

### 5.3.7 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. 42:** Zeittabelle in PurityChrom® MCC Plus, Funktionen

*PUMPE 1 / PUMPE 2/... /PUMPE 8* bestimmt die Flussrate der jeweiligen Pumpe im System. Die Änderung erfolgt stufenweise, d.h. es kann kein Durchflussgradient erzeugt werden. Die Eingaben erfolgen in ml/min. Der Konstantdruckmodus wird derzeit von KNAUER-Pumpen nicht unterstützt.

*DRUCK PUMPE* bestimmt das Verhalten der Pumpe bei den eingegebenen Werten. Der eingestellte Wert wird an die Pumpe gesendet und bleibt gespeichert. Beim Öffnen und Speichern des Setups oder beim Neustart der Software wird der eingestellte Maximal- und Minimaldruck in der Registerkarte *PRESETS* des Setups an die Pumpe gesendet.

- *MINIMUMDRUCK*: Unterbrechung der Methode und Anhalten der Pumpe, wenn der Druck 20 Sekunden lang konstant unter dem festgelegten Wert lag.
- *MAXIMUMDRUCK*: Pausieren der Methode und Anhalten der Pumpe bei Erreichen des festgelegten Druckwertes.
- *DRUCKLIMIT* (wird von KNAUER-Pumpen nicht unterstützt): Die automatische Durchflussregelung beginnt zu arbeiten, wenn der eingestellte Wert erreicht ist.

*EVENT BOX AUSGANG* wird verwendet, um einen der 12 Eventboxausgänge zu schalten. Als Parameter muss der gewünschte Eventbox-Ausgang und der zu schaltende Zustand (Aus, Ein, Puls) gewählt werden. *PULSE* bedeutet, dass das Signal ein- und wieder ausgeschaltet werden muss.

*STARTE CHROMATOGRAMM* startet die Aufnahme des Chromatogramms für die gewählten Kanäle mit der unter *DATEN* eingegebenen Datenpunktdichte (max. 60 ms). Die ersten Kanäle werden von UV-Kanälen eines Mehrwellenlängendetektors belegt, danach folgen in dieser Reihenfolge das Leitfähigkeitssignal, das pH-Signal, die UV-Signale weiterer Einzelwellenlängendetektoren und der Temperaturkanal. Die letzten Kanäle werden von FLD- oder Interface-Box-Kanälen belegt.

PurityChrom® MCC Plus unterstützt bis zu 16 Datenkanäle plus die Aufzeichnung des benutzerdefinierten Kanals (U) und des Druckkanals (P) jeder Pumpe (1...8).

*ENDE CHROMATOGRAMM* stoppt die Aufzeichnung des Chromatogramms für die ausgewählten analogen Kanäle oder, wenn *ALLE* ausgewählt ist, stoppt die Aufzeichnung des Chromatogramms für alle gestarteten analogen Kanäle.

*AKUSTIKSIGNAL* startet eine Tonwiedergabe der ausgewählten Wave-Datei mit einem Intervall von 4 Sekunden. Mit der Testtaste können Sie die Datei anhören. Der Ton wird beendet, wenn die Zeittabelle gestoppt 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 Abläufe neu gestartet wird. Als Parameter müssen die Endzeit in Minuten (*ENDE*) und der Grenzwert in mV (*WERT*) eingegeben werden. Eine Peaküberwachung ermöglicht den Neustart der Zeittabelle nur dann, wenn ein oder mehrere Peakwerte den Grenzwert überschreiten und dann während der Zeitdauer der Zeittabelle wieder unter diesen Wert fallen. Wenn eine oder mehrere Peakeigenschaften ausfallen, wird der Befehl *NEUSTART ZEITTABELLE* ignoriert, und Sie erhalten eine Fehlermeldung auf dem Bildschirm.

*NEUSTART ZEITTABELLE* wird verwendet, um die Zeittabelle automatisch mehrmals ablaufen zu lassen. Sie können den Parameter *SCHLEIFE* für eine Endloswiederholung oder *[X] NEUSTARTS* wählen, um eine bestimmte Anzahl von Wiederholungen einzugeben. Wenn alle Wiederholungen ausgeführt wurden, wird dieser Befehl ignoriert. Daher 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 in der nächsten Wiederholung auch von vorn zu beginnen.

*WARTEN AUF EINGANGSSIGNAL* unterbricht die Fortsetzung der Zeittabelle durch die Zeit (*HALTEFUNKTION*), bis der ausgewählte Eventbox Eingang, Gameport Eingang oder virtuelle Schalter den Zustand *AUS*, *EIN* oder *PULS* angenommen hat.

- *AUS*: Die Zeittabelle wird fortgesetzt, wenn das Signal ausgeschaltet bleibt.
- *EIN*: Die Zeittabelle wird fortgesetzt, wenn das Signal aktiv geschaltet wird.
- *PULS*: Die Zeittabelle wird fortgesetzt, wenn der Trigger das Signal 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* des Programmsetups (siehe Kapitel „3.1 Kommunikation“ auf Seite 12) den entsprechenden Event Box Eingang bzw. Gameport Eingang aktivieren.



Wenn Sie ein Triggerkabel verwenden, müssen Sie den zugehörigen Event Box Eingang entsprechend konfigurieren. Wenn Sie außerdem Ihre Pumpe in Abhängigkeit vom Trigger starten wollen, muss die PurityChrom.ini-Datei [Pumps → IOcontrol=1] (siehe Kapitel „21. Appendix“ auf Seite 144) geändert werden.

*NEUE ZEITTABELLE LADEN* wird verwendet, um die ausgewählte Zeittabelle zu laden und zu starten. So 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 ON oder OFF als Parameter wählen.

*TEMPERATUR* wird zur Programmierung von bis zu 8 Systemtemperaturen verwendet. 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 nicht den im PurityChrom® MCC Plus-Setup eingestellten Limiter, sondern wird als aktueller Wert übernommen.

*BESCHRIFTUNG* wird verwendet, um den Chromatogrammen manuelle Textanmerkungen hinzuzufügen.

*DER VIRTUELLE SCHALTER* wird verwendet, um bis zu 10 virtuelle Schalter zu programmieren. Dieser virtuelle Schalter ist nur eine Variable, die auf 0 oder 1 gesetzt werden kann. Sie können diesen Schalter zum Beispiel mit einer Taste in Ihrer Visualisierung verknüpfen. In Ihrer Zeittabelle können Sie mit der Funktion *WARTEN AUF EINGANGSSIGNAL* programmieren, dass Sie auf den virtuellen Schalter warten, der auf 1 gesetzt ist. 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 in der Informationsbeschriftung der Systemvisualisierung angezeigt werden sollen.

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

*UV-WELLENLÄNGE* wird verwendet, um bis zu 8 Wellenlängen der im System verwendeten UV-Detektoren zu programmieren.

*UV-WERTEBEREICH* wird verwendet, um den Bereichswert der UV-Detektoren zu programmieren.

*UV-NULLABGLEICH* wird verwendet, um die Lampen aller UV-Detektoren im System ein- oder auszuschalten (nur wenn vom Gerät unterstützt).

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

*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.

## 5.4 Verwendung der AZURA®-Pumpe P 6.1L (Version mit Hochdruckgradient) in PurityChrom®



**Hinweis:** Die Auswahl von Gradienten ist nur in PurityChrom®, aber nicht in PurityChrom® MCC Plus, möglich.

Bei Verwendung der Pumpe P 6.1L (Hochdruckgradient-Version) müssen Sie das Lösungsmittelauswahlventil separat konfigurieren, indem Sie zwei Standardventile wählen (siehe Kapitel „3.1 Kommunikation“ auf Seite 12). 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.

## 5.5 Fraktionierung mit einem Fraktionssammler

Das Fraktionieren mit einem Fraktionssammler wird in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus unterstützt.

Zuerst müssen Sie das Ventil Ihres Fraktionssammlers im PurityChrom-Setup (siehe Kapitel „3.1 Kommunikation“ auf Seite 12), die Beschriftungen (siehe Kapitel „3.4 Beschriftung“ auf Seite 17), das Totvolumen oder die Totzeit (siehe Kapitel „3.7 Totzeit/Totvolumen“ auf Seite 20) und Ihr Rack, das Sie verwenden möchten, konfigurieren (siehe Kapitel „16.4 Einrichtung des Fraktionsracks“ auf Seite 113). 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 (siehe Kapitel „3.3 Fraktionsbegrenzer (Limiter)“ auf Seite 16).

## 5.6 Fraktionieren mit einem Multipositionsventil

Das Fraktionieren mit einem Multipositionsventil wird in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus unterstützt.

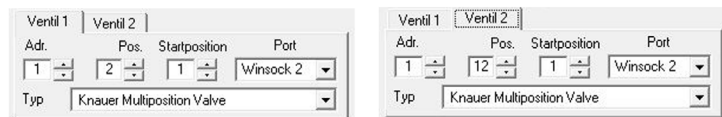
Zuerst müssen Sie im PurityChrom-Setup das Ventil (siehe Kapitel „3.1 Kommunikation“ auf Seite 12), die Beschriftungen (siehe Kapitel „3.4 Beschriftung“ auf Seite 17) und das Totvolumen oder die Totzeit (siehe Kapitel „3.7 Totzeit/Totvolumen“ auf Seite 20) konfigurieren.

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 (siehe Kapitel „3.3 Fraktionsbegrenzer (Limiter)“ auf Seite 16).

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.

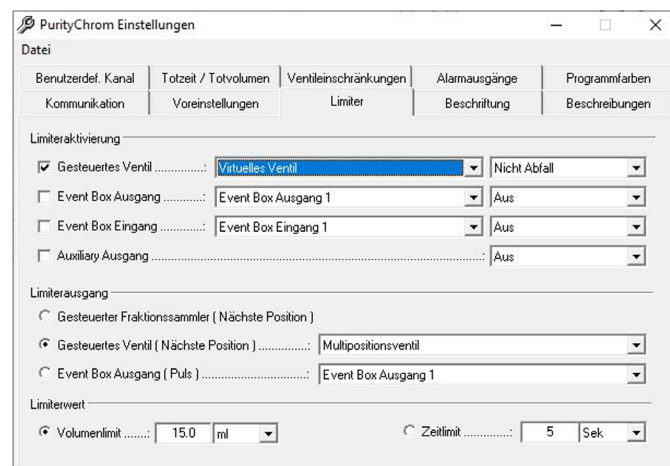
Wenn Sie möchten, dass sich das Ventil seine Position nach dem Umschalten auf *WASTE* (Abfall) merkt und Sie mit einem KNAUER-Multipositionsventil arbeiten, können Sie dazu ein virtuelles Ventil mit dem physikalischen Ventil kombinieren. Dazu müssen Sie zwei Ventile im PurityChrom® Setup konfigurieren. 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.43:** Konfigurieren von zwei Ventilen im PurityChrom®-Setup

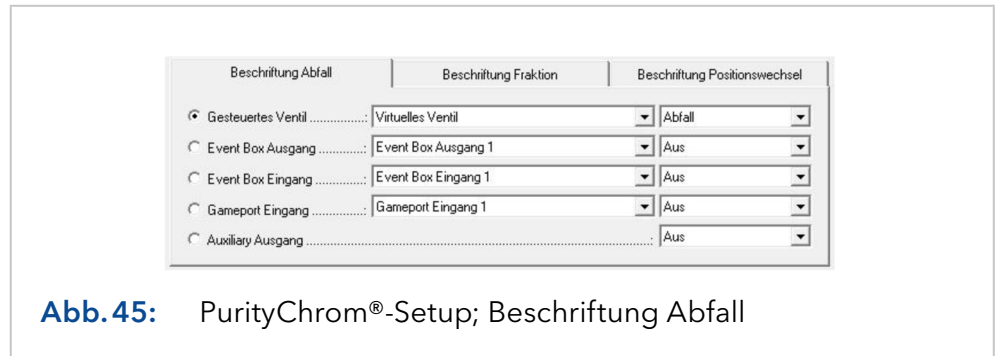
Um die Fraktionierung einzustellen, verwenden Sie das virtuelle Ventil für die Aktivierung des Limiters, wenn es sich nicht in der Abfallposition befindet, und das Multipositionsventil als Ausgangsventil des Limiters.



**Abb.44:** Konfigurieren von zwei Ventilen; Aktivieren des Limiters

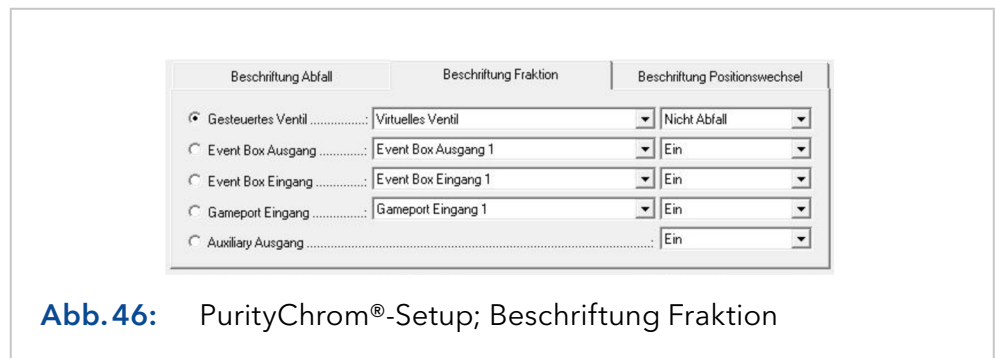
Legen Sie in der Registerkarte *BESCHRIFTUNG* die Beschriftung wie folgt fest:

- Beschriftung Abfall: Gesteuertes Ventil: Virtuelles Ventil im Abfall



**Abb. 45:** PurityChrom®-Setup; Beschriftung Abfall

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



**Abb. 46:** PurityChrom®-Setup; Beschriftung Fraktion

- Beschriftung Positionswechsel: Positionswechsel gesteuertes Ventil: Multipositionsventil



**Abb. 47:** PurityChrom®-Setup; Beschriftung Positionswechsel

Beim Schreiben einer Methode verwenden Sie den Schwellwert für die Fraktionierung und setzen bei einer Schwellwertüberschreitung das virtuelle Ventil in die Fraktionierungsposition und das Multipositionsventil in die nächste Position.



**Hinweis:** 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.

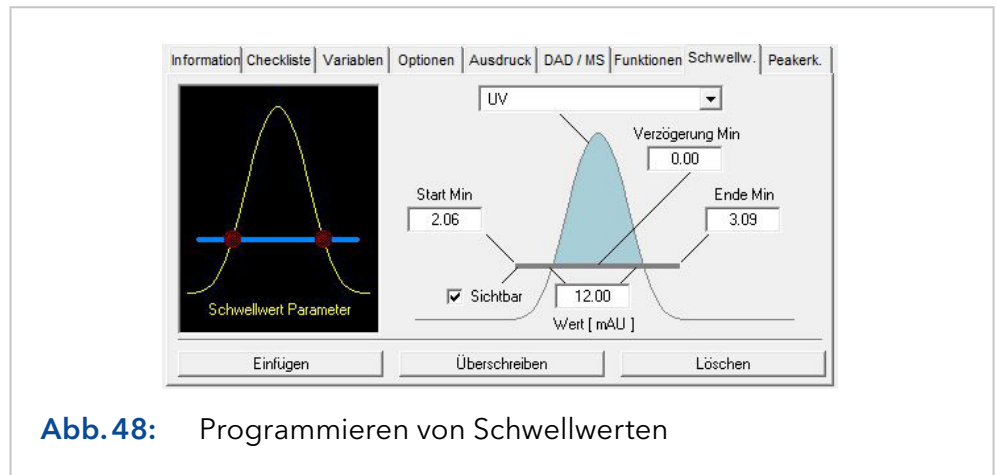
## 5.7 Programmieren von Schwellwerten

*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.

Die Programmierung von Schwellwerten kann sowohl in PurityChrom® als auch in PurityChrom® MCC Plus verwendet werden, mit nur geringfügigen Unterschieden in den Datenquellen, die für Schwellwerte verwendet werden, und den Geräten/Vorgängen, die durch einen Schwellwert ausgelöst werden:

	PurityChrom®	PurityChrom® MCC Plus
<b>Datenquellen für den Schwellwert:</b>		
Überwachte Kanäle:	Kanal 1-8 Druck Hauptpumpe Druck Nebenpumpe Volumen Hauptpumpe Volumen Nebenpumpe	Kanal 1-16 Pumpe 1 Druck Pumpe 2 Druck Pumpe 3 Druck Pumpe 4 Druck Pumpe 5 Druck Pumpe 6 Druck Pumpe 7 Druck Pumpe 8 Druck
	Benutzerdefinierter Kanal Event Box Eingang 1-12 Gameport Eingang 1-4 Virtueller Schalter 1-10 Logische Verknüpfung 1-10	
<b>Geräte und Vorgänge, die durch einen Schwellwert ausgelöst werden:</b>		

	PurityChrom®	PurityChrom® MCC Plus
PurityChrom®/ PurityChrom® MCC Plus:	Flussrate Hauptpumpe Flussrate Nebenpumpe Nächste Injektion Gradient halten Gradient fortsetzen	Flussrate Pumpe 1 Flussrate Pumpe 2 Flussrate Pumpe 3 Flussrate Pumpe 4 Flussrate Pumpe 5 Flussrate Pumpe 6 Flussrate Pumpe 7 Flussrate Pumpe 8
	Aktuellen Lauf beenden Aktuellen Lauf anhalten Aktuellen Lauf fortsetzen Aktuellen Lauf neu starten Akustisches Signal Neue Datei laden Chromatogramm starten Chromatogramm stoppen Referenzpeak setzen Beschriftung setzen Zur nächsten Zeile springen Information anzeigen	
Peakerkennung:	Aus Aus nach Peakende Ein Lot fällen	
Fraktionswechsler:	Nächste Position Position 1 ...	
Eventbox Ausgang 1-12:	AUS EIN PULS	
Virtueller Schalter 1-10:	AUS	
Logische Verknüpfung 1-10:	Eingang AND setzen auf „1“ Eingang AND setzen auf „0“ Eingang AND NOT setzen auf „1“ Eingang UND NICHT setzen auf „0“ Eingang OR setzen auf „1“ Eingang OR setzen auf „0“ Eingang XOR setzen auf „1“ Eingang XOR setzen auf „0“	
Auxiliary Ausgang:	EIN AUS	
Fraktionslimiter:	Volumen Zeit Tropfen	
Alle konfigurierten Ventile:	Nächste Position Position ...	



**Abb.48:** Programmieren von Schwellwerten

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.

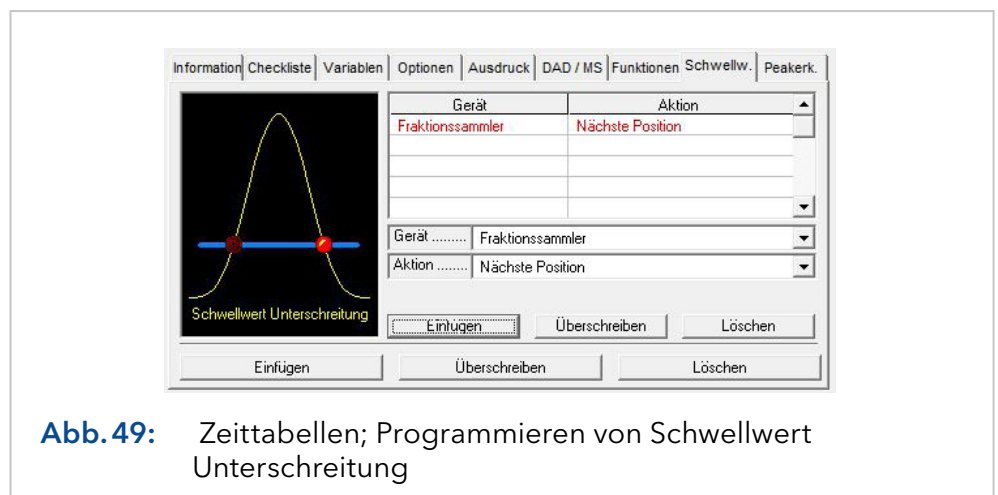
*START MIN* und *ENDE MIN*: Die Felder *START MIN* und *ENDE MIN* legen den Zeitrahmen für die Aktivität des Schwellwerts fest.

*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/SCHWELLWERT UNTERSCHREITUNG* 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.49:** Zeittabellen; Programmieren von Schwellwert Überschreitung

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.

## 5.8 Schwellwert Programmierung mit logischen Verknüpfungen



**Hinweis:** Die Option logische Verknüpfungen zu erstellen, um Signale mithilfe eines Schwellwertes miteinander zu verbinden, steht in PurityChrom® sowie in PurityChrom® MCC Plus zur Verfügung.

Als Über- und Unterschreitungsfunktionen können die Eingänge von logischen Verknüpfungen gesetzt werden. Logische Verknüpfung 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 Verknüpfungen. Für jede Verknüpfung können mehrere Eingänge von vier internen Verknüpfungen auf 0 oder 1 gesetzt werden. Die vier internen Verknüpfungen sind ODER-Verknüpfung (OR), UND-Verknüpfung (AND), NICHT-UND-Verknüpfung (AND NOT) und Exklusiv-Oder-Verknüpfung (XOR). Diese internen Verknüpfungen werden in der folgenden Reihenfolge ausgewertet: OR-AND-AND NOT-XOR. Wenn ein interne Verknüpfung das Ergebnis 0 ergibt, wird die Auswertung gestoppt, und die logische Verknüpfung wird insgesamt auf 0 gesetzt. Wenn z. B. die Eingänge des OR-Gatters ausgewertet werden und das Ergebnis 0 ist, werden die anderen logische Verknüpfungen nicht verarbeitet.

Die verschiedenen Eingänge und ein Ausgang einer logischen Verknüpfung 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-Gate
AND-Gate
NAND-Gate
XOR-Gate

**Abb. 50:** Wahrheitstabelle der logischen Verknüpfung

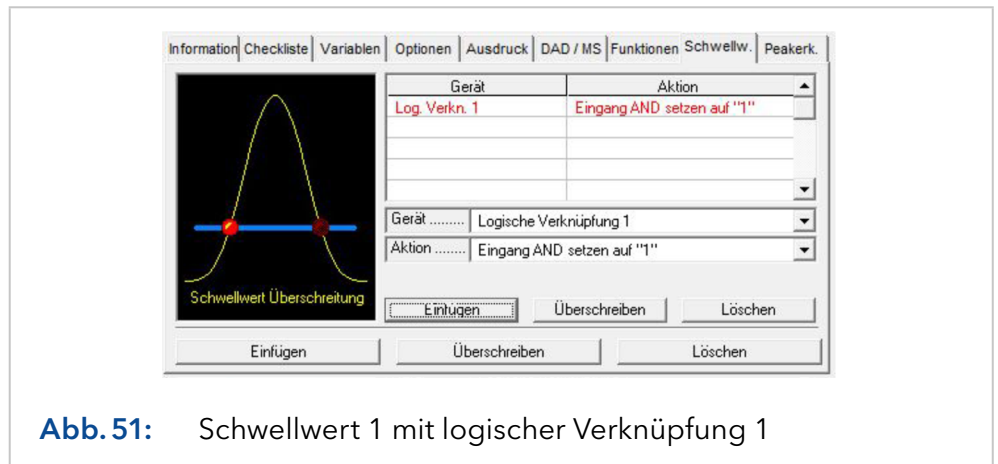
Der Ausgang der OR-Verknüpfung hat den Wert 1, wenn mindestens 1 Eingangswert 1 ist. Der Ausgang der AND-Verknüpfung ist 1, wenn alle Eingänge 1 sind. Der Ausgang der AND NOT-Verknüpfung hat den Wert 1, wenn mindestens ein Eingang den Wert 1 hat, und der Ausgang der XOR-Verknüpfung hat den Wert 1, wenn genau 1 Eingang den Wert 1 hat.



Die logischen Verknüpfungen, die zu den Ausgängen führen, sind in den Wahrheitstabellen für die vier verwendeten Verknüpfungen dargestellt.

**Beispiel:** Logische Verknüpfungen 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 der logischen Verknüpfung 1 auf 1 gesetzt, bei Unterschreiten des Schwellwertes wird der Eingang wieder auf 0 gesetzt, indem ein AND-Eingang der Verknüpfung 1 auf 1 bei „Überschreitung“ bzw. auf 0 bei „Unterschreitung“ gesetzt wird.



**Abb. 51:** Schwellwert 1 mit logischer Verknüpfung 1

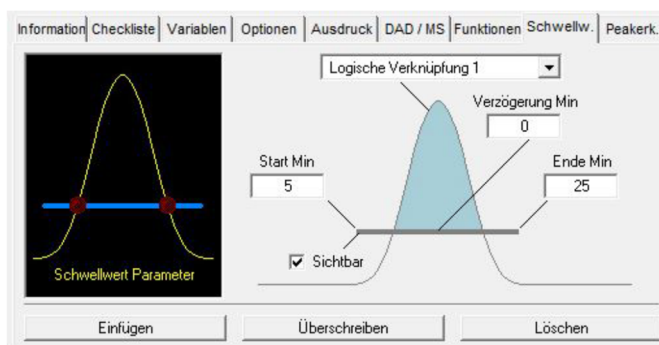
Auf die gleiche Weise wird ein weiterer Schwellwertüberwachungskanal 2 programmiert, indem ein weiterer AND-Eingang der logischen Verknüpfung 1 auf 1 (für „Überschreitung“) bzw. auf 0 (für „Unterschreitung“) gesetzt wird. Ein dritter Schwellwert überwacht Kanal 3 und setzt den AND NOT-Eingang von der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

Der Ausgang von der logischen Verknüpfung 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, welche die AND-Eingänge A und B mit dem AND NOT-Eingang C zum Ausgang Y der logischen Verknüpfung 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. 52:** Wahrheitstabelle mit kombinierten logischen Verknüpfungen

Für die Fraktionierung kann ein weiterer Schwellwert mit der logischen Verknüpfung 1 als Eingang verwendet werden.



**Abb. 53:** Logische Verknüpfung von Schwellwerten

## 5.9 Programmierung der Peakabtastung

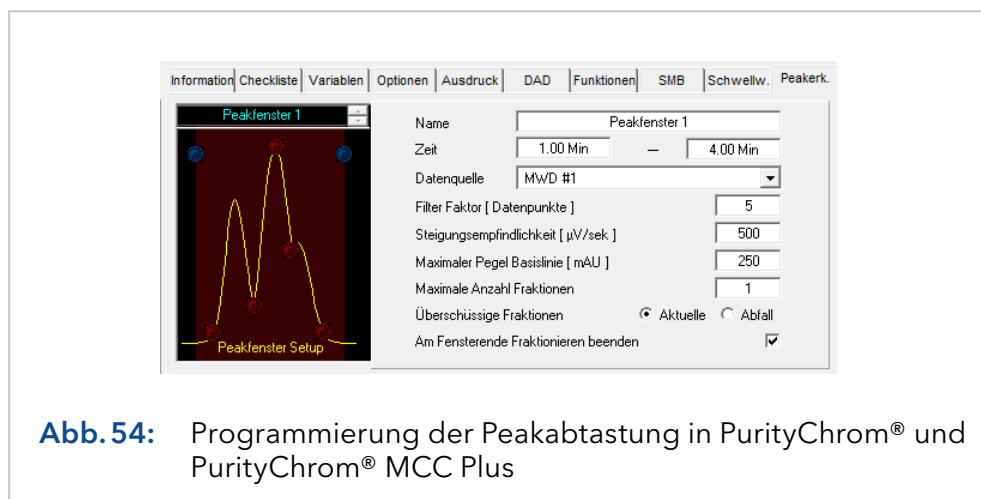
Auf der Registerkarte *PEAKERKENNUNG* („PEAKERK.“) können Sie die Peakabtastung programmieren. Die Peakabtastung ist eine Möglichkeit, eine Reihe von Gerätesteuerfunktionen auf der Grundlage automatisch erkannter Peak-Situationen auszuführen. Die Peakabtastung findet in Peakfenstern statt, deren Start- 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.

Der Graph einer Peakabtastung wird verwendet, um die Parameter auszuwählen. Klicken Sie auf den roten Punkt an der gewünschten Stelle. Nun können Sie die Eckdaten der Peakerkennung angeben.

Die Peakerkennung wird sowohl von PurityChrom® als auch von PurityChrom® MCC Plus unterstützt, mit nur geringen Unterschieden in den Optionen für getriggerte Aktionen und überwachte Kanäle:

	PurityChrom®	PurityChrom® MCC Plus
<b>Datenquellen für den Schwellwert:</b>		
Überwachte Kanäle:	Kanal 1-8 Benutzerdefinierter Kanal	Kanal 1-16
<b>Geräte und Vorgänge, die durch einen Schwellwert ausgelöst werden:</b>		
PurityChrom®/ PurityChrom® MCC Plus:	Gradient halten Gradient fortsetzen Aktuellen Lauf beenden Aktuellen Lauf anhalten Aktuellen Lauf fortsetzen Aktuellen Lauf neu starten Akustisches Signal Referenzpeak setzen	
Fraktionssammler:	Nächste Position Position 1 ...	
Eventbox Ausgang 1-12:	AUS EIN PULS	
Virtueller Schalter 1-10:	EIN AUS	
Logische Verknüpfung 1-10:	Eingang AND setzen auf „1“ Eingang AND setzen auf „0“ Eingang AND NOT setzen auf „1“ Eingang UND NICHT setzen auf „0“ Eingang OR setzen auf „1“ Eingang OR setzen auf „0“ Eingang XOR setzen auf „1“ Eingang XOR setzen auf „0“	
Auxiliary Ausgang:	EIN AUS	
Alle konfigurierten Ventile:	Nächste Position Position ...	



**Abb. 54:** Programmierung der Peakabtastung in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus

**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.

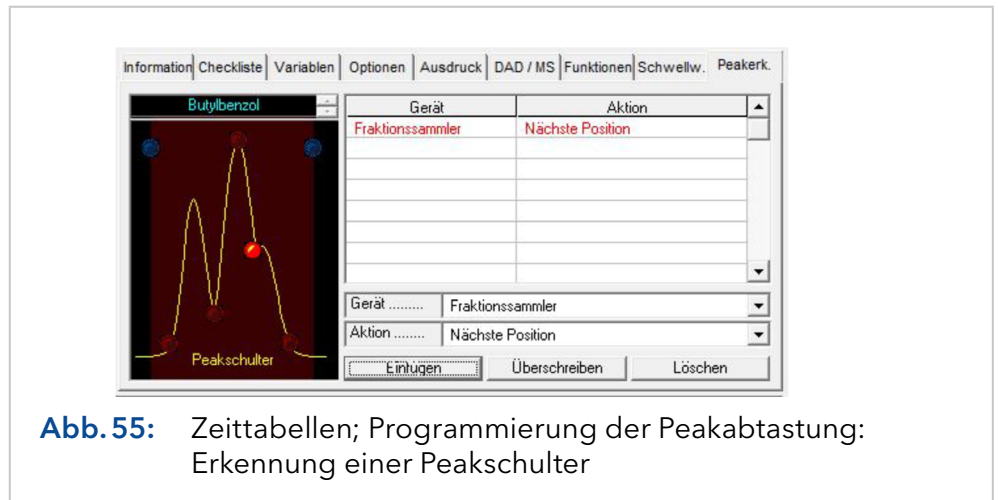
**STEIGUNGSEMPFINDLICHKEIT:** Die *STEIGUNGSEMPFINDLICHKEIT* gibt die Größe der Steigung an, ab welcher der Beginn eines Peaks erkannt wird.

**MAXIMALER PEGEL BASISLINIE:** Dieser Parameter 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, welche 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. 55:** Zeittabellen; Programmierung der Peakabtastung: Erkennung einer Peakschulter

Zum Programmieren der Peakabtafstfunktionen 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:

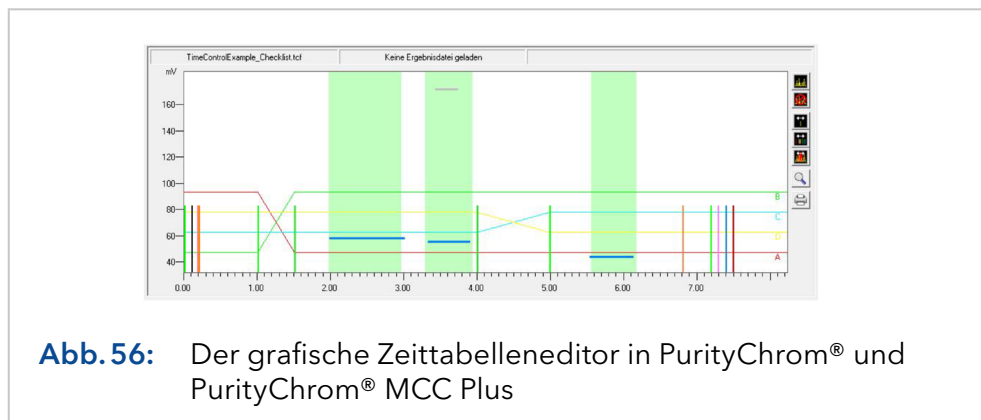
- *PEAKFENSTER START* (blauer Punkt auf der linken Seite) ist der Zeitpunkt, an dem ein Peakfenster beginnt.
- *PEAKFENSTER ENDE* (blauer Punkt auf der rechten Seite) ist der Zeitpunkt, an dem ein Peakfenster endet.
- *PEAKSTART* ist der Beginn eines Peaks, wie er von der Peakabtastung erkannt wird.
- *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 Peakanfanges ist unabhängig von der *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.

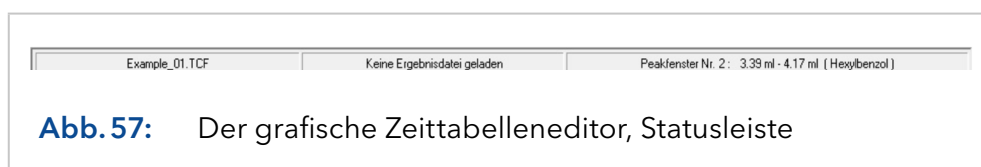
## 5.10 Grafischer Editor für eine Zeittabelle



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 Peakabastung) 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. Gradienten können nur in PurityChrom® nicht aber in PurityChrom® MCC Plus programmiert und 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.





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. Ihre Funktionen sind hier in der gleichen Reihenfolge aufgelistet, in der sie auf dem Bildschirm erscheinen:

Taste	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.
	<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.

Taste	Funktion
	<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>DRUCK</i> druckt die gezeigte Grafik aus.</p>



## 6. Erstellen von Sequenztabelle

### 6.1 Allgemein

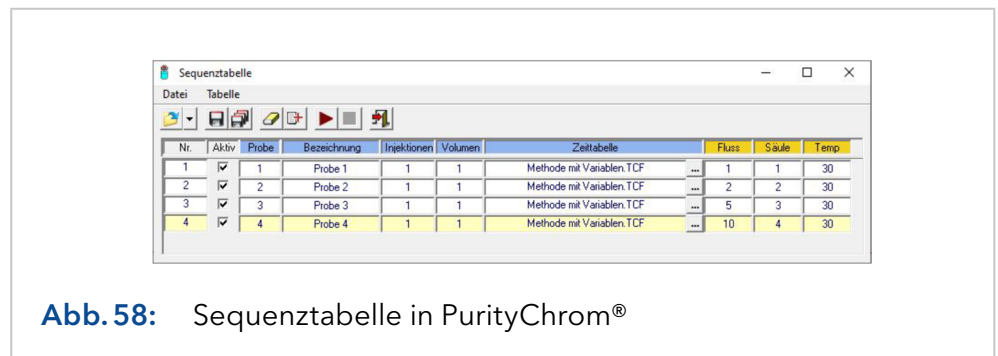
Sie können den Sequenztabelle-Editor über die Funktionstaste oder den Menüpunkt „Sequenztabelle erstellen / bearbeiten“ im Hauptfenster öffnen.

Eine Sequenztabelle verarbeitet eine Folge von Zeittabellen. Diese Zeittabellen können in PurityChrom® die Autosampler-Injektion über den Befehl „Autosampler Inject“ verwenden. Bei Zeittabellen mit Autosampler-Injektion können die Probenposition, die Anzahl der Injektionen und das Injektionsvolumen des Autosamplers in der Sequenztabelle programmiert werden. Die Sequenztabelle ist sowohl in PurityChrom® als auch PurityChrom® MCC Plus verfügbar, jedoch wird in der MCC Plus Version keine Autosampler-Steuerung ermöglicht.

Wenn Zeittabellen, 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.






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

### 6.2 Erstellen einer 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.

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

Nach Auswahl einer Zeittabelle (.tcf-Datei) in einer Sequenztabellezeile 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 Sequenztabellezeile eingegeben werden. Dies ermöglicht eine Modifikation der Zeittabelle innerhalb der Sequenztabelle.

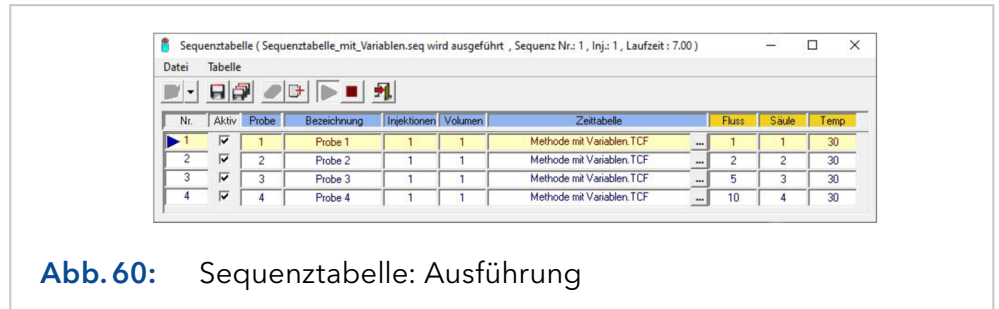
Ein Klick mit der rechten Maustaste öffnet ein Menü mit Einträgen zum Kopieren, Einfügen und Löschen von Zeilen in die Sequenztabelle.



Der Menüpunkt „Tabelle - Probengebertabelle importieren“ öffnet unter PurityChrom® ein Dialogfenster zur Auswahl einer Autosampler-Kontrolldatei (.acf). Die Zeilen der Probengebertabelle werden in die Sequenztabelle importiert. Diese Funktion ist in PurityChrom® MCC Plus jedoch nicht verfügbar, da Autosampler nicht unterstützt werden.

## 6.3 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.



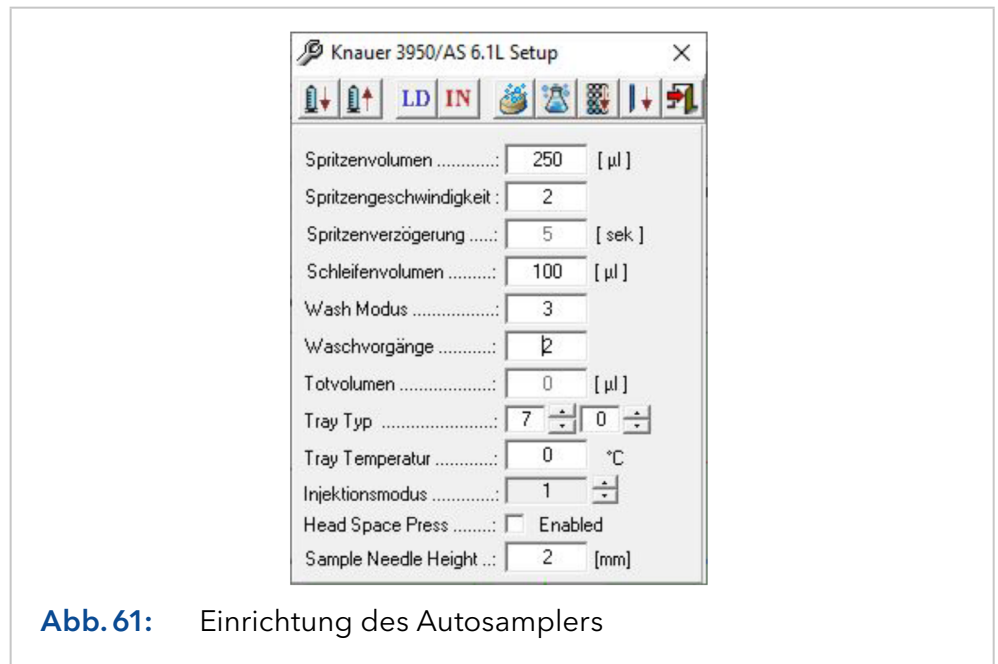
## 7. Erstellen von Probengebertabellen

### 7.1 Allgemein



**Hinweis:** Die Steuerung von Autosamplern ist in PurityChrom® MCC Plus nicht unterstützt. Daher sind die in diesem Kapitel erläuterten Funktionalitäten auch nur in der PurityChrom® zu finden.




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



**Abb. 61:** 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 Injektionsnadel.
	<i>TRANSPORT WASH</i> initialisiert das Spülen mit Transportflüssigkeit.

Menü	Funktion
	<i>TABLETT VORFAHREN</i> bewegt das Probenfach.
	<i>NADEL AUSTAUSCHEN</i> fährt die Injektionsnadel in die Position zum manuellen Austausch der Nadel.
	<i>BEENDEN</i> schließt das Fenster

Die Parameter befinden sich unterhalb der Symbolleiste des Editors:


Parameter	Beschreibung
<b>Spritzenvolumen</b>	Das Volumen der Autosampler-Spritze
<b>Spritzengeschwindigkeit</b>	1: langsam 2: mittel 3: schnell
<b>Spritzenverzögerung</b>	Voreinstellung bei 5 Sekunden; nicht änderbar
<b>Schleifenvolumen</b>	Volumen der Probenschleife.
<b>Wash Modus</b>	0: Waschzyklus ist ausgeschaltet 2: zwischen Probenvials 3: zwischen Injektionen
<b>Waschvorgänge</b>	Anzahl an Waschzyklen (1-3 Mal).
<b>Totvolumen</b>	Nicht änderbar für KNAUER-Autosampler.
<b>Tray-Typ</b>	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)*  <b>Hinweis:</b> Bitte beachten Sie, dass die Vials 86 und 87 in Rack 6 (84+3) nicht verwendet werden können. Das Vial 85 wird für Transport Wash verwendet, wenn „TransportLiquid=1“ in der Datei PurityChrom.ini (siehe Kapitel „21. Appendix“ auf Seite 144) ausgewählt ist.

Parameter	Beschreibung
Tray Temperatur	0 °C: aus Probentellerkühlung für KNAUER 3950/AS 6.1L mit Kühlungsoption: 4 - 40 °C
Injektionsmodus	0: Kein Modus 1: Partielle Schleifenfüllung (Partial Loop Fill) 2: Volle Schleifenfüllung (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.  <b>Hinweis:</b> 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 ein 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.

Achten Sie darauf, dass die Nadelwaschlösung an den rechten Anschluss des Spritzenventils und die Transport-Waschlösung an den linken Anschluss des Spritzenventils angeschlossen wird.

Die Kombinationen der verschiedenen Trays und die Nummerierung der einzelnen Vial-Positionen entnehmen Sie bitte dem Anhang (siehe Kapitel „21.4 Kombination von Autosampler Tray-Typen“ auf Seite 173).

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. Unter PurityChrom® MCC Plus kann kein Autosampler gesteuert werden.

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 Vial-Nummern, 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:

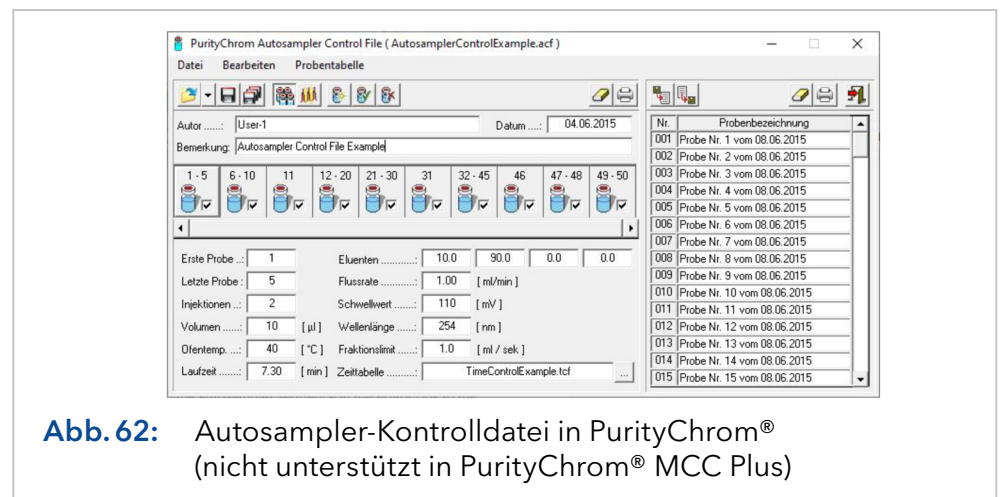
- *ELUENTEN* (Fließmittelzusammensetzung für die Pumpe)
- *FLUSSRATE* (Flussrate für die Pumpen)
- *SCHWELLWERT* (Niveau eines programmierten Schwellwertes)
- *WELLENLÄNGE* (Wellenlänge des UV-Detektors)
- *FRAKTIONSLIMIT* (maximale Größe der erhaltenen Fraktionen)

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 den Befehl *ALLES STOPPEN* 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.

## 7.2 Erstellen einer Probengebertabelle

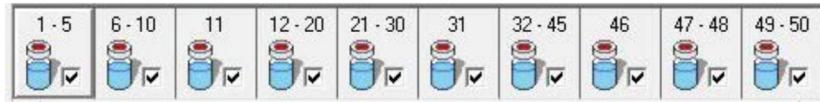


Die Symbolleiste des Editors befindet sich im oberen Teil des Fensters und besitzt folgende Funktionen:

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> (*rfp). <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.
	<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“.
	<i>STACKED INJECTION ENABLE / DISABLE</i> aktiviert bzw. deaktiviert gestapelte Injektionen in der Autosampler-Steuerdatei.
	<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-Steuerdatei.
	<i>BEENDEN</i> schließt das 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. 63:** 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 Vial-Nummern angezeigt. Die Sequenzsymbole können angekreuzt werden, um sie für die Ausführung zu aktivieren oder zu deaktivieren. 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  $\mu\text{l}$  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.

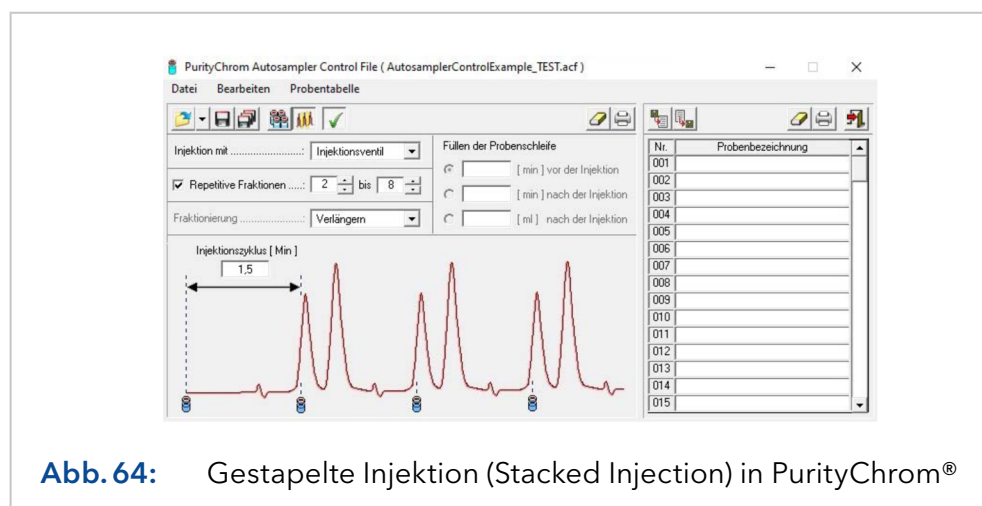
*WELLENLÄNGE* gibt eine Wellenlänge an, die in den Zeilen zur Wellenlänge in der Zeittabelle mit dem Wellenlängenparameter *AS* eingegeben wurde.

*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.

### 7.3 Gestapelte Injektion (Stacked Injection)

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 Probenabelle 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.



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 (Schwellwert, Peakabtastung) verlängert oder kopiert 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*.

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	4.90 Min / 25.00 mAU
6.00	Ende Chromatogramm	Alle gestarteten Kanäle
6.10	Alles stoppen	

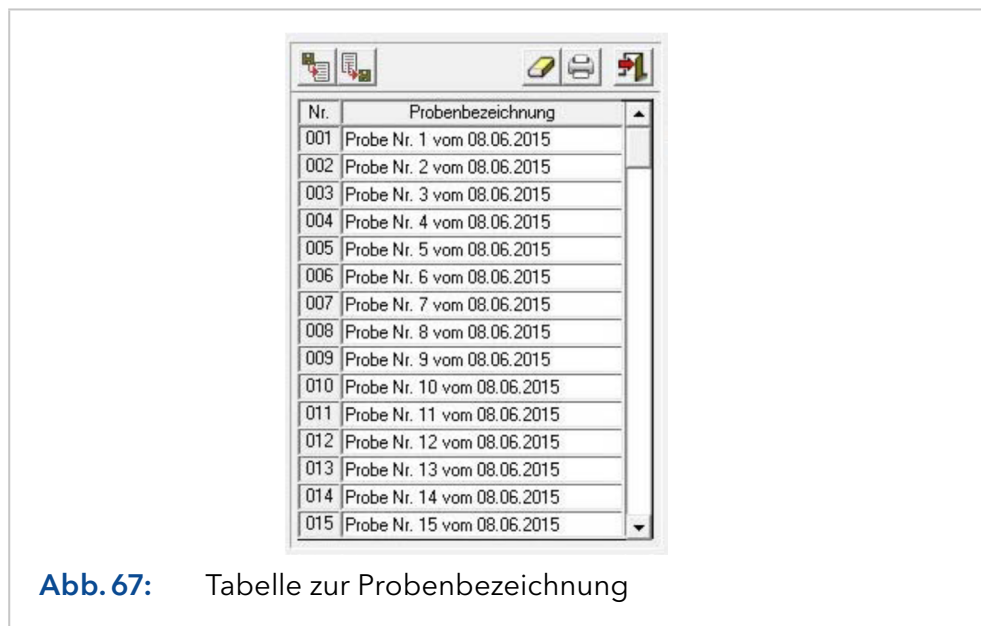
**Abb. 65:** Ursprüngliche Zeittabelle

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. 66:** Erweiterte Zeittabelle mit gestapelter Injektion (stacked injection)

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

## 7.4 Erstellen einer Probenbezeichnungstabelle







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.

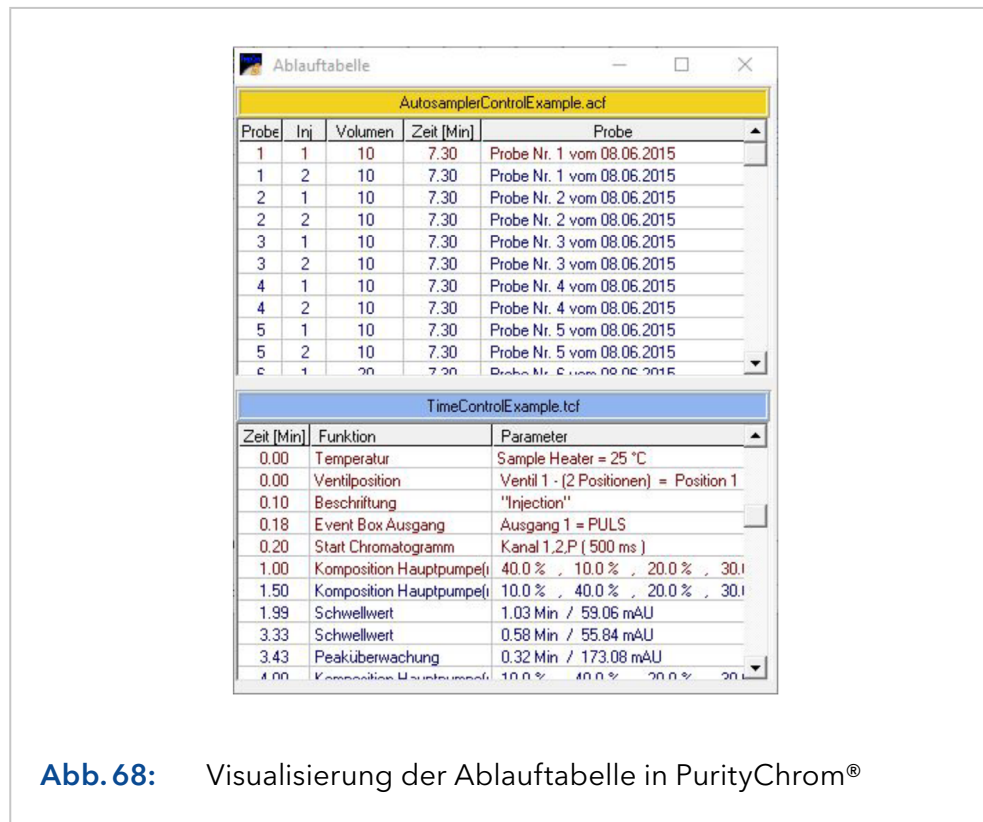
Die Anzahl der Zeilen in der Tabelle kann in der Datei PurityChrom.ini mit dem Befehl *[MAXIMUMSAMPLES]* eingestellt werden. Standardmäßig sind 100 Probenbezeichnungen möglich.

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.

## 8. Visualisierung der Ablauftabelle

### 8.1 Visualisierung der Ablauftabelle in PurityChrom®

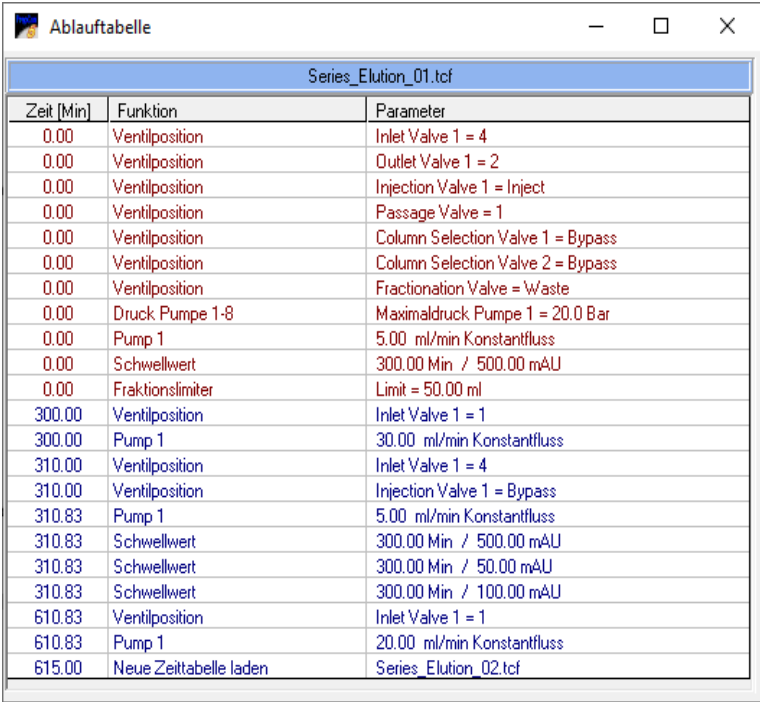


**Abb. 68:** Visualisierung der Ablauftabelle in PurityChrom®

Der Funktionsknopf und der Menüpunkt **ABLAUFTABELLE**  im Hauptfenster öffnen ein neues Fenster, in dem Sie die Zeit- und Probengebertabellen 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 Probengebertabelle 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.

## 8.2 Visualisierung der Ablauftabelle in PurityChrom® MCC Plus



Series_Elution_01.tcf		
Zeit [Min]	Funktion	Parameter
0.00	Ventilposition	Inlet Valve 1 = 4
0.00	Ventilposition	Outlet Valve 1 = 2
0.00	Ventilposition	Injection Valve 1 = Inject
0.00	Ventilposition	Passage Valve = 1
0.00	Ventilposition	Column Selection Valve 1 = Bypass
0.00	Ventilposition	Column Selection Valve 2 = Bypass
0.00	Ventilposition	Fractionation Valve = Waste
0.00	Druck Pumpe 1-8	Maximaldruck Pumpe 1 = 20.0 Bar
0.00	Pump 1	5.00 ml/min Konstantfluss
0.00	Schwellwert	300.00 Min / 500.00 mAU
0.00	Fraktionslimiter	Limit = 50.00 ml
300.00	Ventilposition	Inlet Valve 1 = 1
300.00	Pump 1	30.00 ml/min Konstantfluss
310.00	Ventilposition	Inlet Valve 1 = 4
310.00	Ventilposition	Injection Valve 1 = Bypass
310.83	Pump 1	5.00 ml/min Konstantfluss
310.83	Schwellwert	300.00 Min / 500.00 mAU
310.83	Schwellwert	300.00 Min / 50.00 mAU
310.83	Schwellwert	300.00 Min / 100.00 mAU
610.83	Ventilposition	Inlet Valve 1 = 1
610.83	Pump 1	20.00 ml/min Konstantfluss
615.00	Neue Zeittabelle laden	Series_Elution_02.tcf

**Abb. 69:** Visualisierung der Ablauftabelle in PurityChrom® MCC Plus


Die Funktionstaste und der Menüpunkt *ABLAUFABELLE* im Hauptfenster von PurityChrom MCC Plus öffnet ein neues Fenster, in dem Sie die Zeittabelle im Überblick dargestellt bekommen. Wenn Sie eine Zeittabelle ausführen, werden alle bereits abgearbeiteten Zeilen rot dargestellt, wohingegen die noch bevorstehenden Zeilen blau gehalten sind. Die blaue Kopfzeile über der Tabelle zeigt den Namen der geladenen Zeittabelle an.



**Hinweis:** Autosampler-Kontrolldateien werden von PurityChrom® MCC Plus nicht unterstützt und können daher in diesem Fenster nicht angezeigt werden.

## 9. Datenaufzeichnung (Analyse)

### 9.1 Allgemein

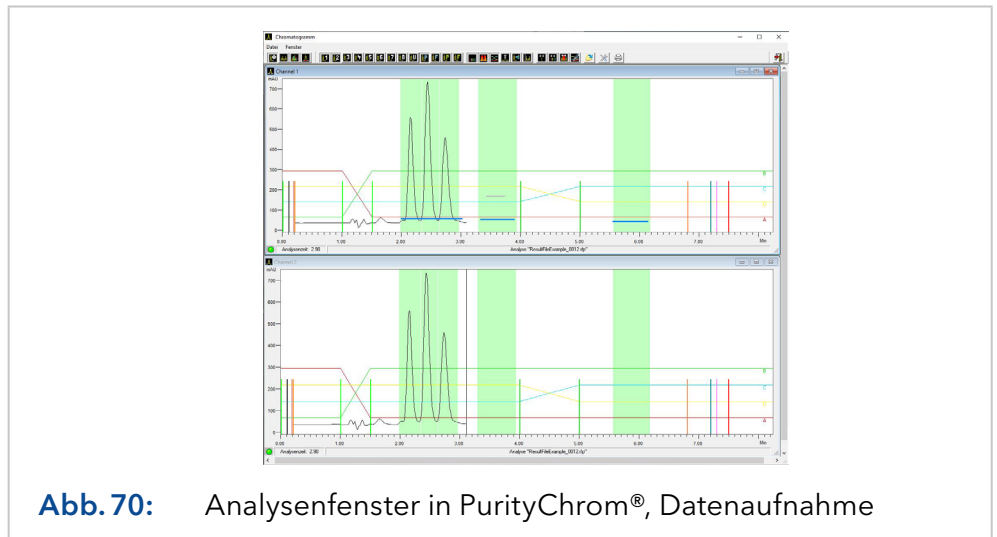
Der Funktionsknopf und der Menüpunkt *CHROMATOGRAMM*  im Hauptfenster öffnen das Chromatogrammfenster. Der erste Bereich ist die Datenaufnahme (Analyse).

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 Peaküberwachung 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 Zeittableneditor haben Sie auch in den Datenaufnahmefenstern die Möglichkeit, Zeittablenfunktionen 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.

### 9.2 Datenaufnahme in PurityChrom®




Zusätzlich zu den anderen grafischen Darstellungen der Zeittabelle wird der genutzte Lösungsmittel-Gradient in PurityChrom® angezeigt und kann während eines Laufes manuell verändert werden.










Die Schaltflächen *100% LÖSEMITTEL A-D* und *FLUSSRATE* im Hauptfenster können während eines Laufs aktiviert werden, indem in der Datei *PurityChrom.ini* der Eintrag `[Pumps] ParameterChange=1` (siehe Kapitel „21. Appendix“ auf Seite 144) 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 (siehe Kapitel „10.2 Funktionstasten“ auf Seite 90).

Im Datenaufzeichnungsfenster von PurityChrom® stehen die folgenden Funktionsschaltflächen zur Verfügung:

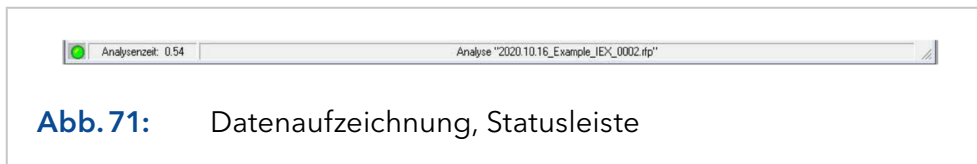
Menü	Funktion
	<i>KANAL...</i> wird verwendet, um ein Datenkanalfenster zu öffnen oder zu schließen. Es werden nur die Schaltflächen für die Kanäle angezeigt, die ausgewählt werden können. Die Schaltfläche <i>U</i> gehört zu einem benutzerdefinierten Kanal (siehe Kapitel „3.6 Benutzerdefinierter Kanal“ auf Seite 19). 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>SPEKTRUMKANAL</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 programmierte Eluentenzusammensetzung ein- oder auszublenden.







Menü	Funktion
	<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.
	<i>ABGELAUFENE ZEITLINIE ANZEIGEN</i> wird verwendet, um die vertikale Linie, welche die verstrichene Zeit anzeigt, ein- oder auszublenden.
	<i>EINZELFUNKTION VERSCHIEBEN</i> wird verwendet, um einzelne Funktionen zu verschieben (siehe Kapitel „5.10 Grafischer Editor für eine Zeittabelle“ auf Seite 63). Änderungen werden sofort im aktuellen Lauf wirksam, und nach dem Verschieben dieser Funktionen werden Sie gefragt, ob sie auch in der Zeittabelle gespeichert werden sollen.
	<i>FUNKTIONSBLOCK VERSCHIEBEN</i> wird verwendet, um mehrere Funktionen zu verschieben (siehe Kapitel „5.10 Grafischer Editor für eine Zeittabelle“ auf Seite 63). Änderungen werden sofort im aktuellen Lauf wirksam, und nach dem Verschieben dieser Funktionen werden Sie gefragt, ob sie auch in der Zeittabelle gespeichert werden sollen.
	<i>PEAKFENSTER ERSTELLEN/BEARBEITEN</i> wird verwendet, um Peakfenster zu erstellen und zu bearbeiten (siehe Kapitel „5.10 Grafischer Editor für eine Zeittabelle“ auf Seite 63). Änderungen werden sofort im aktuellen Lauf wirksam. Nach dem Abwählen dieser Funktion werden Sie gefragt, ob die Änderungen auch in der Zeittabelle gespeichert werden sollen.
	<i>GRADIENTENVERLAUF BEARBEITEN</i> öffnet ein Fenster, in dem Sie den aktuellen Elutionsgradienten bearbeiten können. Änderungen werden sofort im aktuellen Lauf wirksam, und nach dem Schließen des Fensters werden Sie gefragt, ob diese auch in der Zeittabelle gespeichert werden sollen. PurityChrom® MCC Plus unterstützt keine Gradientenprogrammierung.
	<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 (siehe Kapitel „9.4 Datenkanal-Einstellungen in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus“ auf Seite 87).

Menü	Funktion
	<i>AUTOMATISCHER DRUCK</i> aktiviert oder deaktiviert den automatischen Druck des Berichts nach dem letzten Lauf.

### 9.2.1 Statusleiste

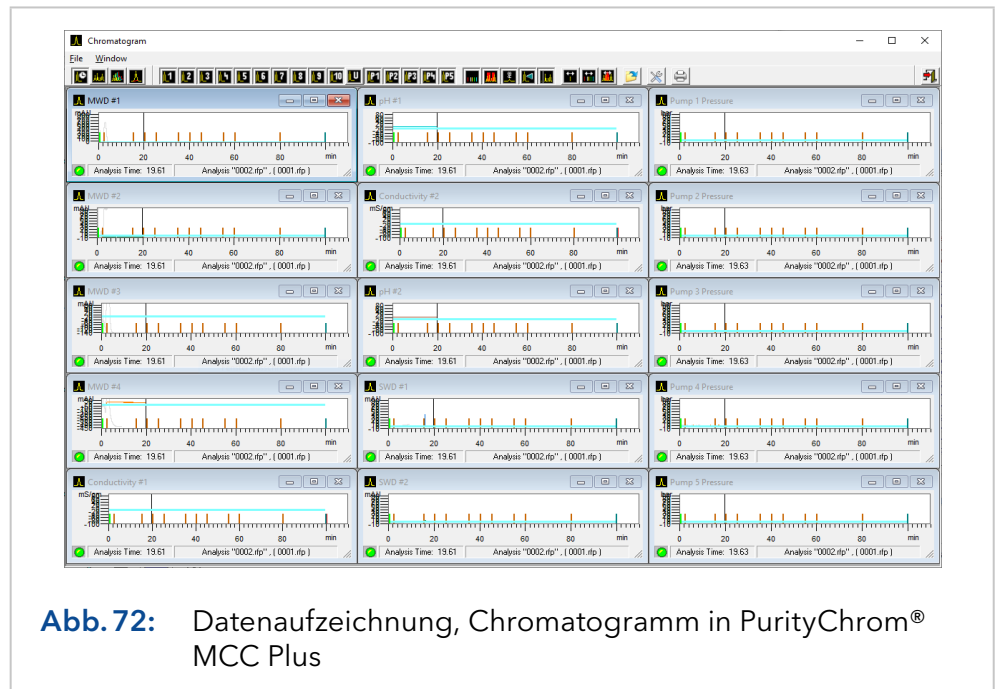


Der Status der Datenaufzeichnung wird in der linken unteren Ecke der Statusleiste angezeigt. Die Bedeutung der Symbole ist wie folgt:

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

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




## 9.3 Datenaufzeichnung in PurityChrom® MCC Plus












**Abb. 72:** Datenaufzeichnung, Chromatogramm in PurityChrom® MCC Plus

Das Analysenfenster in PurityChrom® MCC Plus zeigt die grafische Darstellung der Zeittabelle, die aktuelle Chromatogrammspur, programmierte Peakfenster und die aktuellen Chromatogrammbeschriftungen, während eine Zeittabelle läuft.

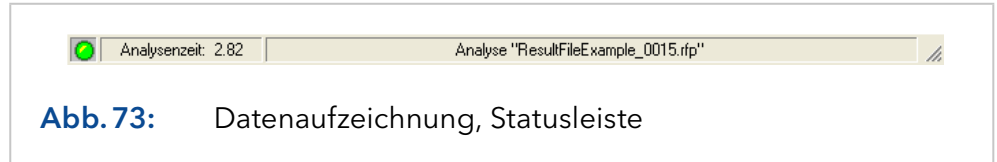
Die folgenden Funktionstasten sind in PurityChrom® MCC Plus verfügbar:

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 (siehe Kapitel „3.6 Benutzerdefinierter Kanal“ auf Seite 19). 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>SPEKTRUMKANAL</i> wird verwendet, um das Spektrumfenster des DAD ein- oder auszublenden.

Menü	Funktion
	<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>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.
	<i>ABGELAUFENE ZEITLINIE ANZEIGEN</i> wird verwendet, um die vertikale Linie, welche die verstrichene Zeit anzeigt, ein- oder auszublenden.
	<i>EINZELFUNKTION VERSCHIEBEN</i> wird verwendet, um einzelne Funktionen zu verschieben (siehe Kapitel „5.10 Grafischer Editor für eine Zeittabelle“ auf Seite 63). Änderungen werden sofort im aktuellen Lauf wirksam, und nach dem Verschieben dieser Funktion werden Sie gefragt, ob sie auch in der Zeittabelle gespeichert werden sollen.
	<i>FUNKTIONSBLOCK VERSCHIEBEN</i> wird verwendet, um mehrere Funktionen zu verschieben (siehe Kapitel „5.10 Grafischer Editor für eine Zeittabelle“ auf Seite 63). Änderungen werden sofort im aktuellen Lauf wirksam, und nach dem Verschieben dieser Funktionen werden Sie gefragt, ob sie auch in der Zeittabelle gespeichert werden sollen.
	<i>PEAKFENSTER ERSTELLEN/BEARBEITEN</i> wird verwendet, um Peakfenster zu erstellen und zu bearbeiten (siehe Kapitel „5.10 Grafischer Editor für eine Zeittabelle“ auf Seite 63). 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>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 (siehe Kapitel „9.4 Datenkanal-Einstellungen in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus“ auf Seite 87) beschrieben.





Menü	Funktion
	<i>AUTOMATISCHER DRUCK</i> aktiviert oder deaktiviert den automatischen Druck des Berichts nach dem letzten Lauf.

### 9.3.1 Statusleiste



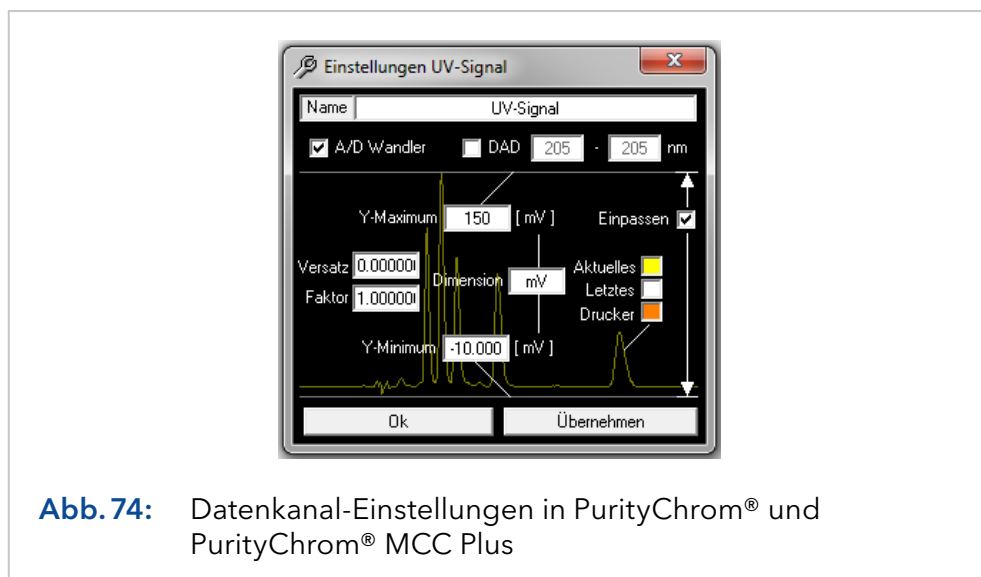
**Abb. 73:** Datenaufzeichnung, Statusleiste

Der Status der Datenaufzeichnung wird in der linken unteren Ecke der Statusleiste angezeigt. Die Bedeutung der Symbole ist wie folgt:

Status	Bedeutung
	<i>BASELINE</i> (Grundlinie wird angezeigt)
	<i>READY</i> (Datenkanal ist in Benutzung, aber Datenaufnahme hat noch nicht begonnen)
	<i>CHROMATOGRAM RUNNING</i> (Datenaufnahme ist aktiv)
	<i>CHROMATOGRAM FINISHED</i> (Datenaufnahme ist beendet)

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

## 9.4 Datenkanal-Einstellungen in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus



**Abb. 74:** Datenkanal-Einstellungen in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus

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 (spezielle Lizenz unter PurityChrom® nötig)

**MS:** Für die Daten des MS (spezielle Lizenz unter PurityChrom® nötig; nicht unterstützt in PurityChrom® MCC Plus)

**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. KNAUER Pumpen zeigen z. B. das Drucksignal in PurityChrom® in bar an. Wenn Sie das Drucksignal in MPa angezeigt bekommen möchten, ist ein Faktor von 0,1 erforderlich.

**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.

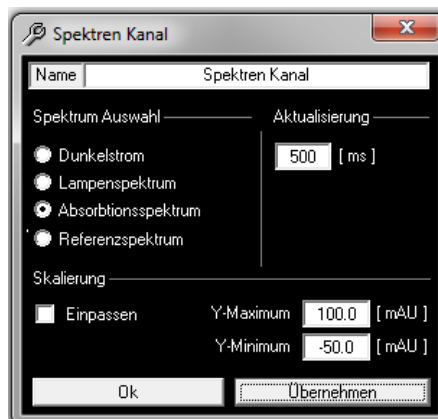
Wählen Sie den Typ des angezeigten Spektrums im Setup-Fenster für das DAD-Spektrum unter *SPEKTRUM AUSWAHL*.

*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.



**Abb. 75:** Datenkanal-Einstellungen, DAD-Spektrum-Kanal

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


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

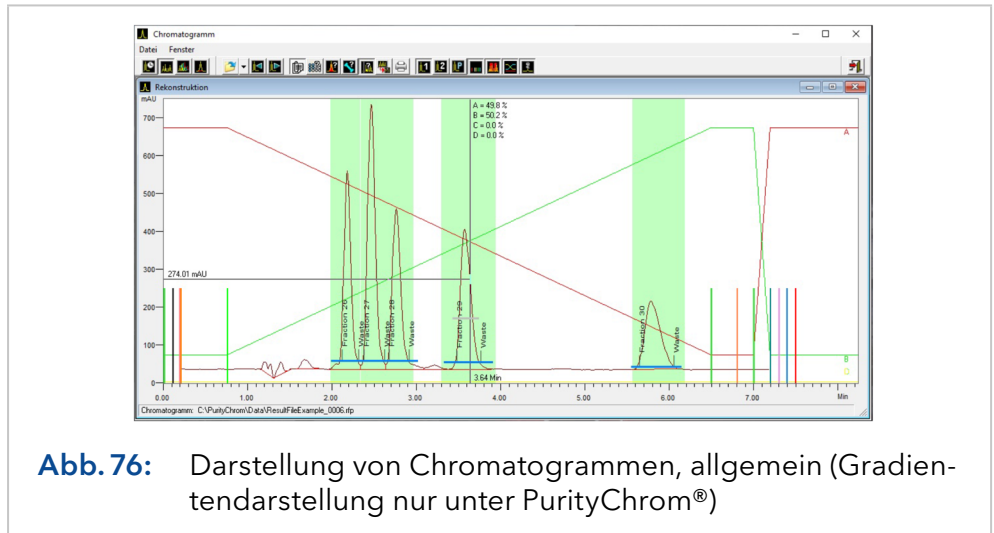
*EINPASSEN*: Diese Option passt die Skalierung automatisch entsprechend dem Signalmaximum und -minimum an.

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

# 10. Rekonstruktion von Chromatogrammen in PurityChrom® and PurityChrom® MCC Plus

## 10.1 Allgemein

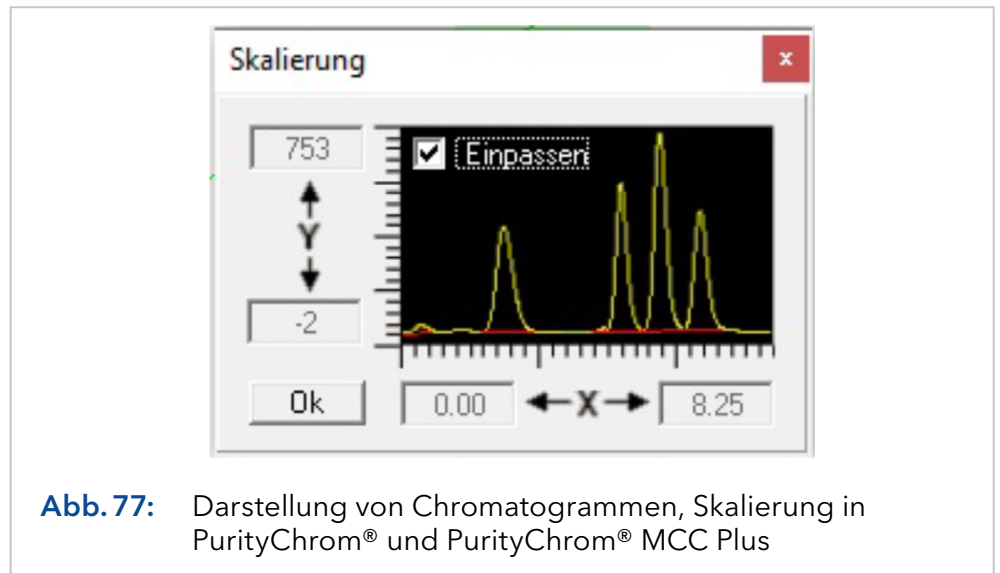
Der Funktionsknopf und der Menüpunkt *CHROMATOGRAMM*  im Hauptfenster öffnen das Chromatogrammfenster. Der gleiche Button im Chromatogrammfenster ermöglicht das Öffnen bereits aufgenommener Chromatogramme (Rekonstruktion).



Sie können Ergebnisdateien in das Rekonstruktionsfenster laden und anzeigen. Es können Chromatogramme, Zeittabellenfunktionen, Peakfenster, Gradienten (nur in PurityChrom®), 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 Chromatogramm.














**Abb. 77:** Darstellung von Chromatogrammen, Skalierung in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus


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.

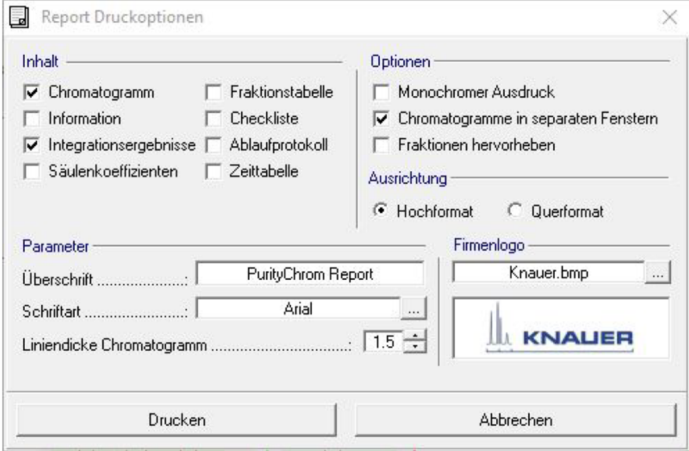
Die Statusleiste am unteren Rand des Fensters zeigt den Pfad und den Namen der geladenen Ergebnisdatei an. Wenn Sie den Mauszeiger über eine Zeittabellenfunktion bewegen, werden die Zeit- und Parameterwerte dieser Funktion in der Statusleiste angezeigt.

## 10.2 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.

Menü	Funktion
	<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 zusätzlich zu den programmierten Funktionen 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 Säulenkenwerte 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 in der PurityChrom.ini-Datei der Eintrag [IntegrationPresets → TailingFactor=1] zu modifizieren (siehe Kapitel „21. Appendix“ auf Seite 144).
	<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 (siehe Kapitel „10.3 Rekonstruktion von DAD Spectra unter PurityChrom®“ auf Seite 93).
	<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>SLICE FILE (.sli)</i> für den Export nach ChromStar.

Menü	Funktion
	<p><i>ERGEBNISDATEI DRUCKEN</i> wird verwendet, um die geladene Ergebnisdatei zu drucken. Nach Anwahl dieser Funktion öffnet sich ein Fenster, in dem Sie Elemente der Ergebnisdaten aktivieren oder deaktivieren können, die auf dem Ausdruck erscheinen sollen (siehe Kapitel „5.3.5 Optionen für den Ausdruck“ auf Seite 46).</p>




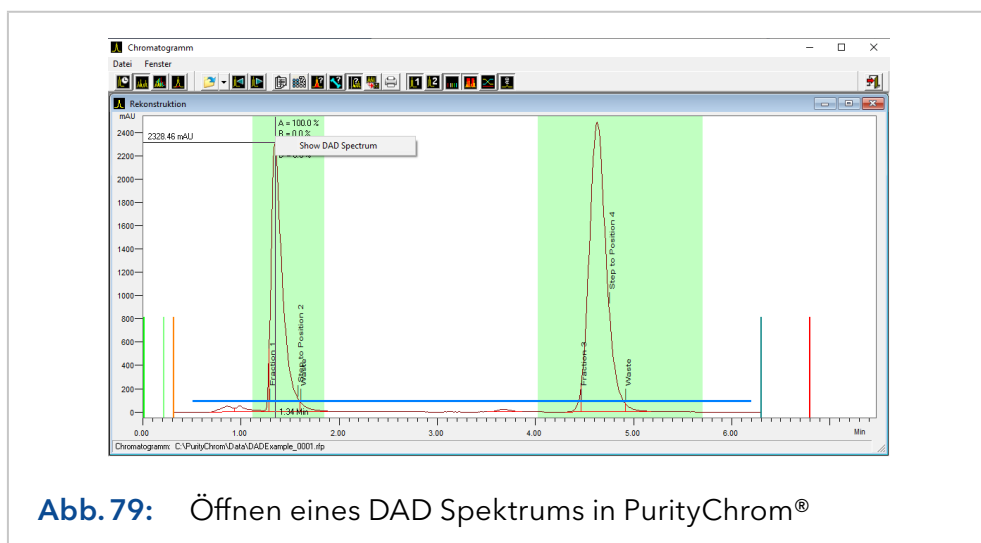
**Abb. 78:** Darstellung von Chromatogrammen, Report Druckoptionen in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus

Menü	Funktion
	<p><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.</p>
	<p><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.</p>
	<p><i>PEAKFENSTER ANZEIGEN</i> blendet die Peakfenster ein oder aus.</p>
	<p><i>GRADIENTENVERLAUF ANZEIGEN</i> blendet die Eluentenkomposition ein oder aus (nur in PurityChrom® und nicht in PurityChrom® MCC Plus unterstützt).</p>
	<p><i>BESCHRIFTUNGEN ANZEIGEN</i> blendet die Anmerkungen ein oder aus.</p>

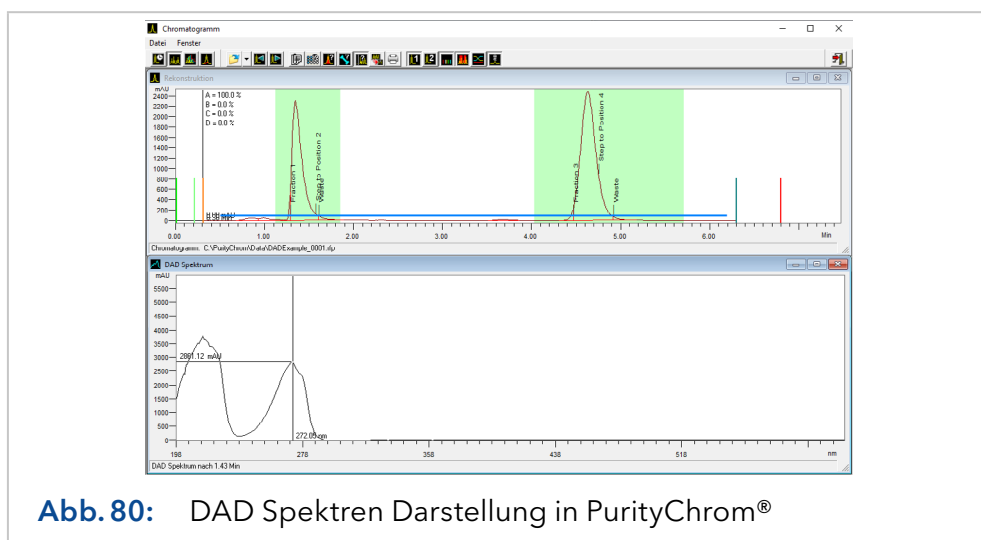
## 10.3 Rekonstruktion von DAD Spectra unter PurityChrom®

Zu jedem Zeitpunkt im Chromatogramm kann das entsprechende Spektrum angezeigt werden, wenn das Chromatogramm mit einem DAD-Detektor aufgenommen wurde und eine DAD-Ergebnisdatei (2D-Daten) existiert. Um eine DAD-Ergebnisdatei zu speichern, muss in der Registerkarte „DAD/MS“ einer Zeittabelle die Option „2D-Daten speichern“ gewählt werden.

Um die DAD-Spektren zu betrachten, öffnet man das Chromatogramm im Rekonstruktionsfenster, wählt nur den gewünschten Chromatogrammkanal aus und aktiviert das Fadenkreuz durch Anklicken der Schaltfläche **PEAKHÖHE ANZEIGEN** .




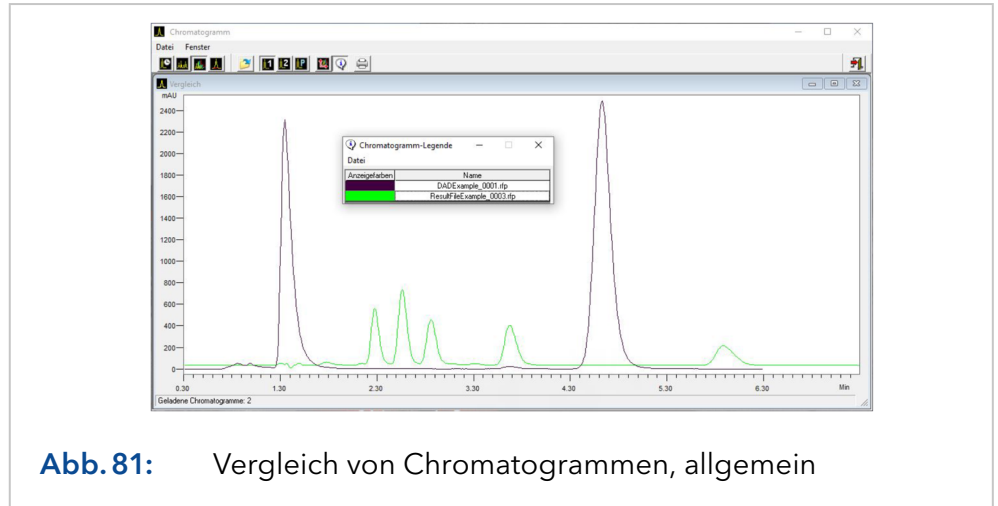
Klicken Sie mit der rechten Maustaste in das Chromatogramm und wählen Sie SHOW SPECTRUM. Es erscheint ein neues Fenster mit dem Spektrum zur gewählten Zeit. Um das Spektrum zu einer anderen Zeit im Chromatogramm anzuschauen, nutzen Sie ein erneutes Klicken mit der rechten Maustaste an die entsprechende Stelle im Chromatogramm oder bewegen die Maus mit gedrückter rechter Maustaste über das Chromatogramm.



# 11. Vergleich von Chromatogrammen in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus

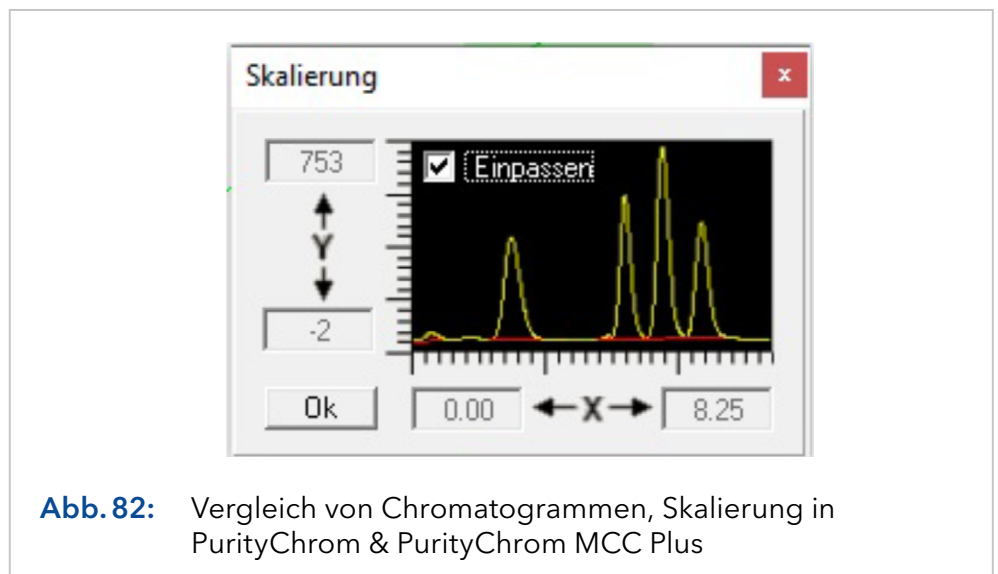
## 11.1 Allgemein

Das Chromatogrammfenster wird im Hauptfenster über die Funktionstaste oder den Menüpunkt *CHROMATOGRAMM*  geöffnet. Der dritte Funktionsknopf öffnet das Fenster zum Vergleichen von Chromatogrammen (*VERGLEICH*).



Es können mehrere Ergebnisdateien (.frp) geladen werden. Es werden aber jeweils nur die Chromatogramme der einzelnen Läufe für einen Kanal übereinander gelegt.






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.



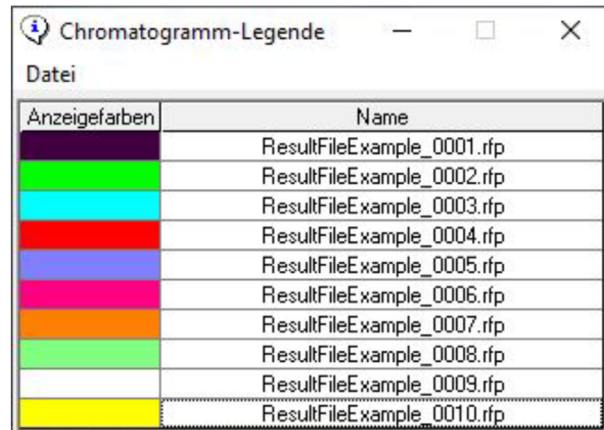
Ein Doppelklick auf die y- oder x-Achse öffnet ein Fenster, in dem Sie die Skalierung durch Werte fixieren können. Danach wird die Skalierung übernommen. Die Option *EINPASSEN* skaliert die geöffneten Chromatogramme automatisch in das Vergleichsfenster ein.

Die Statusleiste unten zeigt die Anzahl der geladenen Ergebnisdateien an.

## 11.2 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 Farbreferenzen 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.




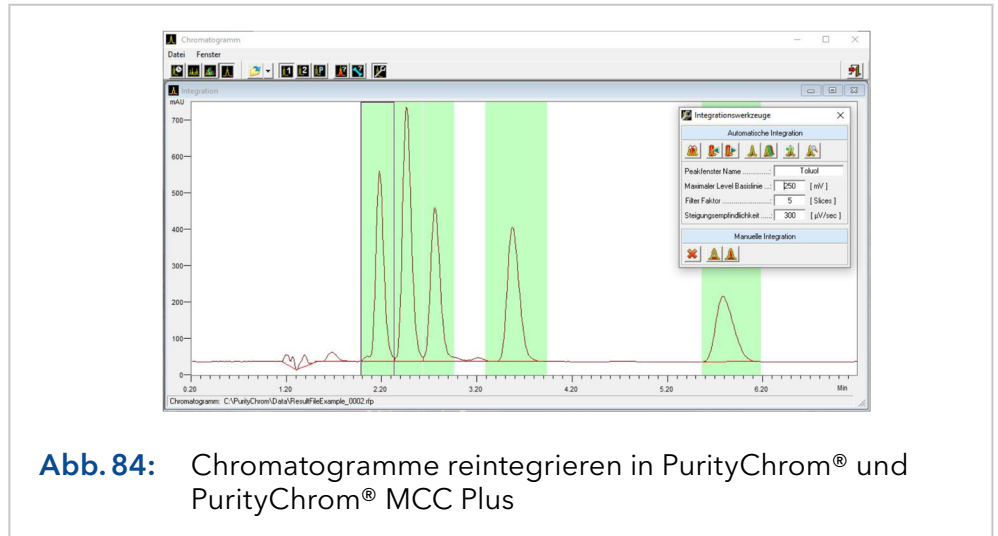
Anzeigefarben	Name
Dark Purple	ResultFileExample_0001.rfp
Green	ResultFileExample_0002.rfp
Cyan	ResultFileExample_0003.rfp
Red	ResultFileExample_0004.rfp
Blue	ResultFileExample_0005.rfp
Magenta	ResultFileExample_0006.rfp
Orange	ResultFileExample_0007.rfp
Light Green	ResultFileExample_0008.rfp
White	ResultFileExample_0009.rfp
Yellow	ResultFileExample_0010.rfp

**Abb. 83:** Chromatogramme vergleichen, Legende in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus

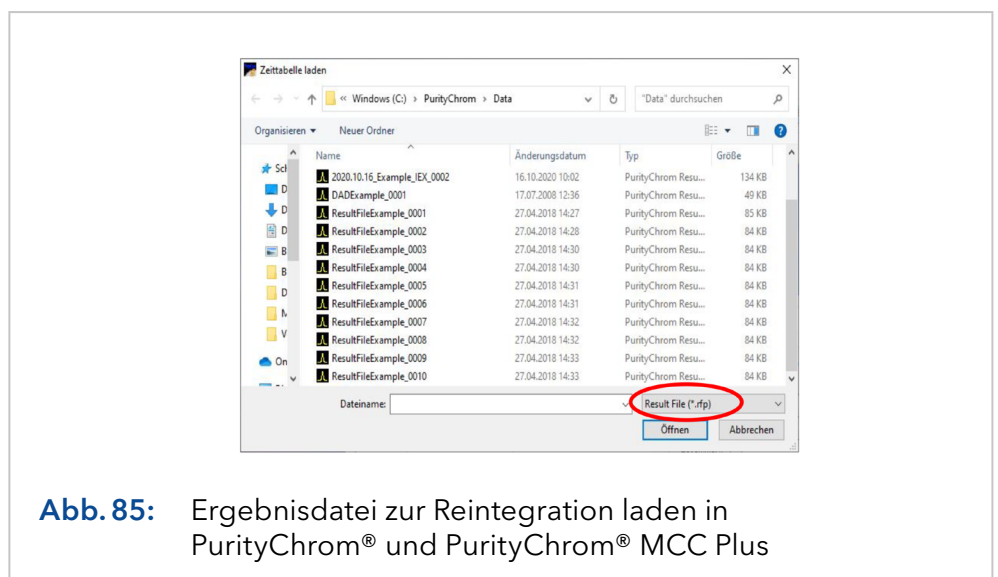
# 12. Reintegration von Chromatogrammen in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus

## 12.1 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.



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.










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.

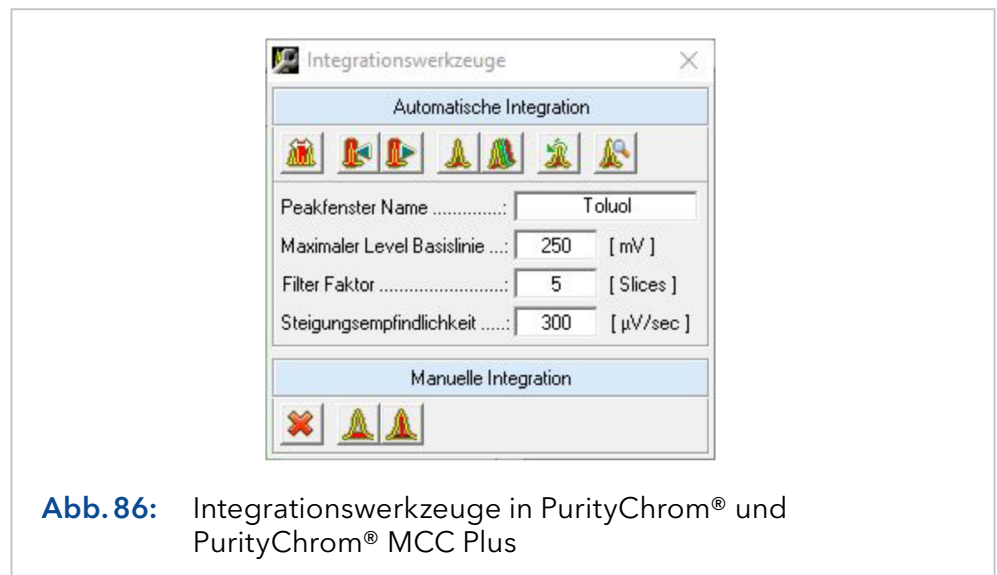
Die Statusleiste am unteren Rand des Fensters zeigt den Pfad und den Namen der geladenen Ergebnisdatei an.

## 12.2 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 in der PurityChrom.ini-Datei der Eintrag [IntegrationPresets → TailingFactor=1] zu modifizieren (siehe Kapitel „21. Appendix“ auf Seite 144).
	<i>INTEGRATIONSWERKZEUGE</i> öffnet das Fenster mit den Funktionstasten und Parameterboxen für die Reintegration.







Das Fenster *INTEGRATIONSWERKZEUGE* enthält die für die automatische 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 (siehe Kapitel „21. Appendix“ auf Seite 144).



**Abb. 86:** Integrationswerkzeuge in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus

Die Schaltflächen im Werkzeugfenster haben die folgenden Funktionen:

Menü	Funktion
	Mit <i>PEAKFENSTER ERSTELLEN/BEARBEITEN</i> können Sie Bereiche für Peaks erstellen und bearbeiten (siehe Kapitel "5.10 Grafischer Editor für eine Zeittabelle" auf Seite 63).
	<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.

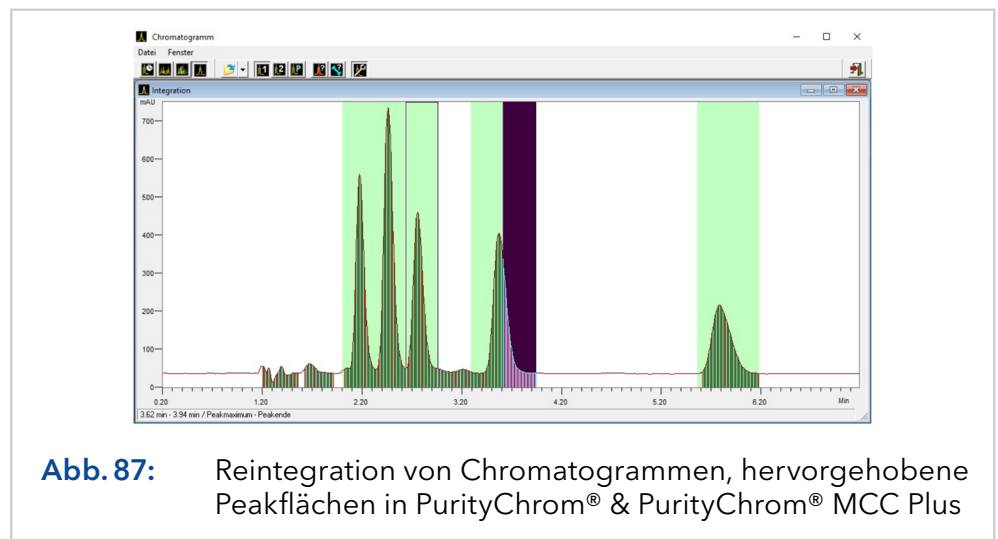
Die Reintegrationsparameter haben folgende Bedeutung:

*DER MAXIMALE LEVEL BASISLINIE* fungiert als Schwellwert für die Peakerkennung. Über dem in mV eingegebenen Wert werden keine Peakenden 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.



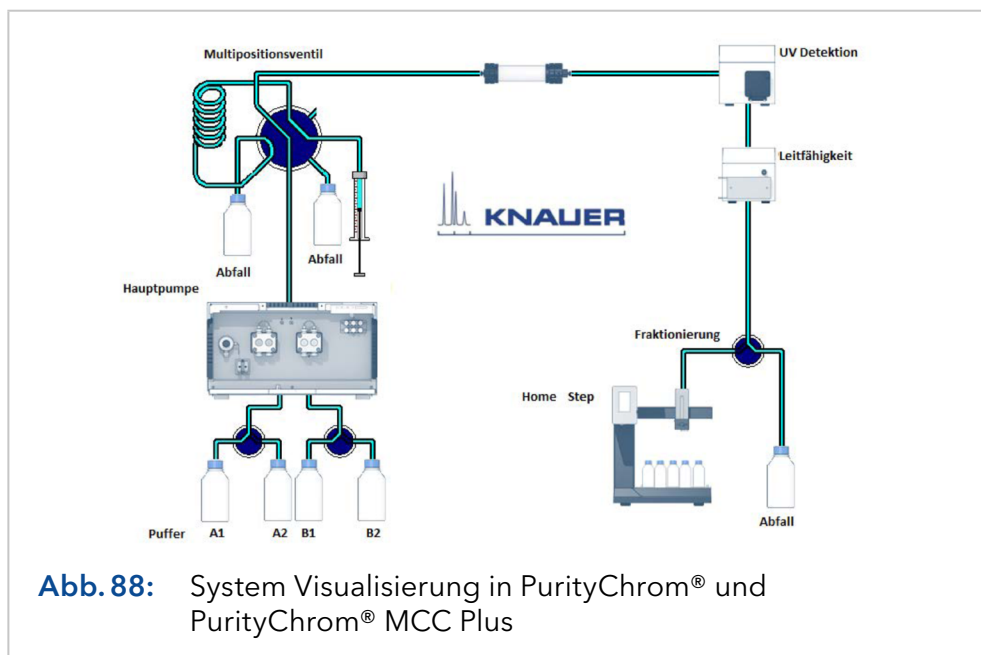
Menü	Funktion
	<i>INTEGRATIONSERGEBNISSE LÖSCHEN</i> löscht alle Integrationsergebnisse des angezeigten Kanals
	<i>MANUELLE BASISLINIE SETZEN</i> ermöglicht das manuelle Einfügen einer Baseline. Anfangs- und Endpunkt können mit der linken Maustaste festgelegt werden. Platzierte Punkte können weiterhin 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.



# 13. Systemvisualisierung in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus

## 13.1 Allgemein

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



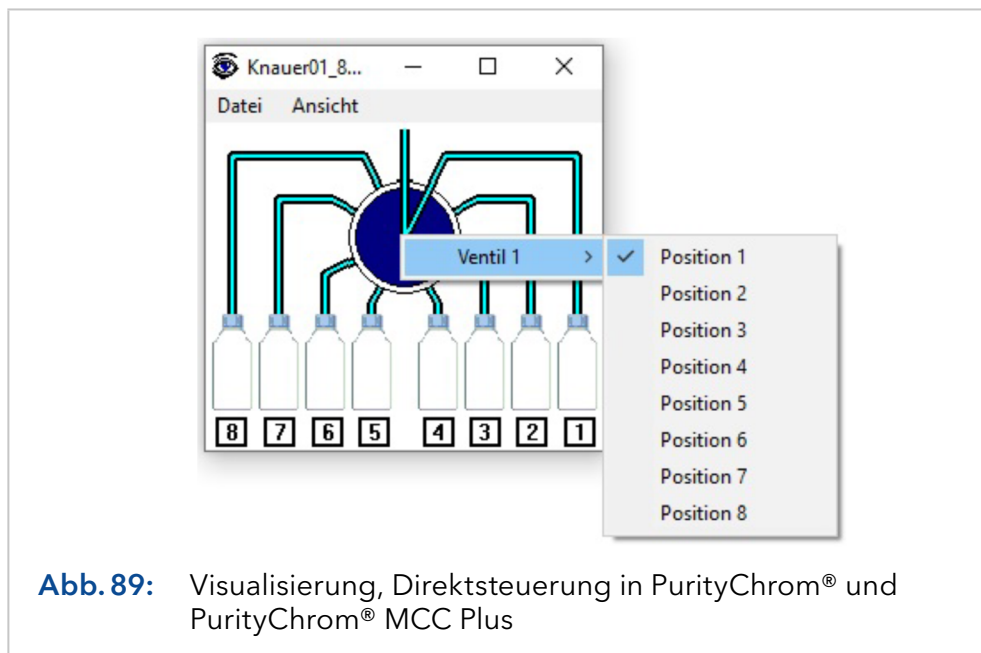
Die Anlagenvisualisierung dient zur grafischen Darstellung des Ablaufs sowie zur manuellen Bedienung aller Geräte, die über die Visualisierung gesteuert werden können. Darüber hinaus können in den Anzeigeboxen Daten über den aktuellen Druck, die Eluentenzusammensetzung, die Flussrate, die Detektorsignale, 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.

## 13.2 Funktionen zur Systemvisualisierung

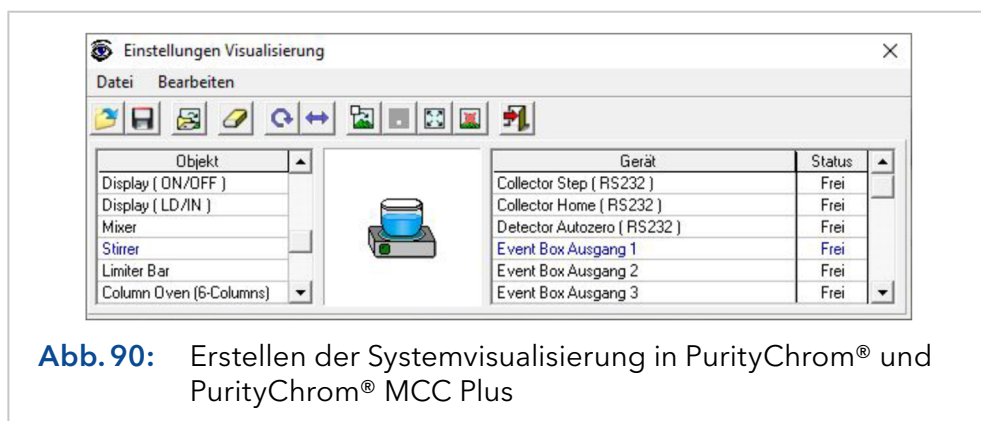


**Abb. 89:** Visualisierung, Direktsteuerung in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus

Alle Geräte, die visualisiert werden können, sind innerhalb der Visualisierung steuerbar. Um ein Menü anzuzeigen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das gewünschte Gerät. Im erscheinenden Popup-Menü wird als erster Menüpunkt der Gerätenamen 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.

## 13.3 Erstellen einer Systemvisualisierung

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



**Abb. 90:** Erstellen der Systemvisualisierung in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus

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 FILES</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 Einrichtungsfenster 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.

# 14. Anzeige des Lösemittelvorrates in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus

## 14.1 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.

## 14.2 Visualisierung der Lösemittelzufuhr

Auf der linken Seite des Lösemittelvorrats Fensters ist in PurityChrom® die Zufuhr der Lösungsmittel A-D des Hauptpumpensystem und in PurityChrom® MCC Plus die Lösungsmittelzufuhr der 8 Pumpen dargestellt. Zusätzlich wird der Füllstand des Abfallbehälters angezeigt. Die Anzeigen 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.

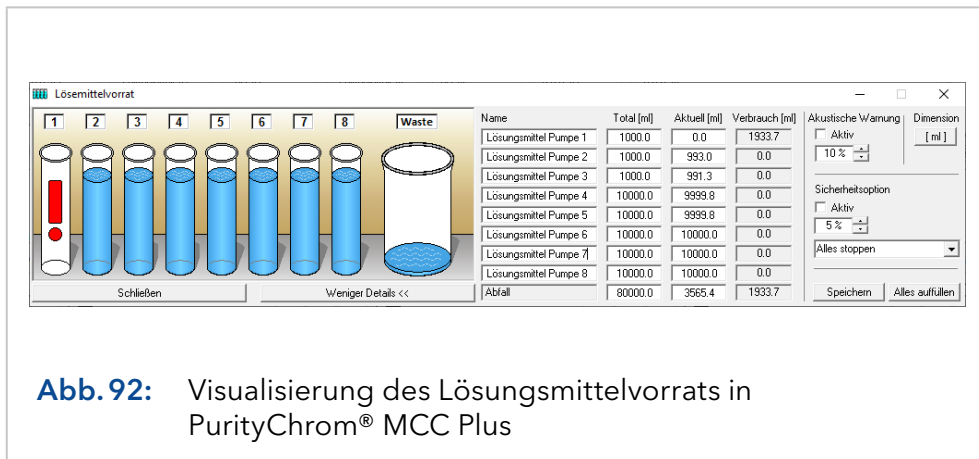


Ein Lösungsmittel, das unter den festgelegten Mindestprozentsatz gefallen ist, oder ein Abfallvolumen, das den Höchstprozentsatz überschritten hat, wird mit einem roten Ausrufezeichen markiert. Sie können die rechte Seite des Fensters mit der Schaltfläche **MEHR DETAILS** öffnen. Mit dem Button **WENIGER 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.

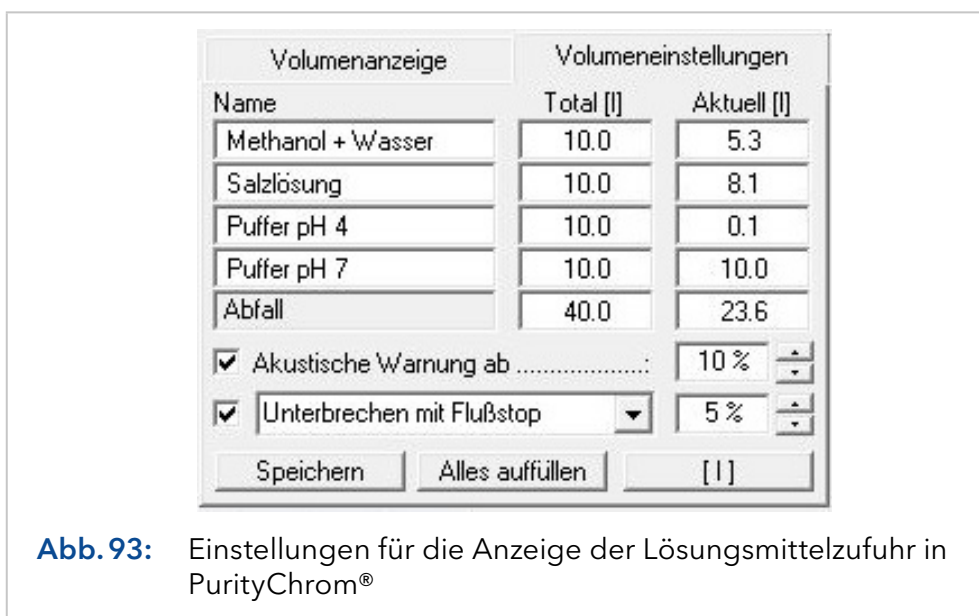


**Abb. 92:** Visualisierung des Lösungsmittelvorrats in PurityChrom® MCC Plus



**Hinweis:** Beachten Sie, dass nur ein Lösungsmittelvorrat pro Pumpe überwacht werden kann.

### 14.3 Einstellungen für die Anzeige der Lösungsmittelzufuhr



**Abb. 93:** Einstellungen für die Anzeige der Lösungsmittelzufuhr in PurityChrom®

Im Teil *VOLUMENEINSTELLUNGEN* können Sie unter *NAME* eigene Namen für die Lösungsmittel eingeben. Geben Sie in den Feldern unter *TOTAL* das Gesamtvolumen der einzelnen Lösemittelbehälter und unter *AKTUELL* den derzeitigen Füllstand der Behälter ein.



**Hinweis:** Stoppen Sie die Pumpen vor der Eingabe des aktuellen Lösemittelvolumens. Die Werte in den Feldern werden bei laufender Pumpe ständig aktualisiert und Ihre Eingaben somit 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 mit den Einträgen [SolventSupply] SoundfileWaste und SoundfileSolvents (siehe Kapitel „21. Appendix“ auf Seite 144) 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* pausiert 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* weiterlaufen lassen. Wenn Sie die Funktion Lösemittelzufuhr nicht verwenden möchten, müssen Sie die Option *AKUSTISCHE WARNUNG AB* und *ALLES STOPPEN* oder *UNTERBRECHEN MIT FLUSSSTOPP* abwählen.



**Hinweis:** Beachten Sie, dass nur ein Lösungsmittel pro Pumpe überwacht werden kann.


Name	Total [ml]	Current [ml]	Run uses [ml]	Acoustic Warning	Dimension
Solvent Pump 1	10000.0	9047.8	100.1	<input type="checkbox"/> Active	[ ml ]
Solvent Pump 2	10000.0	9807.5	100.1	10 %	
Solvent Pump 3	10000.0	9747.5	100.1		
Solvent Pump 4	10000.0	9719.7	100.1		
Solvent Pump 5	10000.0	9809.7	100.1	<input type="checkbox"/> Active	
Solvent Pump 6	10000.0	8757.6	0.0	5 %	
Solvent Pump 7	10000.0	8757.6	0.0		
Solvent Pump 8	10000.0	8757.6	0.0		
Waste	80000.0	0.0	500.5	Stop all	

**Abb. 94:** Einstellungen für die Anzeige der Lösungsmittelzufuhr in PurityChrom®MCC Plus

Zusätzlich haben Sie die Möglichkeit, eine echte Füllstandsanzeige mit analogen Ausgängen zu verwenden, die in der PurityChrom.ini-Datei [SolventSupply] (siehe Kapitel „21. Appendix“ auf Seite 144) definiert werden können.

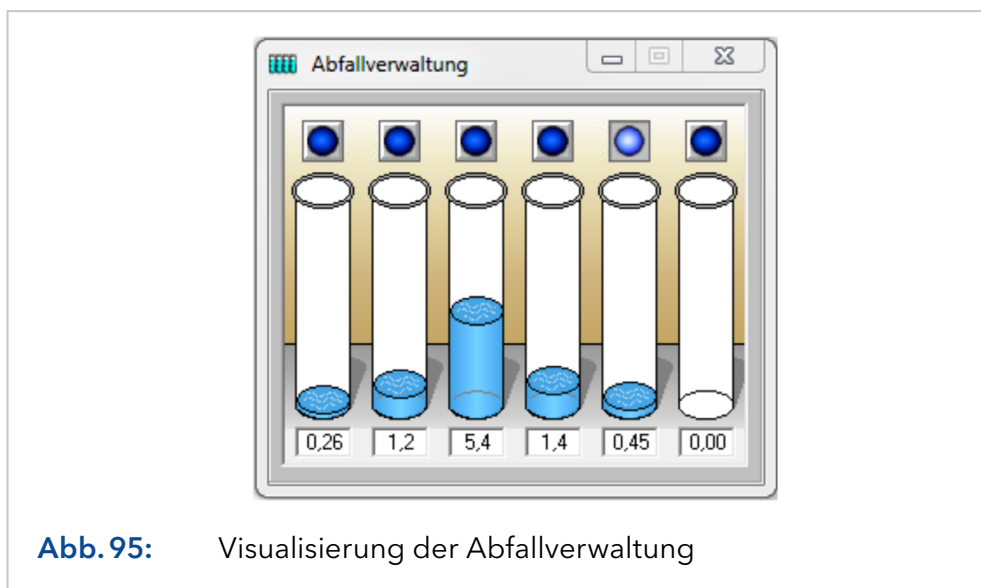
# 15. Abfallverwaltung in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus

## 15.1 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 im Abschnitt [WasteManagement] (siehe Kapitel „21. Appendix“ auf Seite 144) 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 im Abschnitt [WasteManagement] (siehe Kapitel „21. Appendix“ auf Seite 144) 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.

## 15.2 Anzeigen



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*).

## 15.3 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 Durchlauf 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.

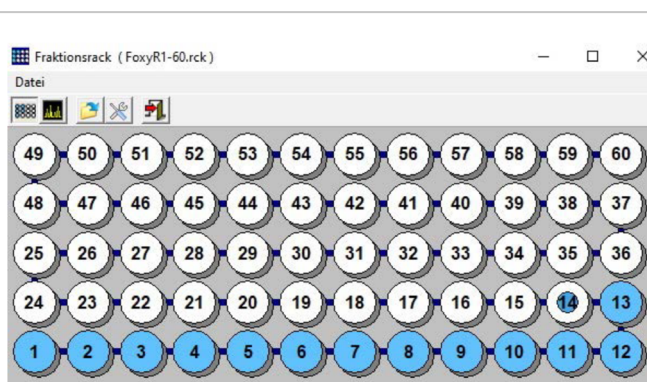
# 16. Fraktionsrack in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus



**Hinweis:** Beachten Sie, dass die Funktionen des Rack-Setups für Foxy Fraktionsammler nur eingeschränkt nutzbar sind.



## 16.1 Allgemein

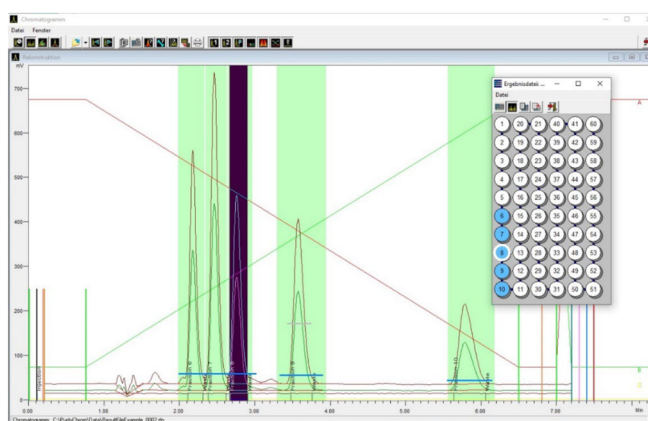
Der Funktionsknopf oder die Menüoption *FRAKTIONSRACK*  im Hauptfenster öffnet das Fenster mit der Rack-Anzeige des Fraktionsammlers.



**Abb. 96:** Fraktionsrack, Ansicht der aktuellen Fraktionierung in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus

Das Fraktionsrack kann auf zwei Arten angezeigt werden:

- **AKTUELLES RACK ANZEIGEN**  - Diese Ansicht zeigt das Fraktionsammler-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.



**Abb. 97:** Fraktionsrack, rekonstruierte Ansicht in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus

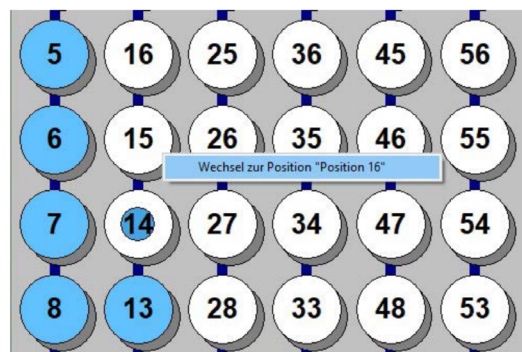
Wenn Sie mit der linken Maustaste auf eine der gefüllten Fraktionen klicken, wird dieser Teil des Chromatogramms invertiert dargestellt.

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.

## 16.2 Funktionen des Fraktionsrack-Fensters

Die folgenden Funktionen sind im Fraktionsrack-Fenster für PurityChrom® und für PurityChrom® MCC Plus verfügbar:

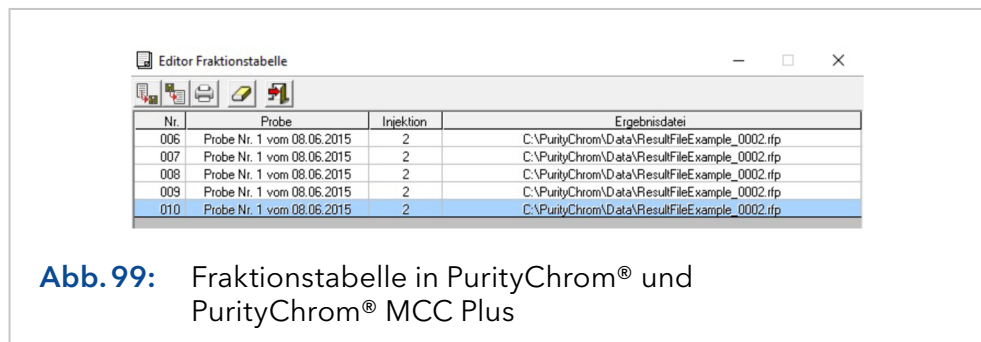
Menü	Funktion
	<i>AKTUELLES RACK ANZEIGEN</i> zeigt das aktuelle Rack an.
	<i>REKONSTRUIERTES RACK ANZEIGEN</i> zeigt die Positionen der einzelnen Fraktionen eines zuvor durchgeführten Laufs im Rack.
	<i>RACKDATEI LADEN</i> lädt eine Visualisierungsdatei eines Fraktionssammler-Racks.
	<i>RACKEINSTELLUNGEN</i> öffnet das Setup zum Konfigurieren des Fraktionssammler-Racks.
	<i>FRAKTIONSTABELLE ÖFFNEN</i> öffnet den Editor Fraktionstabelle.
	<i>ALLE FRAKTIONEN ZUR FRAKTIONSTABELLE HINZUFÜGEN</i> fügt alle Fraktionen zur Fraktionstabelle hinzu.
	<i>BEENDEN</i> beendet die Rack-Anzeige des Fraktionssammlers.



**Abb. 98:** Fraktionsrack, Ändern der Position des Fraktionssammlers






Die Rack-Anzeige ermöglicht es Ihnen, die Position des Fraktions samm- lers 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 ....*

## 16.3 Fraktionstabelle



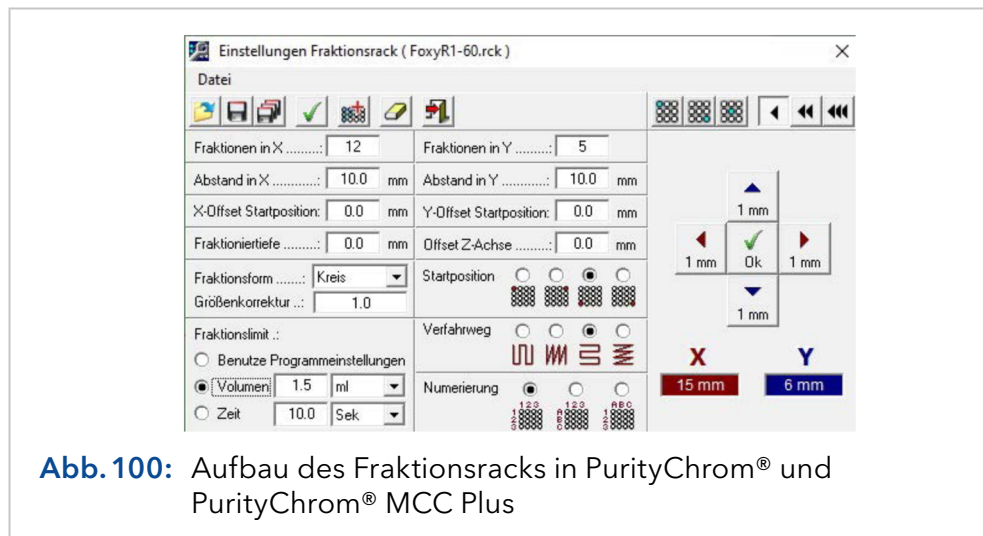
Die Fraktionstabelle enthält eine Liste von Fraktionen, die der Benutzer manuell im Fraktionsrack-Fenster ausgewählt hat. Fraktionen können in die Fraktionstabelle eingefügt werden, indem man mit der rechten Maustaste in eine Fraktion der Rack-Anzeige klickt und den Menüpunkt *ZUR FRAKTIONSTABELLE HINZUFÜGEN* 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 DRUCKEN</i> öffnet ein Dialogfenster zum Ausdrucken der Fraktionstabelle.
	<i>FRAKTIONSTABELLE LÖSCHEN</i> löscht den Inhalt der Fraktionstabelle. Um ein versehentliches Löschen zu vermeiden, wird vor dem Löschen eine Sicherheitsabfrage aktiviert.
	<i>BEENDEN</i> schließt die Fraktionstabelle.

## 16.4 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. 100:** Aufbau des Fraktionsracks in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus

*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.

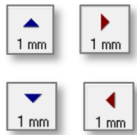




Menü	Funktion
	<i>RACKDATEI SPEICHERN UNTER ...</i> , um eine Rackdatei unter einem neuen Namen zu speichern.
	<i>SYMMETRISCHES RACK ERSTELLEN</i> erstellt mit Hilfe der angegebenen Daten eine symmetrische Anordnung aller Fraktionen im Rack.
	<i>RACKDATEI ANHÄNGEN</i> fügt eine bereits erstellte Rackdatei 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 Fraktionsssammlers 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 Fraktionsssammler verwendet werden, die über Koordinaten gesteuert werden.

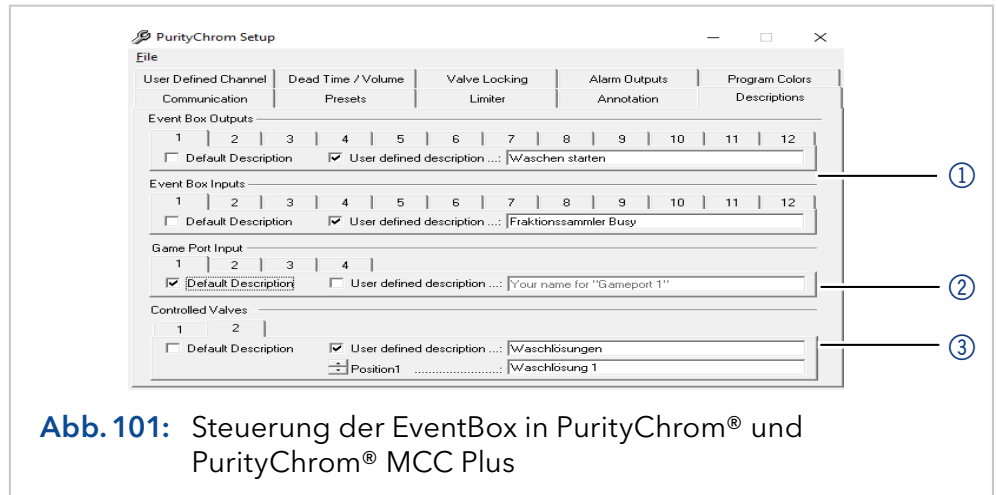
Die Symbolleiste im Lehrmodul enthält die folgenden Funktionsschaltflächen:

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.


Menü	Funktion
	Ein Klick auf einen der <i>LERN-BUTTONS</i> bewegt den Arm des Fraktions samm lers um die eingestellte Schrittweite in die entsprechende Richtung.
	Wenn der Arm des Fraktions samm lers die gewünschte Position erreicht hat, können die Koordinaten durch Klicken auf die Schaltfläche <i>OK</i> übernommen werden.
	Die aktuelle Position des Fraktions samm lers wird in den X- und Y-Koordinatenanzeigen wiedergegeben.

# 17. EventBox in PurityChrom® und PurityChrom MCC Plus

## 17.1 General



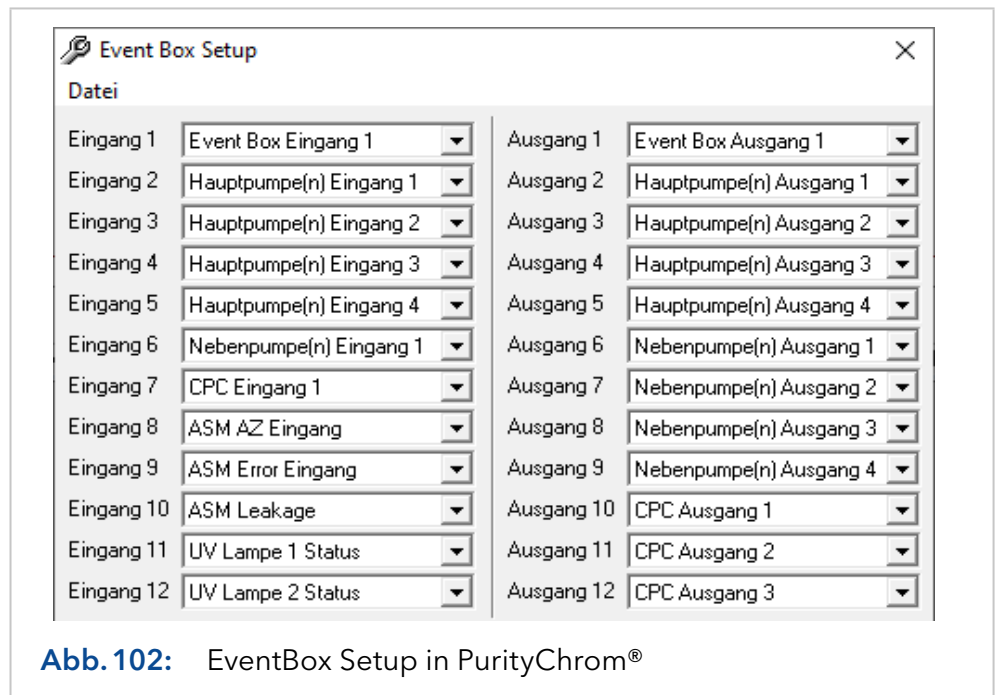
**Abb. 101:** Steuerung der EventBox in PurityChrom® und PurityChrom® MCC Plus

Die Funktionstaste oder der Menüpunkt *EVENT BOX*  im Hauptfenster öffnet das Fenster der EventBox. Die erste LED-Reihe ① stellt die Signal-Eingänge dar. Ein aktiver Eingang wird durch eine leuchtende LED angezeigt. Die Schaltflächen im unteren Teil des Fensters dienen zum manuellen Schalten der Signal-Ausgänge. Die zweite Reihe ② schaltet die Signal-Ausgänge statisch ein oder aus. Die LEDs in den Schaltflächen zeigen dabei jeweils den Status der einzelnen Ausgänge an. Die untere Reihe von Tasten ③ schaltet die Ausgänge mit einem Impuls, dessen Dauer in der Datei PurityChrom.ini unter „[EventBox] Pulselength“ (siehe Kapitel „21.1 PurityChrom®: Die Einträge in der Datei PurityChrom.ini“ auf Seite 144) definiert werden kann.

Die Einträge in der Datei PurityChrom.ini“ auf Seite 144) definiert werden kann.

Bei Standard-KNAUER-Systemen empfangen die Ein- und Ausgänge der EventBox entweder ein Signal oder geben ein Signal an die Stiftleiste der KNAUER-Geräte aus.

## 17.2 Konfiguration der EventBox Signale in PurityChrom®



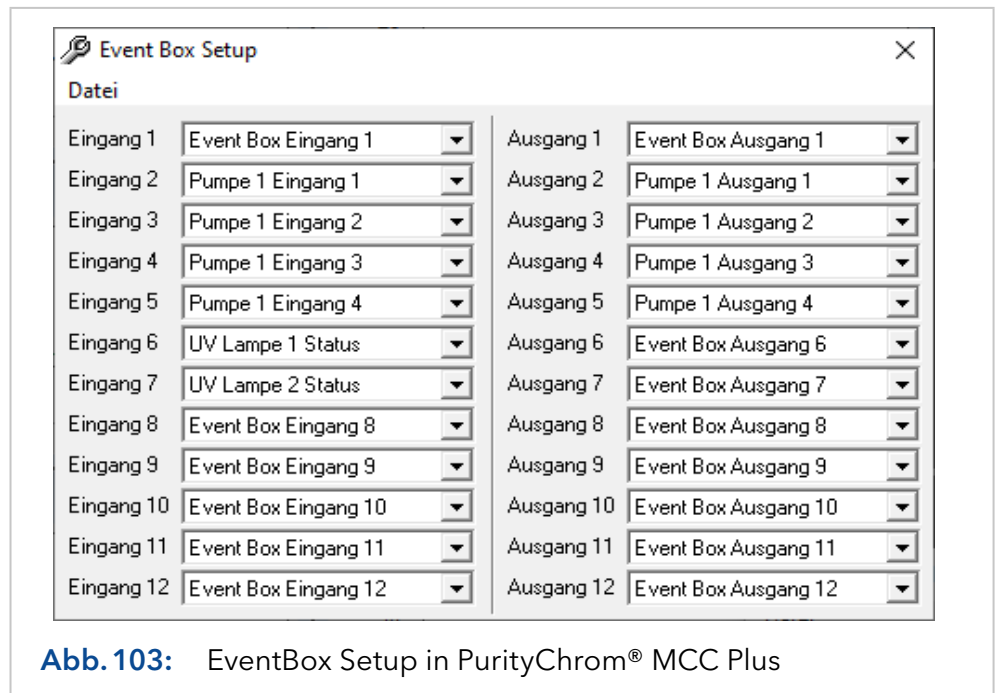
**Abb. 102:** EventBox Setup in PurityChrom®

Um die verschiedenen Eingangs- und Ausgangssignale der EventBox zu konfigurieren, öffnen Sie das EventBox Setup über die Registerkarte *DATEI* im EventBox Kontrollfenster. Auf der linken Seite sind alle 12 Eingangssignale aufgelistet, während die rechte Seite die Ausgangssignale zeigt. Für jedes Signal steht ein Dropdown-Menü zur Verfügung, in dem die folgenden Signale für die EventBox Steuerung ausgewählt werden können:

	Signal	Erläuterung
<b>Eingangssignal:</b>	EventBox Eingang 1-12	Eingänge 1-12 einer Ethernet EventBox
	Hauptpumpe(n) Eingang 1	Start-In Signal der Hauptpumpe
	Hauptpumpe(n) Eingang 2	Error-In Signal der Hauptpumpe
	Hauptpumpe(n) Eingang 3	Leckagesensor der Hauptpumpe
	Hauptpumpe(n) Eingang 4	Motorausfall der Hauptpumpe (Im Fall, dass 2 Pumpen als HPG verwendet werden, entspricht dieser Eingang dem Start-In Signal der Pumpe B.)
	Nebenpumpe(n) Eingang 1	Start-In Signal der Nebenpumpe
	Nebenpumpe(n) Eingang 2	Error-In Signal der Nebenpumpe

Signal	Erläuterung
Nebenspumpe(n) Eingang 3	Leckagesensor der Nebenspumpe
Nebenspumpe(n) Eingang 4	Motorausfall der Nebenspumpe
CPC-Eingang 1-4	Eingangssignale 1-4 einer CPC-Anlage
ASM AZ EINGANG	Autozero-Signal eines Assistenten-Moduls (ASM 2.1L oder ASM 2.2L)
ASM START EINGANG	Start-In-Signal des Assistenten ASM 2.1L oder ASM 2.2L
ASM ERROR EINGANG	Error-In-Signal des Assistenten ASM 2.1L oder ASM 2.2L
ASM LEAKAGE	Leckagesensor des Assistenten ASM 2.1L oder ASM 2.2L
ASM-Error	Wird diese Option gewählt, wird der Event Box Eingang bei jedem den Assistenten betreffenden Fehler aktiviert.
UV-Lampe 1 Status	Status (EIN/AUS) der Deuteriumlampe
UV-Lampe 2 Status	Status (EIN/AUS) der Halogenlampe
<b>Ausgangssignal:</b> EventBox Ausgang 1-12	Ausgänge 1-12 einer Ethernet EventBox
Hauptpumpe(n) Ausgang 1	Signalausgang 1 der Hauptpumpe(n)
Hauptpumpe(n) Ausgang 2	Signalausgang 2 der Hauptpumpe(n)
Hauptpumpe(n) Ausgang 3	Signalausgang 3 der Hauptpumpe(n)
Hauptpumpe(n) Ausgang 4	Signalausgang 4 der Hauptpumpe(n)
Nebenspumpe(n) Ausgang 1	Signalausgang 1 der Nebenspumpe(n)
Nebenspumpe(n) Ausgang 2	Signalausgang 2 der Nebenspumpe(n)
Nebenspumpe(n) Ausgang 3	Signalausgang 3 der Nebenspumpe(n)
Nebenspumpe(n) Ausgang 4	Signalausgang 4 der Nebenspumpe(n)
CPC-Ausgang 1-4	Ausgangssignale 1-4 einer CPC-Anlage

## 17.3 Konfiguration der EventBox Signale in PurityChrom® MCC Plus



**Abb. 103:** EventBox Setup in PurityChrom® MCC Plus

Um die verschiedenen Eingangs- und Ausgangssignale der EventBox zu konfigurieren, öffnen Sie das EventBox Setup über die Registerkarte *DATEI* im EventBox Kontrollfenster. Auf der linken Seite sind alle 12 Eingangssignale aufgelistet, während die rechte Seite die Ausgangssignale zeigt. Für jedes Signal steht ein Dropdown-Menü zur Verfügung, in dem die folgenden Signale für die EventBox Steuerung ausgewählt werden können:

	Signal	Erläuterung
<b>Eingangssignal:</b>	EventBox Eingang 1-12	Eingänge 1-12 of einer Ethernet EventBox
	Pumpe 1-8 Eingang 1	Start-In Signal der betreffenden Pumpe
	Pumpe 1-8 Eingang 2	Error-In Signal der betreffenden Pumpe
	Pumpe 1-8 Eingang 3	Leckagesensor der betreffenden Pumpe
	Pumpe 1-8 Eingang 4	Motorausfall der betreffenden Pumpe
	Status der UV-Lampe 1	Status (EIN/AUS) der Deuteriumslampe
	Status der UV-Lampe 2	Status (EIN/AUS) der Halogenlampe
	<b>Ausgangssignal:</b>	EventBox Ausgang 1-12
Pumpe 1-8 Ausgang 1		Signalausgang 1 der betreffenden Pumpe

<b>Signal</b>	<b>Erläuterung</b>
Pumpe 1-8 Ausgang 2	Signalausgang 2 der betreffenden Pumpe
Pumpe 1-8 Ausgang 3	Signalausgang 3 der betreffenden Pumpe
Pumpe 1-8 Ausgang 4	Signalausgang 4 der betreffenden Pumpe
CPC-Ausgang 1-4	Ausgangssignale 1-4 einer CPC-Anlage

# 18. Einrichtung spezieller Geräte in PurityChrom®

## 18.1 RID 2.1L Einrichtung

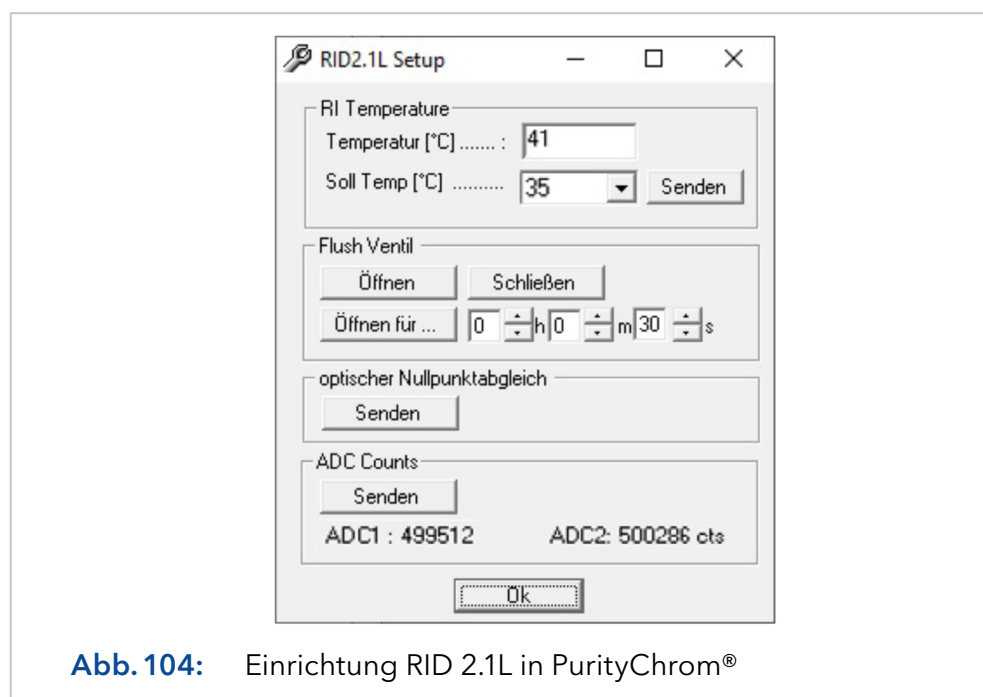


**Hinweis:** Zur Steuerung des RID 2.1L muss ein Treiber geändert werden. Kopieren Sie den Treiber RID21L.dll von C:\PurityChrom\DriverDll nach C:\Windows\SysWOW64 (64-Bit-System) oder C:\Windows\System32 (32-Bit-System). Benennen Sie den Treiber in „PrepconLF.dll“ um.



**Hinweis:** Es ist nicht möglich einen Leitfähigkeitsdetektor CM 2.1S und einen Brechungsindex-Detektor RID 2.1L gemeinsam in einem System anzusteuern.

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



**Abb. 104:** Einrichtung RID 2.1L in PurityChrom®

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.

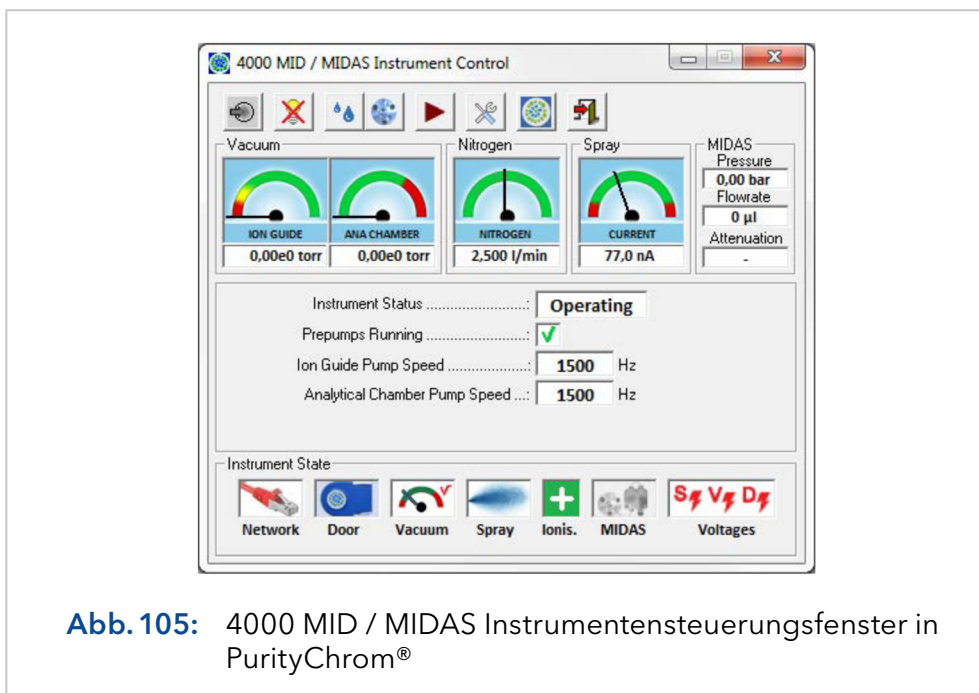
## 18.2 Massenspektrometer 4000 MiD

### 18.2.1 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.





## 18.2.2 Steuerung des 4000 MiD / MIDAS-Spektro-meters in PurityChrom®



**Abb. 105:** 4000 MID / MIDAS Instrumentensteuerungsfenster in PurityChrom®

Die folgenden Funktionstasten können im Kontrollfenster für Massenspektrometer gefunden werden:

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>

Menü	Funktion
	<i>START- UND STOPP ATTENUATOR:</i> Diese Funktion ist nur verfügbar, wenn das <i>MIDAS</i> eingeschaltet und mit der Masscape-Software aktiviert ist und die Messung in Betrieb ist.
	<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.
	<i>SETUP:</i> Öffnet das Fenster für Einstellungen. Diese Funktion ist nur verfügbar, wenn der Scan nicht gestartet ist. (Einzelheiten siehe unten)
	<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.

Solange der Scan nicht gestartet wird, sind folgende Anzeigen verfügbar:

- Vakuum
- N-Verbrauch
- Spraystrom
- Druck
- Durchfluss der Makeup-Pumpe
- Dämpfung

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.

### 18.2.3 4000 MiD / MIDAS Einrichtung in PurityChrom®

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.

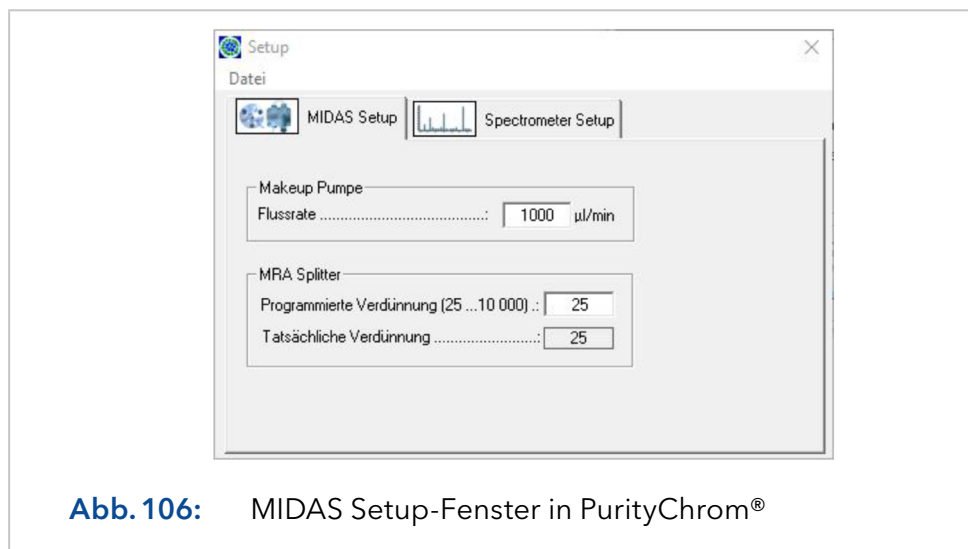


Abb. 106: MIDAS Setup-Fenster in PurityChrom®

#### Einrichtung des Spektrometers

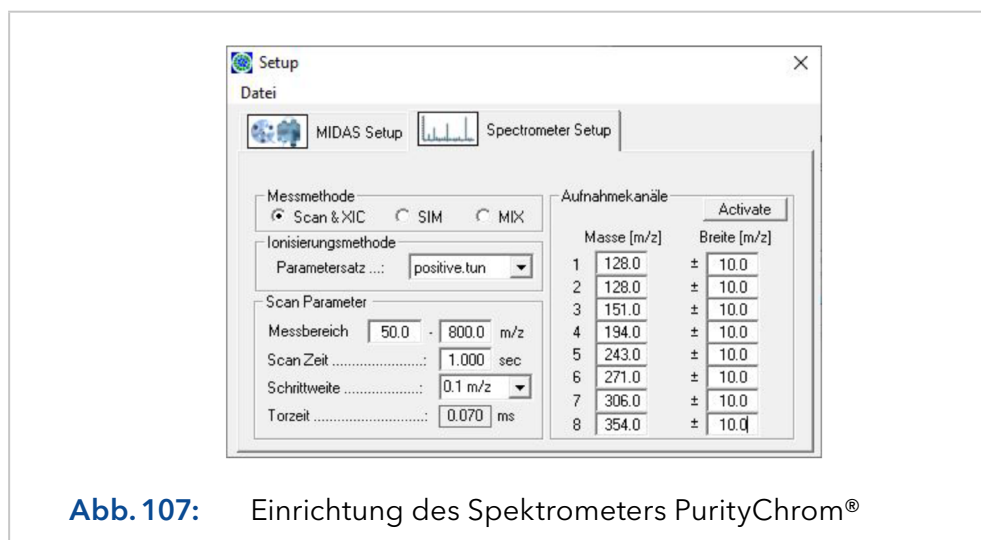


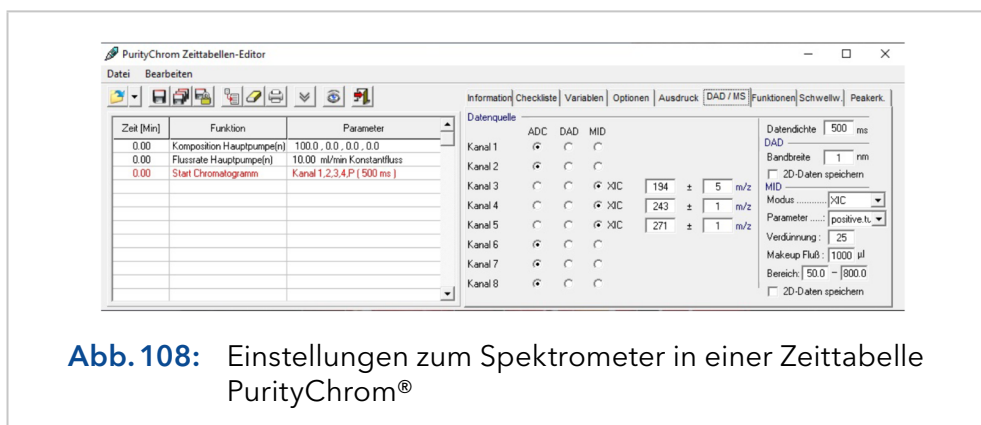
Abb. 107: Einrichtung des Spektrometers PurityChrom®

**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 Massendatenansichten 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 Microsai 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 Chromatogrammkkanäle 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. 108:** Einstellungen zum Spektrometer in einer Zeittabelle PurityChrom®

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.


## 18.3 Steuerung von Heizgeräten

### 18.3.1 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“.

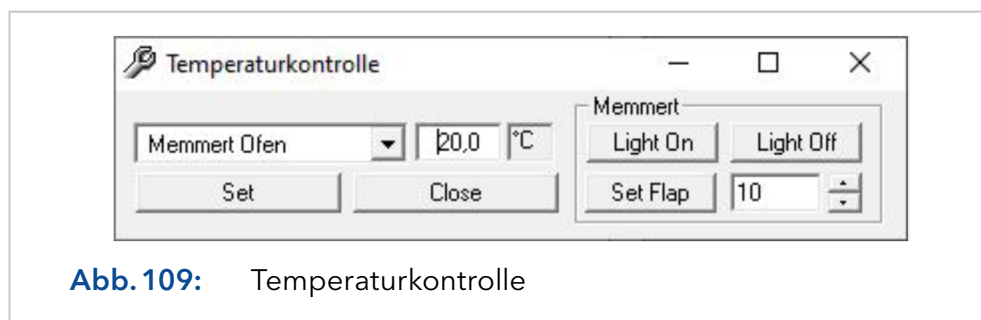
Die Steuerung des Säulenofens kann manuell über den Menüpunkt bzw. den Button *TEMPERATURSTEUERUNG*  im Hauptfenster vorgenommen werden.

### 18.3.2 Memmert UN 55-Ofen



**Hinweis:** Zur Steuerung des Memmert UN 55-Ofens aktivieren Sie 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. 109:** Temperaturkontrolle

## 18.4 LH 2.1 in PurityChrom® einbinden

Der LH 2.1 wird in PurityChrom® ab Version 5.9.149 unterstützt.

### 18.4.1 Default IP Adressen und .ini Einträge

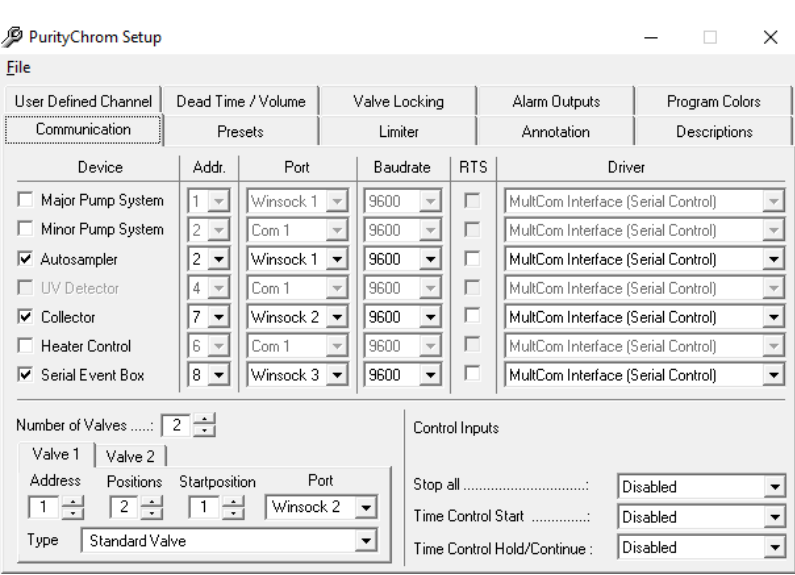
Gerät	IP Adresse	
Autosampler	IP Adresse = 192.168.1.126 Port = 10001	Winsock Port 1
Fraktionssammler	IP Adresse = 192.168.1.126 Port = 10002	Winsock Port 2
Steuer-Interface	IP Adresse = 192.168.1.126 Port = 10003	Winsock Port 3
VU 4.1 Injektor	IP Adresse = 192.168.1.127 Port = 10001	Kein Winsock-Eintrag notwendig

Autosampler, Fraktionssammler und Steuer-Interface müssen in der .ini-Datei eingestellt werden. Der VU 4.1 Injektor muss nicht in der PurityChrom® Software konfiguriert werden. Die Verbindung zwischen LH 2.1 und dem VU 4.1 ist durch die Eingabe der IP-Adresse in der HTTP-Konfigurationsoberfläche gewährleistet.

Das *LOOPVOLUME* wird im Autosampler Setup an die Größe der Proben-schleife des LH 2.1 angepasst.

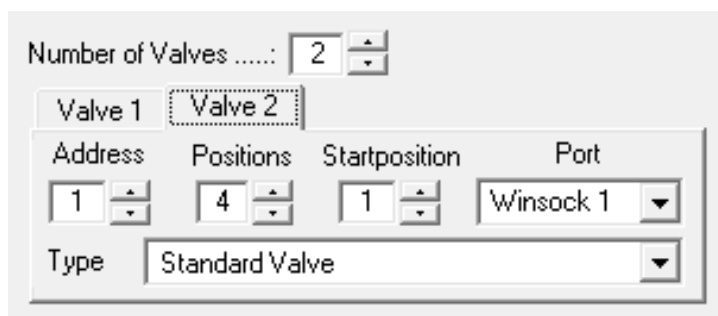
### 18.4.2 PurityChrom® konfigurieren

In der PurityChrom® Konfiguration können verschiedene Einstellungen für den LH 2.1 vorgenommen werden.



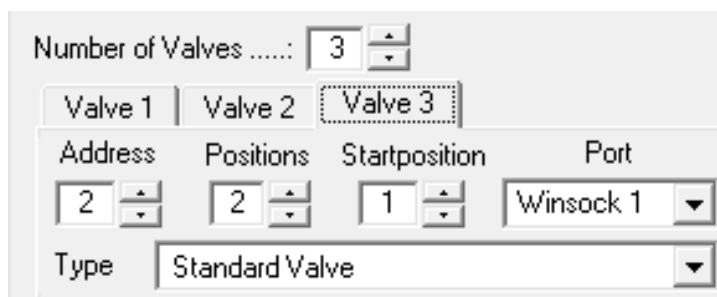
**Abb. 110:** Konfiguration des LH 2.1 in PurityChrom®, Valve 1: Magnetschaltventil des Fraktionssammlers



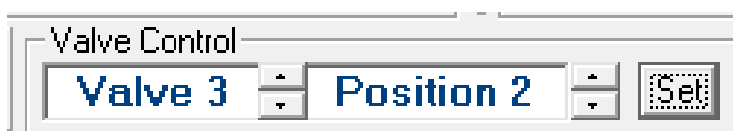


**Abb. 111:** Konfiguration des LH 2.1 in PurityChrom®, Valve 2: Auswahlventil des LH 2.1.

Das Injektionsventil muss nur konfiguriert werden, wenn eine manuelle Steuerung in der Toolbar der Software erwünscht ist. Für die Funktion des LH 2.1 ist die Einstellung in der PurityChrom® Konfiguration nicht notwendig.



**Abb. 112:** Konfiguration des Injektionsventils in PurityChrom®



**Abb. 113:** Konfiguration des Injektionsventils in der Toolbar der PurityChrom®

Die Ventiladressen sind wie folgt vergeben:

#### **Autosampler**

- Adresse 1 = Auswahlventil für Waschlösungen 1 - 4
- Adresse 2 = Injektionsventil am VU 4.1 *LOAD/INJECT*

#### **Fraktionssammler**

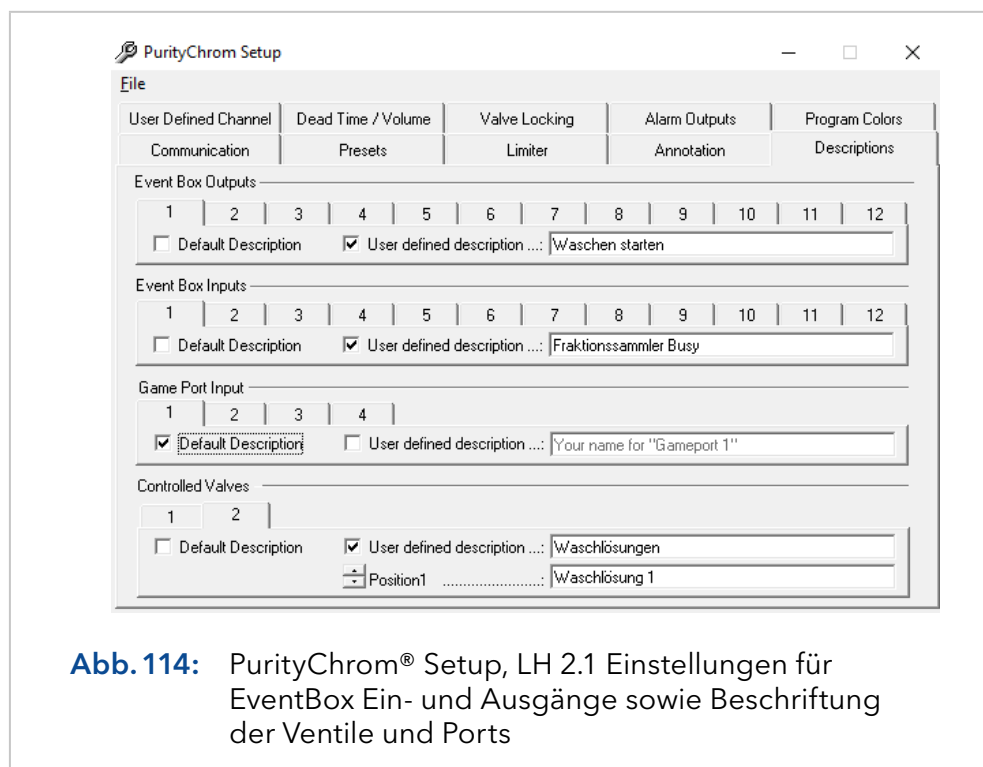
- Adresse 1 = Divertierfunktion aktiv
- Adresse 2 = Divertierfunktion inaktiv

### 18.4.3 EventBox-Ein- & Ausgänge in PurityChrom®

Die EventBox Ein- & Ausgänge in der PurityChrom® sind wie folgt für den LH 2.1 belegt:

- Eingang 1 - Fraktionssammler *BUSY* (während der Injektion und des Waschvorgangs)
- Eingang 2 - Stellung des Injektionsventils (*LOAD/INJECT*)
- Eingang 3 - *HOLD* Anforderung über Front-Taste ist aktiv, um Frontklappe zu öffnen
- Eingang 4 - Frontklappe geöffnet
- Eingang 6 - Gerätefehler / Kommunikationsfehler
- Ausgang 1 - Waschvorgang starten

Die Bezeichnungen der Eingänge, Ausgänge, Ventile und Ventilpositionen können zur besseren Übersichtlichkeit im PurityChrom® Setup unter *BEZEICHNUNGEN* gepflegt werden.



**Abb. 114:** PurityChrom® Setup, LH 2.1 Einstellungen für EventBox Ein- und Ausgänge sowie Beschriftung der Ventile und Ports

### 18.4.4 Steuerung des LH 2.1 in der PurityChrom®

Die Autosampler-Funktion des LH 2.1 wird in der PurityChrom® Software wie ein Autosampler oder Probengeber über ein *AUTOSAMPLER CONTROL FILE* oder eine Sequenztafel programmiert. Die Waschlösung kann in dem *TIME CONTROL FILE* über das Auswahlventil für jede Injektion ausgewählt werden. Ein Waschvorgang kann manuell über die Visualisierung gestartet werden.

Die Fraktionssammler Funktion wird wie ein regulärer Fraktionssammler über das *TIME CONTROL FILE* gesteuert.

## 18.5 AZURA® SMB-Systeme

### 18.5.1 Allgemein

Zur Integrierung der AZURA® SMB-Systeme in die PurityChrom® MCC Software muss die PurityChrom.ini Datei angepasst werden. An das Ende der Datei werden die folgenden Zeilen hinzugefügt:

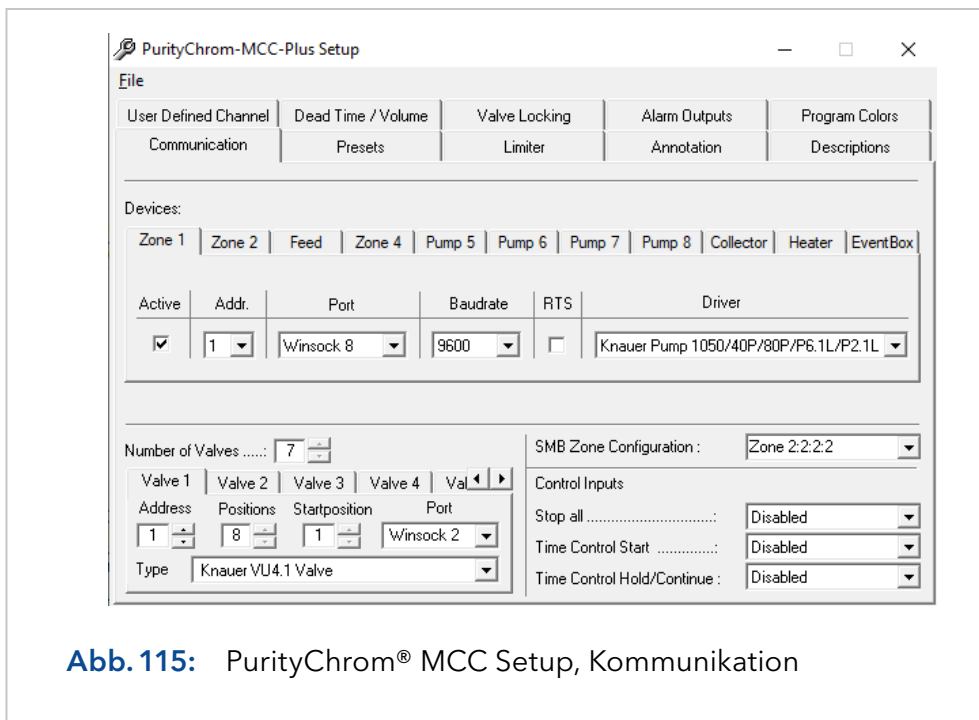
- [SMB]
- Active=1
- MaxCycleCounter=10
- MaxElapsedValue=1440
- MaxTTLines=500
- StopPumpsNewFile=0



**Hinweis:** Erläuterungen zu den einzelnen Eingaben finden Sie im Anhang (siehe Kapitel „21. Appendix“ auf Seite 144).

### 18.5.2 Konfiguration

In der PurityChrom® MCC Setup gibt es ein zusätzliches Fenster, um die Konfiguration der SMB-Zonen zu verändern. Dabei kann zwischen der Standardkonfiguration 2:2:2:2, 1:3:3:1 oder einer benutzerdefinierten Konfiguration gewählt werden.



**Abb. 115:** PurityChrom® MCC Setup, Kommunikation

### 18.5.3 Erstellen von Zeittabellen

Die Software verfügt über eine vorkonfigurierte Zeittabelle in der Methode SMB-Default.tcf. In dieser Methode sind alle Funktionen, wie z. B. Pumpensteuerung und Ventilschaltung, hinterlegt. Für Standard-SMB-Prozesse mit den hinterlegten Zonenkonfigurationen sind keine Änderungen in der SMB-Default Methode notwendig. Die Änderung von Pumpenflussraten und Schaltzeiten erfolgt über den SMB-Parameter Wizard in Abschnitt 19.1.4.

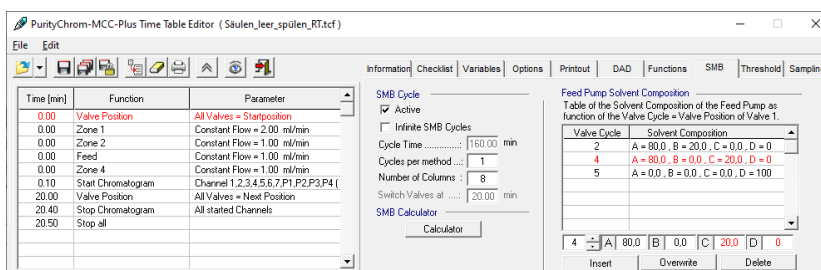
Time [min]	Function	Parameter
0.00	Valve Position	All Valves = Startposition
0.00	Zone 1	Constant Flow = 5.00 ml/min
0.00	Zone 2	Constant Flow = 2.50 ml/min
0.00	Feed	Constant Flow = 1.00 ml/min
0.00	Zone 4	Constant Flow = 2.00 ml/min
0.10	Start Chromatogram	Channel 1,2,3,4,5,6,P1,P2,P3,P4 ( 5
1.00	Valve Position	All Valves = Next Position
1.40	Stop Chromatogram	All started Channels
1.50	Stop all	

**Abb. 116:** Zeittabellen für einen SMB-Prozess in der PurityChrom® MCC



**Hinweis:** Sie können in PurityChrom® MCC weitere Zeittabellen erstellen (siehe Kapitel „5. Erstellen von Zeittabellen“ auf Seite 29).

Für die SMB gibt es eine zusätzliche Registerkarte in den Zeittabelleneinstellungen. Bei SMB-Standardanwendungen sind keine Änderungen in dieser Registerkarte notwendig.




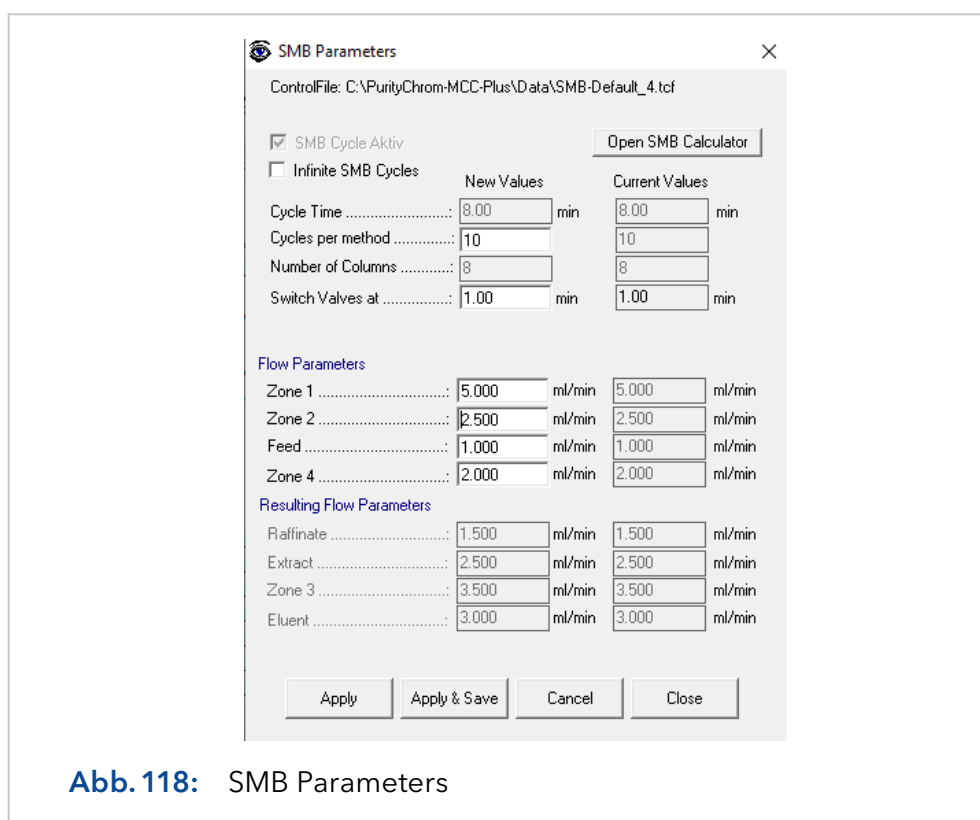
**Abb. 117:** Zeittabellen SMB-Registerkarte in der PurityChrom® MCC

- Die Checkbox *ACTIVE* gibt an, ob der SMB-Prozesses aktiviert ist.
- Mit Aktivierung der Checkbox *INFINITE SMB CYCLES*, ist die Anzahl der Zyklen unbegrenzt.

- *CYCLE TIME* gibt die Zeit eines SMB-Zyklus an. Dieser hängt von der Säulenanzahl und der Switch-Zeit ab.
- *CYCLES PER METHOD* gibt die maximale Zykluszahl der Methode an. Dazu muss die Checkbox *INFINITE SMB CYCLES* deaktiviert sein.
- Geben Sie im Feld *NUMBER OF COLUMNS* die Anzahl der verwendeten Säulen an.

### 18.5.4 SMB-Parameters

Das SMB-Parameters-Fenster wird über das Icon  im Hauptfenster geöffnet. Durch dieses Tool können die Pumpenflussraten und die Schaltzeit in eine bestehende Methode (z. B. SMB-Default.tcf) übertragen werden. Dafür stehen alle Funktionen der SMB-Registerkarte zur Verfügung. Geänderte Werte werden rot dargestellt. Übernommenen Parameter werden schwarz dargestellt.



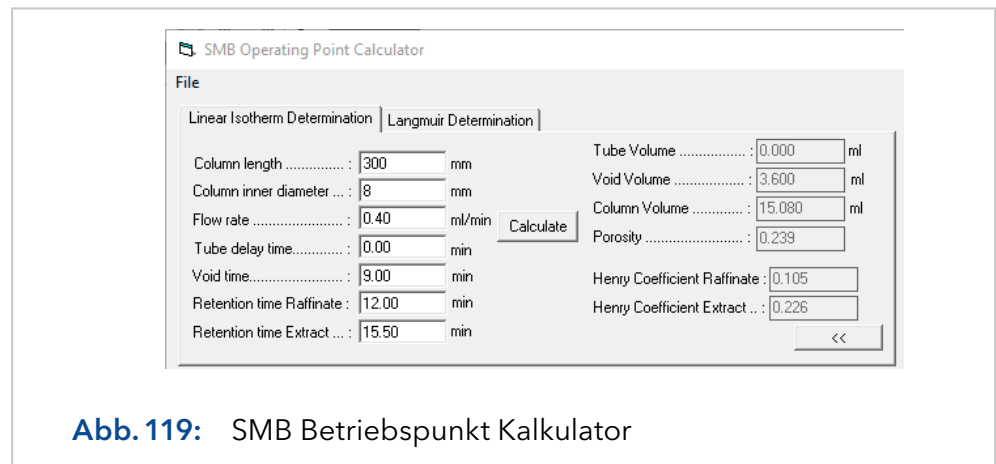
**Abb. 118:** SMB Parameters

- Durch Betätigen der Schaltfläche *APPLY* werden die Änderungen übernommen.
- *APPLY & SAVE* übernimmt die Änderung und überschreibt die Zeittabelle.
- Mit *CANCEL* kann eine anstehende Änderung abgebrochen werden.
- *CLOSE* schließt das SMB Parameters-Fenster.

### 18.5.5 SMB Operating Point Calculator (SMB Betriebspunkt Kalkulator)

Der SMB Betriebspunkt Kalkulator kann über die Zeittabelleneinstellung in der Registerkarte SMB oder über die SMB Parameter Einstellungen

geöffnet werden. Abhängig von der Form der Adsorptionsisothermen kann der Separationsbereich berechnet werden.



**Abb. 119:** SMB Betriebspunkt Kalkulator

Für beide Ansätze müssen zuerst in der Registerkarte Linear Isotherm Determination im linken oberen Bereich die Ausgangswerte bekannt sein.

- *COLUMN LENGTH* und *COLUMN INNER DIAMETER* gibt die Säulendimension an.
- *FLOW RATE* gibt die Flussrate der Batch-Versuche an.



**Hinweis:** Um die weiteren Angaben zu bestimmen, verwenden Sie die angegebene Flussrate.

- *TUBE DELAY TIME* gibt die Verzögerung durch das Totvolumens der Kapillaren zum verwendeten Detektor an.
- *VOID TIME* gibt die Retentionszeit eines Totzeitmarkers durch die Säule an.
- *RETENTION TIME RAFFINATE* gibt die Retentionszeit der schwächer adsorbierenden Komponente an.
- *RETENTION TIME EXTRACT* gibt die Retentionszeit der stärker adsorbierenden Komponente an.

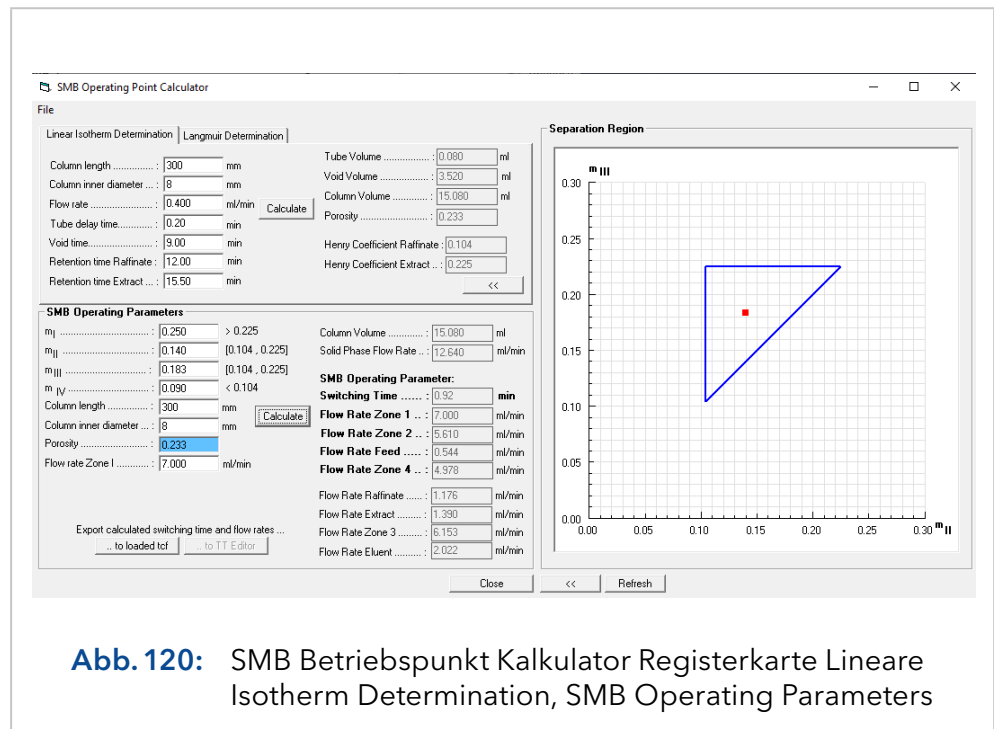
Über die Schaltfläche  werden die Parameter Tube Volume, Void Volume, Column Volume, Porosity, Henry Coefficient Raffinate und Henry Coefficient Extract berechnet. Automatisch werden die blau markierten Werte im SMB Betriebspunkt Parameter Bereich aus den vorherigen Angaben eingetragen.

Ist von einer linearen Adsorptionsisotherme auszugehen, kann in der Registrierkarte *LINEAR ISOTHERM DETERMINATION* das Separationsdreieck bestimmt werden. Durch die berechneten Parameter wird ein theoretisches Trennfenster auf Basis der Triangle-Theorie bestimmt.

Im Bereich *SMB OPERATING PARAMETERS* können die m-Werte frei innerhalb der Grenzen gewählt werden. Befindet sich ein Wert außerhalb der Grenzen, erscheint eine Fehlermeldung und der Wert wird rot markiert.

Über die Schaltfläche  werden die Parameter für den SMB-Betrieb berechnet. Anschließend können Sie die folgenden Schaltflächen verwenden.

- öffnet die Visualisierung des Separationsdreiecks
- schließt die Visualisierung des Separationsdreiecks
- die berechneten SMB-Parameter werden in das geöffnete SMB Parameters Fenster geladen.
- die berechneten SMB-Parameter werden in das geöffnete Zeittabellen Fenster geladen.

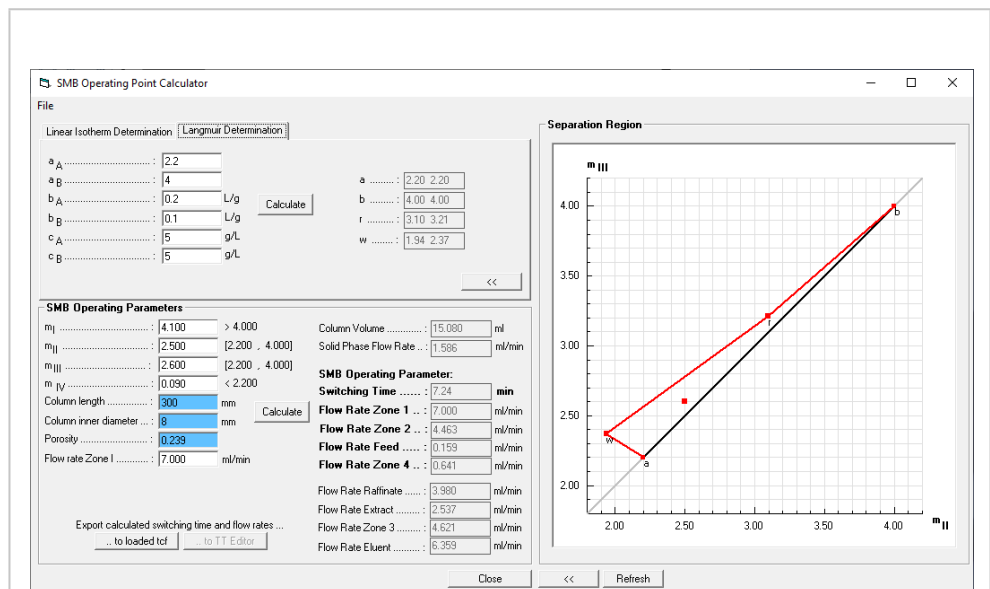


**Abb. 120:** SMB Betriebspunkt Kalkulator Registerkarte Lineare Isotherm Determination, SMB Operating Parameters

Nicht lineare Isothermen können über die Registerkarte Langmuir Determination berechnet werden. Die folgenden Parameter sind zu bestimmen:

- $a_A$  gibt die Adsorptionsfähigkeit des Extrakts an.
- $a_B$  gibt die Adsorptionsfähigkeit des Raffinats an.
- $b_A$  gibt die Gleichgewichtsadsorptionskonstante des Extrakts an.
- $b_B$  gibt die Gleichgewichtsadsorptionskonstante des Raffinats an.
- $c_A$  gibt die Konzentration des Extrakts im Feed an.
- $c_B$  gibt die Konzentration des Raffinats im Feed an.

Über die Schaltfläche  werden die m-Werte für das theoretische Trennfenster bestimmt.



**Abb. 121:** SMB Betriebspunkt Kalkulator Registerkarte Langmuir Determination

Innerhalb der Grenzen sind die  $m$ -Werte frei wählbar. Ist ein Wert außerhalb kommt es zu einer Fehlermeldung und der Wert wird rot markiert.

Über die Schaltfläche **Calculate** werden die Parameter für den SMB-Betrieb berechnet. Anschließend können die folgenden Schaltflächen verwendet werden:

- **>>** öffnet die Visualisierung des Separationsregion.
- **<<** schließt die Visualisierung des Separationsregion.
- **.. to loaded tcf** die berechneten SMB-Parameter werden in das geöffnete SMB Parameters Fenster geladen.
- **.. to TT Editor** die berechneten SMB-Parameter werden in das geöffnete Zeittabellen Fenster geladen

## 18.5.6 Visualisierung

Die Visualisierung stellt das SMB-System inklusive der Pumpenflussraten, Pumpendrucke, Ventilpositionen, Säulenpositionen, Zykluszeit, verbleibenden Zykluszeit und der Anzahl der Zyklen anschaulich dar.

Die Visualisierung unterscheidet sich je nach ausgewählter Säulenkonfiguration.

- durch Betätigen der Schaltfläche werden alle Ventile um +1 Position geschaltet. Damit wird die Bewegung der Säulen um eine Position simuliert.


Bei den Zonenkonfigurationen 2:2:2:2 und 1:3:3:1 sind die Ventilpositionen festgelegt und nicht veränderbar. Ist die Säulenkonfiguration auf *USER DEFINED* eingestellt, können die Ventilschaltungen nach Benutzerwunsch angepasst werden.

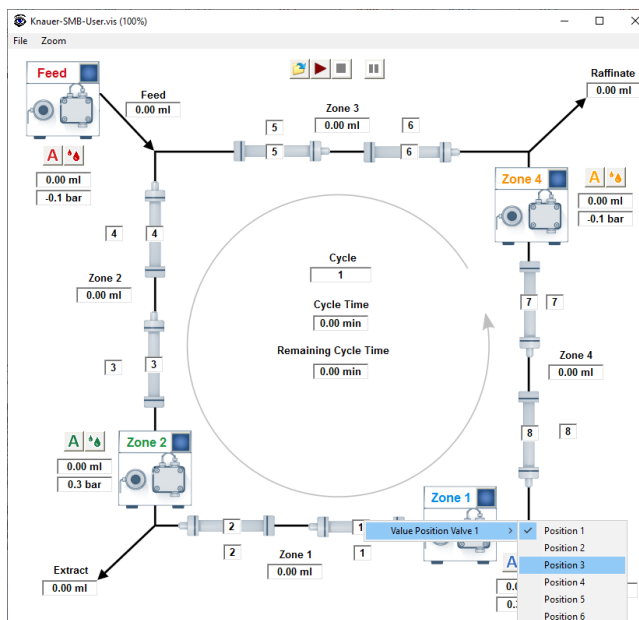


Folgendes Vorgehen ist zu beachten:

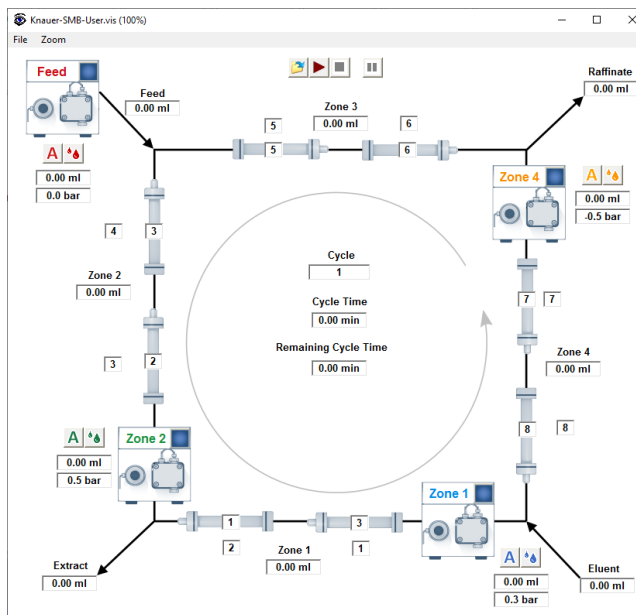
## Vorgehensweise

### Ablauf

1. Öffnen Sie die Visualisierung über die Schaltfläche .
2. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Säulensymbol, um die Ventilposition auszuwählen.



3. Bestätigen Sie die Auswahl. Die Nummer der Spalte ändert sich je nach eingestellter Ventilschaltung.



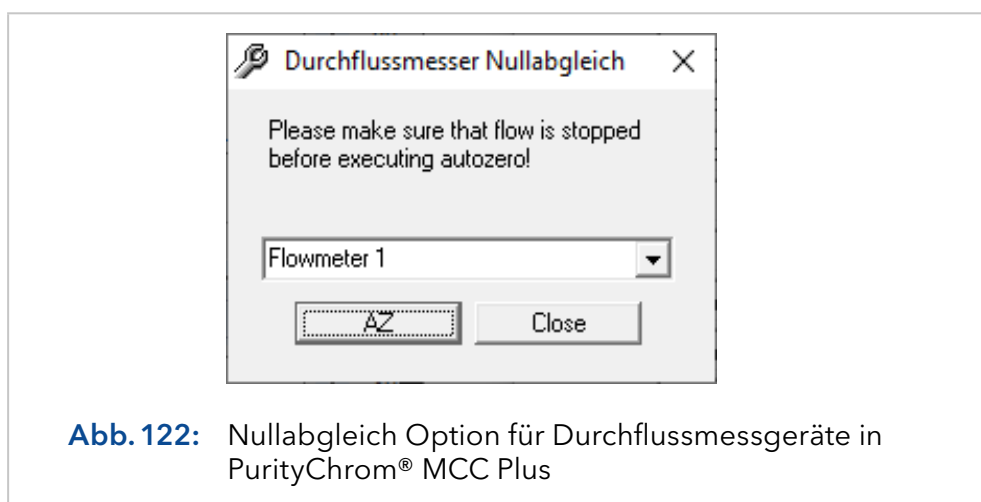
## 19. Einrichtung spezieller Geräte in PurityChrom® MCC Plus

### 19.1 Erweiterte Funktionalitäten für Durchflussmesser unter PurityChrom® MCC Plus

In PurityChrom® MCC Plus können bis zu 8 Durchflussmessgeräte (Flowmeter) in einem System überwacht werden. Diese Durchflussmessgeräte können über einzelne RS-232-Verbindungen oder über ein BUS-System gesteuert werden, indem nur eine RS-232-Schnittstelle für die Einbindung aller bis zu 8 Flowmeter benötigt wird. Die Software kann automatisch nach den angeschlossenen Flowmetern suchen. Dazu müssen in der Datei PurityChrom.ini die beiden Einträge [BronkFlow] SearchNodes=1 und SearchRange=1,8 verwendet werden (siehe Kapitel „21.2 PurityChrom® MCC Plus:

Die Einträge in der Datei PurityChrom.ini“ auf Seite 160).

Auch kann in PurityChrom® MCC Plus ein Autozero des Flowmeters durchgeführt werden. Öffnen Sie dazu das Fenster *DURCHFLUSSMESSER NULLABGLEICH* über die Registerkarte *STEUERUNG* im Hauptfenster. Bevor Sie diese Option nutzen, stoppen Sie die Pumpen des Systems und vergewissern Sie sich, dass das Durchflusssignal stabil ist, indem Sie einige Minuten nach dem Stoppen der Pumpen warten. Wählen Sie dann den entsprechenden Durchflussmesser und drücken Sie die AZ-Taste für den Nullabgleich. Die Anzeige des Flowmeters im Hauptfenster wird „-99999“ anzeigen, solange die Autozero-Prozedur noch läuft. Dieser Vorgang wird einige Sekunden dauern.

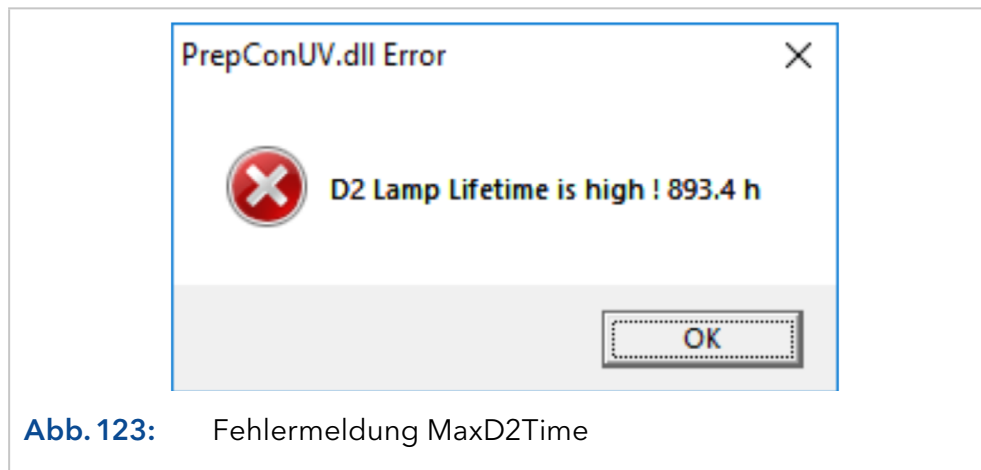


**Abb. 122:** Nullabgleich Option für Durchflussmessgeräte in PurityChrom® MCC Plus

## 20. Fehlerbehebung

### 20.1 Fehlermeldung Lampenlebensdauer

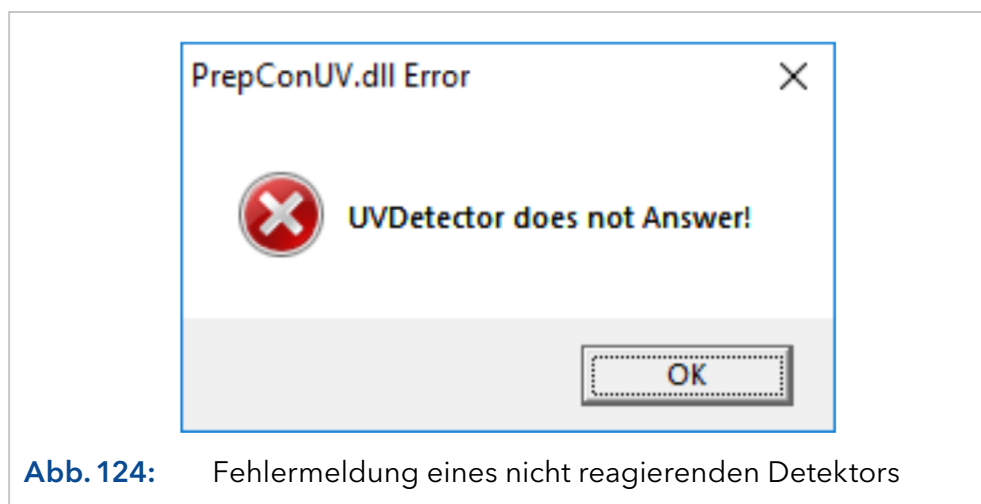
Nach dem Start von PurityChrom® mit einer eingestellten MaxD2Time=XXXX (1-2000) in der .ini-Datei erscheint ein Popup-Fenster, wenn der eingestellte Wert für die Lampenlebensdauer überschritten wird.



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

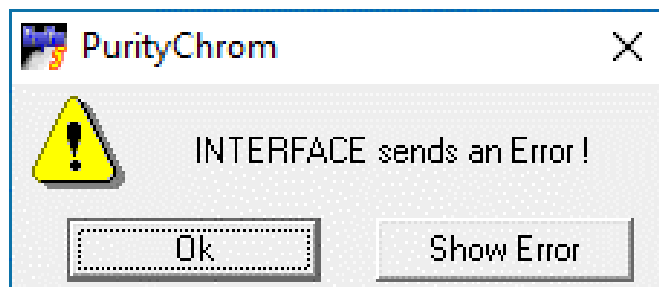


**Hinweis:** Wenn die Meldung nicht sofort bestätigt wird, reagiert der Detektor nicht und es wird kein UV-Signal ausgegeben. Starten Sie die Software neu und bestätigen Sie die Meldung sofort oder setzen Sie MaxD2Time = 0 in der .ini-Datei, damit die Lampenlebensdauer nicht mehr beim Starten der Software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



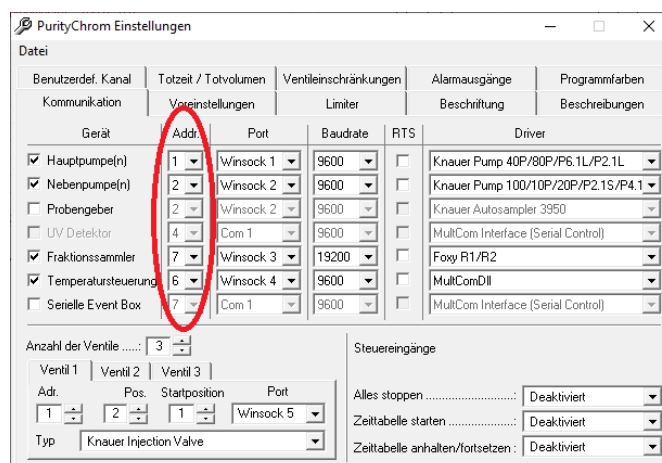
## 20.2 Kommunikationsfehler „Interface sends an error“

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



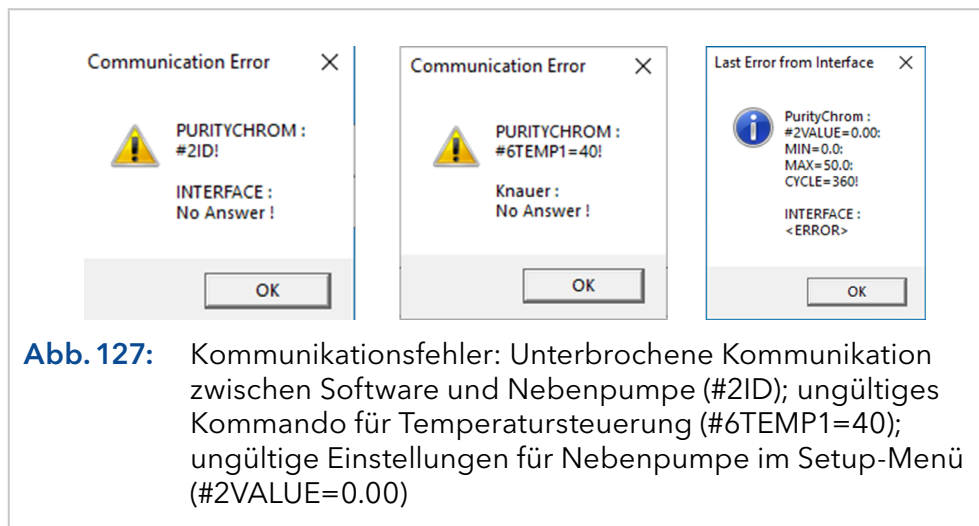
**Abb. 125:** Allgemeine Fehlermeldung, Interface sends an Error

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. 126:** 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.



**Abb. 127:** Kommunikationsfehler: Unterbrochene Kommunikation zwischen Software und Nebenpumpe (#2ID); ungültiges Kommando für Temperatursteuerung (#6TEMP1=40); ungültige Einstellungen für Nebenpumpe im Setup-Menü (#2VALUE=0.00)

## 20.3 Fehlermeldungen infolge der Installation von PurityChrom®

Wenn die Installation von PurityChrom® nicht korrekt durchgeführt wurde, können einige der folgenden Fehlermeldungen erscheinen. Den korrekten Installationsvorgang können Sie der Installationsinformation ([V2655A](#)) entnehmen.

Bitte beachten Sie im Falle einer Fehlermeldung die folgenden Empfehlungen:

Fehlermeldung	Empfohlene Maßnahmen
„PrepCon5.dll not found“	<ul style="list-style-type: none"> <li data-bbox="1002 1149 1461 1283">■ Installieren Sie Redistributable vc_redist.x86.exe erneut. Sie finden es unter: C:/PurityChrom/DriverDll.</li> <li data-bbox="1002 1294 1461 1496">■ Stellen Sie sicher, dass alle Treiber korrekt installiert wurden. Lesen Sie dazu die aktuellen Installationsinformationen oder den Installation Guide zur PurityChrom®.</li> <li data-bbox="1002 1507 1461 1709">■ Überprüfen Sie alle aktiven Antivirenprogramme auf dem Computer und stellen Sie sicher, dass keine Komponenten von PurityChrom® blockiert werden.</li> </ul>

Fehlermeldung	Empfohlene Maßnahmen
"Component `---.ocx` or one of its dependencies not correctly registered: a file is missing or invalid."	<ul style="list-style-type: none"><li>■ Deinstallieren Sie PurityChrom® und führen Sie die Installation erneut durch.</li><li>■ Stellen Sie sicher, dass Sie die Installation als Administrator ausführen und dass der aktive Windows-Benutzer über administrative Rechte im Netzwerk bzw. auf dem Computer verfügt.</li><li>■ Öffnen Sie PurityChrom® auch als Administrator, zumindest beim ersten Mal nach der Installation.</li></ul>
Konfiguration von Systemkomponenten (insbesondere Pumpen und Autosampler) wird unterbunden	<ul style="list-style-type: none"><li>■ Stellen Sie sicher, dass Sie die Option „Beta: Unicode UTF-8“ unter den Regionseinstellungen des Computers deaktiviert haben (Windows-Einstellungen → Zeit &amp; Sprache → Region → Zusätzliche Datums-, Zeit- und Regionseinstellungen → Region → Verwaltung → Systemlokalisierung ändern → „Beta: Unicode UTF-8 für weltweite Sprachunterstützung verwenden“ deaktivieren)</li></ul>

## 21. Appendix

### 21.1 PurityChrom®: Die Einträge in der Datei PurityChrom.ini

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

	Eingaben		Erläuterung
<b>[MainWindow]</b>	AlwaysOnTop=0	[0/1]	Das Hauptfenster ist immer im Vordergrund.
	SolventConfirm=0	[0/1]	Das Starten der Pumpe mit den Eluenten-Tasten muss immer vom Benutzer bestätigt werden.
	DataPathSelection=0	[0/1]	Nach dem Laden einer Zeittabelle kann der Benutzer einen Ordner für die Ergebnisdateien auswählen.
	MultiLingual=1	[0/1]	Das Programm ist entsprechend dem Betriebssystem mehrsprachig. (0 = Englisch, 1 = Deutsch)
	DateFormat=YYYY.MM.DD	[YYYY.MM.DD]	Datumsformat des Programms
	WavelengthRequest=0	[0/1]	Bevor eine Zeittabelle gestartet wird, wird der Benutzer nach einer UV-Wellenlänge gefragt.
	MCMonitorMode=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.
<b>[Boards]</b>	Order=PCIFIRST	[PCIFIRST /ISAFIRST]	Reihenfolge der analogen Kanäle, wenn ISA- und PCI-Karten kombiniert eingesetzt werden.

	Eingaben		Erläuterung
<b>[WinsockPorts]</b>	Port1=	[IP/PORT]	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ 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.</li> <li>■ Freistehende Geräte haben die Portnummer 10001.</li> <li>■ 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.</li> <li>■ Die Fraktionssammler Foxy R1 oder R2 haben die Portnummer 23.</li> <li>■ Die Autosampler AS 3950/AS 6.1L haben die Portnummer 2101.</li> </ul>
	Port2=		
	Port3=		
	Port4=		
	Port5=		
	Port6=		
	Port7=		
	Port8=		
<b>[AutomaticDataFiles]</b>	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.
	SaveResultWith-Sequence=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)
<b>[User Company]</b>	Name=KNAUER	[Text]	Benutzerdefinierter Firmenname für alle Ausdrucke.
	FontName=Arial	[Text]	Name der Schriftart für den Firmennamen.
	FontSize=18	[Value]	Schriftgröße für den Firmennamen.



	Eingaben	Erläuterung
	FontBold=0	[ 0/1 ] Fettschrift für den Firmennamen.
	FontItalic=0	[ 0/1 ] Kursivschrift für den Firmennamen.
	FontColor=128	[ Value ] Schriftfarbe für den Firmennamen.
[Pumps]	ConstantMode-Major=0 ConstantMode-Minor=0	[ 0/1 ] Das Pumpensystem unterstützt einen konstanten Druckmodus, d.h. eine Flussratenregelung für das Arbeiten bei konstantem Druck.
	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

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

Eingaben		Erläuterung
SoftwareHPG=0	[ 1/2/3 ]  [ 0 ]	Das Hochdruck-Gradientenpumpensystem wird isokratisch oder als binärer oder ternärer Gradient eingesetzt.  Es wird ein LPG-System verwendet.
SoftwareH-PGPort2=	[ IP/Port ]	Für einen binären Gradienten wird eine freistehende Pumpe verwendet.
MixingChamber	[ Value ]	Das Volumen der angeschlossenen Mischkammer
PreciseMixing	[ 0/1 ]	Nur wichtig bei niedrigem Druckgradienten P 6.1L. Nicht von 0 auf 1 wechseln.
LimiterVolume-Minor=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  <b>Hinweis:</b> Nur für P 2.1L!	[ 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
<b>[Autosampler]</b>	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.
Alias=0	[ 0/1 ]	Der Autosampler ist ein Spark Alias.

	<b>Eingaben</b>	<b>Erläuterung</b>
	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 Software ist deaktiviert
	TubingVolu- me=15	[ µl ] Standard-Volumen der Kapillaren (Volumen zwischen Nadel und Ventil)
	FlushVolume=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 Spritzenvolu- men steuern.
	TransportLi- quid=1	[ 0/1 ] 0= Waschlösung aus Wasch- flasche 1= Waschlösung aus der Trans- portflasche, oder Vial 85, wenn 84+3 gewählt wurde
	TransportVolu- me=1	[ 1-9 ] Anzahl der Spritzenfüllungen zum Waschen
<b>[SequenceTable]</b>	MinSamplePosi- tion=0	[0 - ...] Eingabegrenze in Sequenztabelle
	MaxSamplePosi- tion=100	[0 - ...] Eingabegrenze in Sequenztabelle
	MinInjections=0	[0 - ...] Eingabegrenze in Sequenztabelle
	MaxInjections=1	[0 - ...] Eingabegrenze in Sequenztabelle
	MinVolume=0	[0 - ...] Eingabegrenze in Sequenztabelle
	MaxVolu- me=10000	[0 - ...] Eingabegrenze in Sequenztabelle
	DefaultVolu- me=100	[0 - ...] Voreinstellung in Sequenztabelle.
	OLBImport=0	[0 or 1] Importsequenz aus MassLynx-.olb- Datei ermöglichen

	<b>Eingaben</b>	<b>Erläuterung</b>
	EnableInit=0	[ 0 or 1 ] Aktiviert ein Dialogfenster beim Start einer Sequenz, das die Initialisierung ermöglicht
	Additional-Fields=0	[ 0 or 1 ] Zusätzliche Textfelder in der Sequenztabelle und im Berichtsausdruck
<b>[Collector]</b>	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.
<b>[FractionCleaning]</b>	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.
<b>[Aliquotation]</b>	Enabled=0	[ 0/1 ] Automatische Aliquotierung aktiviert/deaktiviert.
<b>[Detector]</b>	AutozeroAnnotation=1	[0/1] Bei jedem Autozero wird eine Annotation in das Chromatogramm geschrieben.

	<b>Eingaben</b>	<b>Erläuterung</b>
	CheckLampStatus=0 [ 0/1 ]	0 = Lampenstatus wird nicht überprüft, 1= Lampenstatus wird überwacht
	CheckforLeak=1 [ 0/1 ]	Lecksensor kann hier aktiviert werden
	LeakageMessage= ... [ Text ]	Nicht ändern.
<b>[ShimdazuRF20A]</b>	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
	AnswerTimeOut=1 [ Value ]	Nicht ändern.
	ConnectionTimeOut=1 [ Value ]	Nicht ändern.
<b>[KnauerUVD]</b>	Enabled=1 [ 0/1 ]	UV ist deaktiviert/aktiviert.
	IP= [ IP ]	IP-Adresse
	Port= [ Port ]	Portnummer
	BaudRate=9600 [ Value ]	Baudrate
	Wavelength1=254 [ Value ]	Voreingestellte Wellenlänge
	NDetectors=1 [ Value ]	Datenrate des Detektors
	DataRate=2 [ Value ]	Anzahl der Kanäle
	Channels=1 [ Value ]	Integrationszeit
	Integration=100 [ Value ]	Aktivieren/Deaktivieren der Integrationszeitoptimierung

Eingaben		Erläuterung	
OptimiseIT=1	[0/1]	Ihr Detektortyp (UVD 2.1S, UVD 2.1L oder MWD 2.1L)	
Type=UVD2.1S	[ Type ]	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).	
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 „20. Fehlerbehebung“ auf Seite 140).	
<b>[KnauerRID21L]</b>	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	
TimeConst=2000	[ Value ]	Zeitkonstante	
SignalMode=	[ 0/1 ]	Signal-Modus, 0=+, 1=-	
AnswerTimeOut=	[ Value ]	Nicht ändern	
ConnectionTimeOut=	[ Value ]	Nicht ändern	
Temperature=0/30-55	[ Value ]	0 = Aus 30-55 = Temperatur wird nach dem Start eingestellt	

	<b>Eingaben</b>	<b>Erläuterung</b>
	TempZone=1 [ 1-8 ]	1= [Temperatur] FunktionName1=... ... 2= [Temperatur] FunktionName2=... ...
<b>[KnauerDAD61L]</b>	Enabled=1 [ 0/1 ]	DAD ist deaktiviert/aktiviert
	IP= [ IP ]	IP-Adresse
	Port = [ Port ]	Portnummer
	Integration=100 [ Value ]	Voreingestellter Wert für die DAD-Integrationszeit.
	OptimiseIT=1 [ 0/1 ]	Aktivieren/Deaktivieren der Integrationszeitoptimierung
<b>[DAD]</b>	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.
	SliceWidth=100 [ Value ]	Voreingestellter Wert für die DAD-Slice Width.
	IntegrationTime=100 [ Value ]	Voreingestellter Wert für die DAD-Integrationszeit.
	IntegrationBandwidth=1 [ Value ]	Voreingestellter Wert für die DAD-Integrationsbandbreite.
	AutomaticReference=1 [ 0/1 ]	Automatisches Referenzspektrum nach dem Start einer Zeittabelle.
	LambertBeer=1 [ Value ]	Dieser Wert ist erforderlich. Nicht ändern!

	<b>Eingaben</b>		<b>Erläuterung</b>
<b>[KnauerIFU21]</b>	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
<b>[KnauerCM21S]</b>	Enabled=1	[ 0/1 ]	CM ist deaktiviert/aktiviert.
	IP=	[ IP ]	IP-Adresse
	Port=	[ Port ]	Portnummer
	DataRate=2	[ Value ]	Datenrate des 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
<b>[MicronLF]</b>	Enabled=0	[0/1]	Mikron 81 ist aktiviert oder deaktiviert.
	Port= --	[Port]	Portnummer
	DataRate=2	[Value]	Datenrate des Mikron 81
	Channels=1/2/3	[Value]	Anzahl der Kanäle: 1= Autozero-Leitfähigkeit in mS/cm 2= Autozero-Leitfähigkeit und Temperatur in °C 3= Autozero-Leitfähigkeit, Temperatur und Roh-Leitfähigkeitsdaten in mS/cm
	TimeConstant=1000	[Value]	Zeitkonstante des Mikron 81



	<b>Eingaben</b>	<b>Erläuterung</b>
	TempCoeff=19 [Value]	Temperaturkoeffizient, hier mit Faktor 10 anzugeben, deaktiviert mit -1
	TempRef=25 [Value]	Referenztemperatur, deaktiviert mit -1
	AnswerTimeOut=1 [0/1]	Fehlermeldung, wenn das Gerät nicht antwortet ist aktiviert/deaktiviert
	ConnectionTimeOut=1 [0/1]	Fehlermeldung bei einem Verbindungsabbruch ist aktiviert/deaktiviert
	ShowInfo=0 [0/1]	Hinweisbox über Flusszelleninformationen ist deaktiviert (0) oder aktiviert (1)
	NDetectors=1/2/3/4 [Value]	Anzahl der Mikron 81 Geräte im System
	Channelmap=1,2,3,4,5,6 [Value]	Auswahl der anzuzeigenden Kanäle bei mehreren Mikron 81 Geräten im System. Der Ini-Eintrag „Channels“ wird dann nicht verwendet (Beispiel zeigt alle Kanäle von zwei in einem System befindlichen Mikron 81 Geräten)
<b>[ThermoControl]</b>	ENABLED=0 [0/1]	Eluentenheizer ist aktiviert oder deaktiviert.
	IP=192.168.0.130 [IP]	IP-Adresse des Eluentenheizers im System
	PORT=100 [Port]	IP-Port des Eluentenheizers im System
	CHANNELS=3 [Value]	Anzahl der verwendeten Kanäle
<b>[Smartline2600]</b>	Integration=20 [Value]	Integrationszeit von KNAUER Smartline DAD.
<b>[Calibration]</b>	p0=1.900000000E+002 [Value]	Kalibrationsfaktor 0 des DAD.
	p1=2.000000000E+000 [Value]	Kalibrationsfaktor 1 des DAD.
	p2=0.000000000E+000 [Value]	Kalibrationsfaktor 2 des DAD.

	<b>Eingaben</b>	<b>Erläuterung</b>
	p3=0.000000 000E+000	[ Value ] Kalibrationsfaktor 3 des DAD.
	p4=0.000000 000E+000	[ Value ] Kalibrationsfaktor 4 des DAD.
<b>[Eventbox]</b>	PulseLength=0.5	[ 0.1- ... ] Pulslänge der Ausgänge der Event Box in Sekunden
<b>[SignalInverting]</b>	EventBox=0 Gameport=0	[ 1-12 ] [ 1-4 ] Aufgelistete EventBox- oder Gameport-Eingänge werden invertiert.
<b>[Temperature]</b>	FunctionName1=...	[ Text ] Benutzerdefinierter Name der Funktion "Temperatur 1".
	FunctionName2=...	[ Text ] Benutzerdefinierter Name der Funktion "Temperatur 2".
	StirrerSpeed=150	[ Value ] Drehzahl des Heizungsührers.
<b>[MultiSystem]</b>	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.
<b>[IntegrationPresets]</b>	Integratelnhibit=0	[ 0/ ... ] Datenkanäle, die nicht automatisch integriert werden sollen, sind durch Komma getrennt anzugeben.
	MaxBaselineLevel=250	[ Value ] Voreingestellte Werte für die Integration außerhalb Peakfenster (siehe Kapitel 12 auf Seite 97).
	FilterFactor=5	[ 5-15 ]

	<b>Eingaben</b>	<b>Erläuterung</b>
	SlopeSensitivity=500	[ Value ]
	AreaDelay=0	[ 0/1 ] Aktiviert ein Eingabefeld in der Schwellwertprogrammierung, in das eine Verzögerungszeit für die Ausführung eingegeben werden kann.
	TailingFactor=0	[ 0/1 ] Anstelle der Asymmetrie wird der Tailing-Faktor berechnet.
<b>[SolventSupply]</b>	AnalogA=0	[ 1-8 ] Nummer des Kanals, der das Füllstandsignal von Lösungsmittel A aufzeichnet.
	AnalogB=0	[ 1-8 ] Nummer des Kanals, der das Füllstandsignal von Lösungsmittel B aufzeichnet.
	AnalogC=0	[ 1-8 ] Nummer des Kanals, der das Füllstandsignal von Lösungsmittel C aufzeichnet.
	AnalogD=0	[ 1-8 ] Nummer des Kanals, der das Füllstandsignal des Lösungsmittels D aufzeichnet.
	AnalogWaste=0	[ 1-8 ] Nummer des Kanals, der das Füllstandsignal 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 Lösungsmittelpegel unter dem Minimum liegt.
<b>[WasteManagement]</b>	ValveNo=1	[ Value ] Nummer des Abfall-/Fraktionsventils bei Verwendung der Abfallwirtschaft.
	BypassValve=0	[ Value ] Nummer des Bypass-Ventils bei Verwendung der Abfallwirtschaft.
	Volume=10000	[ Value ] Volumen von Abfallbehältern bei der Abfallwirtschaft.
	ErrorInput=0	[ Value ] Nummer des Event Box-Eingangs für ein Fehlersignal.

	Eingaben	Erläuterung
	Soundfile=Fehler.wav	[*.wav] Audio-Datei, die beim Auftreten eines Fehlers automatisch abgespielt wird.
[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 Nebentpumpe, wenn P 6.1L oder P 2.1L
	LeakageCount-down=120	[Value] 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	[Value] Ventilnummer zum Abdichten des Eluenten A.
	EluentValveB=3	[Value] Ventilnummer zum Abdichten des Eluenten B.
	EluentValveC=4	[Value] Ventilnummer zum Abdichten des Eluenten C.
	EluentValveD=5	[Value] Ventilnummer zum Abdichten des Eluenten D.
[LeakageKnauer ASM]	Enabled=0	[0/1] Leckagesensor eines ASM kann aktiviert werden.
	IP=	[IP] IP-Adresse vom ASM
	Port=	[Port] Portnummer für den gesamten ASM.
	<b>Hinweis:</b> Es kann nur ein ASM-Lecksensor eingebaut werden, 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

	Eingaben		Erläuterung
<b>[DemoMode]</b>	Chromatogram=* .rfp	[*.rfp]	Ergebnisdatei für ein simuliertes Chromatogrammsignal im Demo-Modus.
<b>[Visualisation]</b>	ValvePartitioning=0	[Value]	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.
<b>[TandemValve]</b>	Index=0	[Value]	Nummer des Tandemventils
	SecondWinsockPort=1	[Value]	Nummer des Winsock-Anschlusses des 2. Ventils
	PositionRequest=0	[0/1]	Bevor die Zeittabelle gestartet wird, wird der Benutzer nach einer Ventilstellung gefragt
<b>[Recycling]</b>	Solvent=A	[A/B/C/D]	Zum Recycling verwendetes Lösungsmittel
	ValveIndex=0	[Value]	Nummer des Recycling-Ventils
	ValvePosition=2	[Value]	Ventilposition für das Recycling
<b>[SedexLC]</b>	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=... ...
<b>[PressureSensor]</b>	Enabled=0	[0/1]	Aktiviert externen Drucksensor über LAN
	IP=192.168.1.126	[IP]	IP-Adresse des ersten externen Drucksensors

	<b>Eingaben</b>	<b>Erläuterung</b>
	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
<b>[Memmert]</b>	Enabled=	[0/1] Der UN-55-Ofen ist deaktiviert/aktiviert.
	IP=	[IP] IP-Adresse
	Tmax=	[Value] Max. Temperatur
<b>[Microsaic]</b>	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.
<b>[SMB]</b>	MaxCycleCounter=10 MaxElapsedValue=1440 MaxTTLines=500	[Value] Maximale Anzahl an Zyklen bzw. maximale Laufzeit (in Minuten) bzw. maximale Anzahl der Zeittabellenzeilen, nach denen bei langen Methoden automatisch ein neues Chromatogramm gestartet wird.
	ACTIVE=1	[0/1] Die SMB-Steuerung ist deaktiviert/aktiviert.
	MaxCycleCounter=10 MaxElapsedValue=1440 MaxTTLines=500	[VALUE] Maximale Anzahl an Zyklen bzw. maximale Laufzeit (in Minuten) bzw. maximale Anzahl der Zeittabellenzeilen, nach denen bei langen Methoden automatisch ein neues Chromatogramm gestartet wird.

Eingaben		Erläuterung
StopPumpsNewFile=0	[0/1]	Verhindert das kurzzeitige Ausschalten der Pumpe nach Starten eines neuen Chromatogramms.

## 21.2 PurityChrom® MCC Plus: Die Einträge in der Datei PurityChrom.ini

	Eingaben		Erläuterung
<b>[MainWindow]</b>	AlwaysOnTop=0	[0/1]	Das Hauptfenster befindet sich immer im Vordergrund.
	SolventConfirm=0	[0/1]	Das Starten der Pumpe mit den Eluententasten muss immer vom Benutzer bestätigt werden.
	DataPathSelection=0	[0/1]	Nach dem Laden einer Zeittabelle kann der Benutzer einen Ordner für die Ergebnisdateien auswählen.
	MultiLingual=0	[0/1]	Das Programm ist entsprechend des Betriebssystems mehrsprachig (0 = Englisch, 1 = Deutsch).
	DateFormat=YYYY.MM.DD	[YYYY.MM.DD]	Das Datumsformat des Programms
<b>[AnalysisWindow]</b>	ChannelOrder= 1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20,21,22,23,24,25	[1,2,3,...]	Die Reihenfolge der Kanäle, wie sie im Analysenfenster angezeigt werden sollen.
<b>[Boards]</b>	Order=PCIFIRST	[PCIFIRST/ISAFIRST]	Reihenfolge der analogen Kanäle, wenn ISA- und PCI-Karten kombiniert verwendet werden.

	Eingaben		Erläuterung
[WINSOCKPORTS]	Port1= Port2= Port3= Port4= Port5= Port6= Port7= Port8= Port9= Port10= Port11= Port12= Port13= Port14= Port15= Port16= Port17= Port18= Port19= Port20= Port21= Port22= Port23= Port24= Port25= Port26= Port27= Port28= Port29= Port30=	[IP/PORT]	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ IP-Adresse und Portnummer des verwendeten Winsock-Ports. Die Portnummer wird mit einem Komma hinter der IP-Adresse angehängt.</li> <li>■ Winsock-Ports, die nicht verwendet werden, sollten keinen Eintrag haben.</li> <li>■ Freistehende Geräte haben die Portnummer 10001.</li> <li>■ Assistenten stellen maximal drei Geräte mit drei individuellen Winsock-Ports dar, mit der gleichen IP-Adresse, die sich nur im IP-Port unterscheiden. Den richtigen IP-Port entnehmen Sie bitte dem Firmware-Assistenten oder der ASM 2.1L/ASM 2.2L-Bedienungsanleitung.</li> <li>■ Der Fraktionssammler Foxy R1 bzw. R2 hat die Portnummer 23.</li> </ul>
[AutomaticDataFiles]	CSVFile=0	[0/1]	Am Ende eines Laufs wird automatisch eine Chromatogrammdatei im *.csv-Format gespeichert.



	<b>Eingaben</b>	<b>Erläuterung</b>
	FractionTable=0	[0/1] Am Ende eines Laufs wird automatisch eine Fraktionstabelle im ASCII-Format gespeichert.
<b>[USERCOMPANY]</b>	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] Fettgedruckte Schrift für den Firmennamen.
	FontItalic=0	[0/1] Kursive Schrift für den Firmennamen.
	FontColor=128	[VALUE] Schriftfarbe für den Firmennamen.
<b>[Pumps]</b>	MaxPressFactor=1	[0/1] Der maximale Druckwert wird entsprechend dem Druckbereich skaliert.
	PressureChannel=0	[0/1-16] Das Pumpendrucksignal wird über den angegebenen A/D-Wandlerkanal erfasst.
	ParameterChange=1	[0/1] Die Schaltflächen Start Pumpe 1-8 und Flussrate Pumpe 1-8 sind während eines Laufs aktiviert.
	Autozero=0	[0/1] Die Pumpenschnittstelle unterstützt einen potentialfreien Schalter für eine UV-Autozero-Funktion.
	FlowDimension=ml	[µl/ml/l] Maß für die Fördermenge der Pumpe.
	IOControl=1	[0/1] Die Pumpenschnittstelle unterstützt die Nachahmung einer Eventbox.
	MixingChamber=250	[Value] Das Volumen in µl der angeschlossenen Mischkammer

	<b>Eingaben</b>		<b>Erläuterung</b>
<b>[BronkFlow]</b>	Enabled=0	[0/1]	Deaktivieren oder Aktivieren des Bronkhorst-Durchflussmessers (Flowmeter).
	Port=5 Port2=6 Port3=7 Port4=0 Port5=0 Port6=0 Port7=0 Port8=0	[Value]	Serielle Schnittstellen der angeschlossenen Durchflussmesser
	SearchNodes=0	[0/1]	Deaktivieren oder aktivieren Sie die automatische Suche nach Durchflussmessern (Flowmetern) im System beim Start der Software.
	SearchRange=1,8	[Value,Value]	Geben Sie hier den Bereich der Knoten an, in dem die automatische Suche nach Durchflussmessern durchgeführt werden soll.
	Node1=4 Node2=5 Node3=6 Node4=0 Node5=0 Node6=0 Node7=0 Node8=0	[Value]	Knotennummern der jeweiligen Durchflussmessgeräte im System (nur einzustellen, wenn keine automatische Suche verwendet wird)
	Channels=3	[Value]	Anzahl der Datenkanäle = Anzahl der Durchflussmesser im System
	Message=0	[0/1]	Deaktivieren oder aktivieren Sie eine Informationsbox über gefundene Durchflussmesser im System beim Start der Software.

	<b>Eingaben</b>		<b>Erläuterung</b>
	Logfile=1	[0/1]	Deaktivieren oder aktivieren Sie das Logfile für alle Durchflussmesser. Falls aktiviert, werden die Logfiles automatisch unter C:\PurityChrom-MCC-Plus gespeichert.
	UseBus=1	[0/1]	Aktivieren Sie das BUS-System, um alle Durchflussmesser im System über eine Schnittstelle anzuschließen. Wählen Sie 0, um jedes Flowmeter über einzelne Schnittstellen einzubinden.
<b>[Collector]</b>	Cetac=0	[0/1]	Aktiviert die direkte Kontrolle des Cetac Fraktions-sammler
	StepAtWaste=0	[0/1]	Automatischer Fraktions-sammelschritt bei der Umstellung auf Abfall.
	HomeOutput=0	[1-12]	Eventbox-Ausgang, der den „HOME“-Befehl an den Fraktions-sammler senden soll.
	Autozero=0	[0/1]	Der Kollektor unterstützt einen potential-freien Schalter für eine UV-Autozero-Funktion.
<b>[Detector]</b>	AutozeroAnnotation=1	[0/1]	Bei jedem automatischen Nullabgleich wird ein Vermerk in das Chromatogramm geschrieben.
<b>[KnauerUVD]</b>	Enabled=0	[0/1]	UV-Detektor ist deaktiviert/aktiviert
	IP=192.168.0.64	[IP]	IP-Adresse
	Port=10001	[Port]	IP-Port-Nummer
	NDetectors=1	[Value]	Anzahl der Detektoren desselben Typs im System
	BaudRate=9600	[Value]	Baudrate

	<b>Eingaben</b>	<b>Erläuterung</b>
	Wavelength1=280 [Value]	Voreingestellte Wellenlänge
	DataRate=50 [Value]	Datenrate des Detektors
	Channels=3 [Value]	Anzahl der Kanäle
	Integration=100 [Value]	Integrationszeit, die beim Start der Software an den Detektor gesendet werden soll.
	Type=UVD2.1S [Type]	Der Typ des Detektor (UVD 2.1S, UVD 2.1L oder MWD 2.1L)
<b>[AddChKnauerUVD]</b>	Enabled=0 [0/1]	UV-Detektor ist deaktiviert/aktiviert
	IP=192.168.0.64 [IP]	IP-Adresse
	Port=10006 [Port]	IP-Port-Nummer
	IP2=192.168.0.64 [IP]	IP-Adresse des 2. UV-Detektors
	Port2=10007 [Port]	IP-Portnummer des 2. UV-Detektors
	NDetectors=2 [Value]	Anzahl der Detektoren desselben Typs im System
	BaudRate=9600 [Value]	Baudrate
	Wavelength1=280 [Value]	Voreingestellte Wellenlänge
	DataRate=50 [Value]	Datenrate des/der Detektors/en
	Channels=2 [Value]	Gesamtzahl der Kanäle
	Integration=100 [Value]	Integrationszeit, die beim Start der Software an den/die Detektor/en gesendet werden soll.
	Type=UVD21S [Type]	der Typ des/der Detektors/en (UVD 2.1S, UVD 2.1L oder MWD 2.1L)

	Eingaben		Erläuterung
<b>[KnauerDAD61L]</b>	Enabled=0	[0/1]	DAD ist deaktiviert/ aktiviert
	IP=192.168.1.110	[IP]	IP-Adresse
	Port=10001	[Port]	Port-Nummer
	Integration=100	[Value]	Voreingestellter Wert für die Integrationszeit des DAD. Dieser Wert wird beim Start der Software an den Detektor gesendet. Bitte beachten Sie, dass der Eintrag "[DAD] Integrationszeit" den gleichen Wert haben muss.
<b>[DAD]</b>	Enabled=0	[0/1]	DAD ist aktiviert oder deaktiviert.
	Diodes=1024	[Value]	Anzahl der Dioden: 256=DAD 2.1L 1024=DAD 6.1L
	ScanStart=200	[Value]	Startpunkt des Spektrums in nm
	ScanEnd=600	[Value]	Endpunkt des Spektrums in nm
	SliceWidth=100	[Value]	Voreingestellter Wert für die DAD-Slicewidth.
	IntegrationTime=100	[Value]	Voreingestellter Wert für die Integrationszeit des DAD. Dieser Wert wird beim Start der Software an den Detektor gesendet. Bitte beachten Sie, dass der Eintrag „[KNAUERDAD61L] Integration“ den gleichen Wert haben sollte.
	IntegrationBandwidth=1	[Value]	Voreingestellter Wert für die DAD-Integrationsbandbreite.
	AutomaticReference=1	[0/1]	Automatisches Referenzspektrum nach Starten einer Zeittabelle.

	<b>Eingaben</b>		<b>Erläuterung</b>
[KnauerRID21L]	Enabled=0	[0/1]	RID ist aktiviert/ deaktiviert.
	NDetectors=2	[Value]	Anzahl der RIDs im System
	IP=192.168.1.110	[IP]	IP-Adresse des ersten RIDs im System
	Port=10001	[Port]	Portnummer des ersten RIDs im System.
	IP2=192.168.1.111 Port2=10001 IP3=192.168.1.112 Port3=10001 IP4=192.168.1.113 Port4=10001	[IP] [Port]	IP-Adressen und Port- nummern der anderen RIDs im System.
	DataRate=2	[Value]	Datenrate des RID
	Channels=1	[Value]	1=RI-Signal 2=RI-Signal und Temperatur
	Temperature=35 Temperature2=35 Temperature3=35 Temperature4=35	[Value]	0=Aus 30-55=Temperatur wird nach dem Start der Soft- ware eingestellt
	TempZone=1	[1-8]	1= [Temperatur] FunktionsName1=... ... 2= [Temperatur] FunktionsName2=...
	TimeConst=2000	[Value]	Zeitkonstante des Detektors
	SignalMode=0	[0/1]	Signalmodus, 0=+, 1=-

	<b>Eingaben</b>	<b>Erläuterung</b>
	AnswerTimeOut=1 [Value]	Nicht ändern! Der Wert gibt die Zeit in Sekunden an, für die der Treiber auf eine Antwort vom Gerät wartet, bis eine Fehlermeldung in der Software erscheint.
	ConnectionTimeOut=1 [Value]	Nicht ändern! Der Wert gibt die Zeit in Sekunden an, für die der Treiber auf eine Verbindung vom Gerät wartet, bis eine Fehlermeldung bei der Software-Initialisierung erscheint.
<b>[KnauerIFU21]</b>	Enabled=0 [0/1]	IFU ist aktiviert oder deaktiviert.
	IP=192.168.1.120 [IP]	IP-Adresse des Geräts (nur bei IFU 2.1 LAN)
	Port=0 [Port]	Portnummer des Geräts
	DataRate=1 [Value]	Datenrate der IFU
	Channels=4 [Value]	Anzahl der verwendeten Kanäle
<b>[KnauerCM21S]</b>	Enabled=0 [0/1]	Der Leitfähigkeitsmonitor CM 2.1S ist aktiviert oder deaktiviert.
	IP=192.168.0.64 [IP]	IP-Adresse des 1. Detektors im System
	Port=10002 [Port]	Portnummer des 1. Detektors im System
	IP2=192.168.0.64 Port2=10003 IP3=192.168.0.64 Port3=10004 IP4=192.168.0.64 Port4=10005	IP-Adressen und Portnummern der anderen Detektoren im System
	DataRate=1 [Value]	Datenrate des Detektors

	<b>Eingaben</b>		<b>Erläuterung</b>
<b>[ThermoControl]</b>	ChannelMap=1,2,4,5,7,8,10,11	[comma separated values]	Reihenfolge der verwendeten Kanäle
	Channels=8	[Value]	Anzahl der verwendeten Kanäle.
	Enabled=0	[0/1]	Der Eleuentenheizer ist aktiviert oder deaktiviert.
	IP=192.168.0.130	[IP]	IP-Adresse des Eluentenheizers im System
	Port=100	[Port]	Portnummer des Eluentenheizers im System
<b>[Memmert]</b>	Channels=3	[Value]	Anzahl der verwendeten Kanäle
	Enabled=0	[0/1]	Der Säulenofen (Memmert) ist aktiviert oder deaktiviert.
	IP=192.168.1.120	[IP]	IP-Adresse des Säulenschanks im System
<b>[Smartline2600]</b>	TMax=60	[Value]	Maximale Temperatur des Säulenofens.
	Integration=20	[Value]	Integrationszeit des KNAUER Smartline DAD.
<b>[Calibration]</b>	p0=1.871340e+002 p1=8.299990e-001 p2=-1.090570e-006 p3=-1.707149e-008 p4=0.000000e+000	[Value]	Kalibrierungsfaktoren 0-4 des DAD.
<b>[EventBox]</b>	Pulselength=0.5	[ 0.1- ... ]	Impulslänge der Event Box Ausgänge in Sekunden.
<b>[SignalInverting]</b>	EventBox=0 GamePort=0	[1-12] [1-4]	Aufgelistete Event Box- oder Gameport-Eingänge wird invertiert.
<b>[Temperature]</b>	FunctionName1=Column Oven	[Text]	Benutzerdefinierter Name der Funktion "Temperatur 1".
	FunctionName2=Sample Heater	[Text]	Benutzerdefinierter Name der Funktion "Temperatur 2".



	<b>Eingaben</b>		<b>Erläuterung</b>
<b>[IntegrationPresets]</b>	StirrerSpeed=150	[Value]	Drehzahl des Säulenofen-Lüfters.
	IntegrateInhibit=0	[0/ ...]	Datenkanäle, die nicht automatisch integriert werden sollen, sind durch Kommata getrennt anzugeben.
	MaxBaselineLevel=250 FilterFactor= 5 SlopeSensitivity=500	[Value] [5-15] [Value]	Voreingestellte Werte für die Integration außerhalb der Peak-Fenster.
	AreaDelay=0	[0/1]	Aktiviert ein Eingabefeld in der Schwellwertprogrammierung, in das eine Verzögerungszeit für die Ausführung eingegeben werden kann.
	TailingFactor=0	[0/1]	Wählen Sie 1, wenn anstelle der Assymetrie der Tailing-Faktor berechnet werden soll.
<b>[SolventSupply]</b>	AnalogA=0 AnalogB=0 AnalogC=0 AnalogD=0 AnalogWaste=0	[1-16]	Nummer des Kanals, der das Füllstandsignal von Lösungsmittel A-D oder Abfall aufzeichnet.
<b>[WasteManagement]</b>	SoundfileWaste=Fehler.wav	[.wav]	Audio-Datei, die automatisch abgespielt wird, wenn der Abfallpegel den Höchstwert erreicht.
	SoundfileSolvents=Fehler.wav	[.wav]	Audio-Datei, die automatisch abgespielt wird, wenn der Lösungsmittelgehalt unter dem Minimum liegt.
	ValveNo=1	[Value]	Nummer des Abfall-/Fraktionsventils bei Verwendung des Abfallmanagements.
	BypassValve=2	[Value]	Nummer des Bypass-Ventils bei Verwendung des Abfallmanagements.

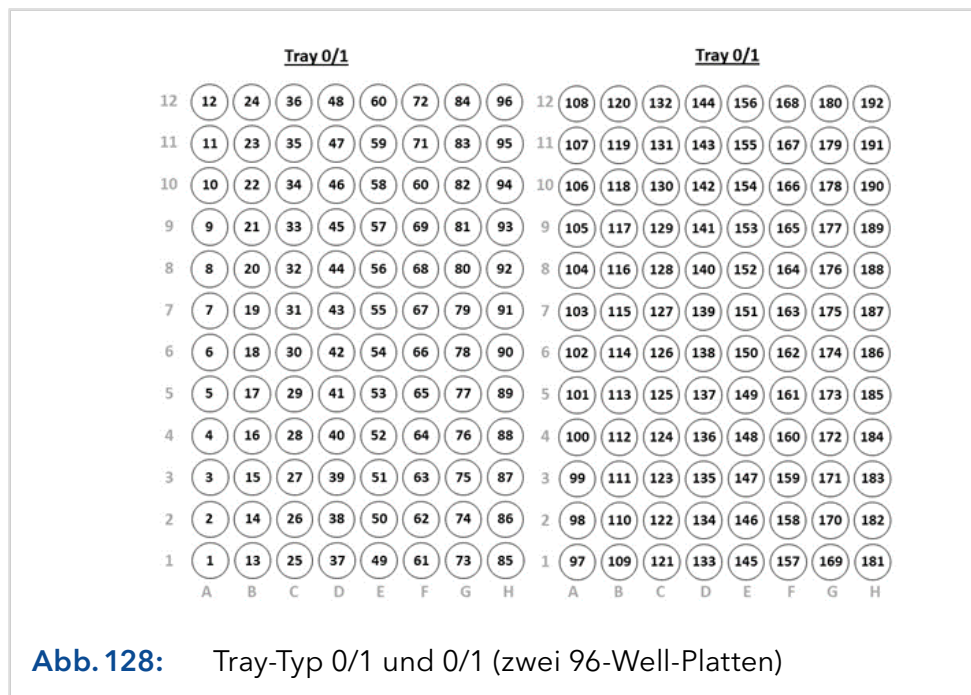
	<b>Eingaben</b>	<b>Erläuterung</b>
	Volume=10	[Value] Volumen von Abfallbehältern bei Nutzung der Abfallwirtschaft.
	ErrorInput=1	[Value] Nummer des Event Box Eingangs für ein Fehlersignal.
	Soundfile=Fehler.wav	[*.wav] Audio-Datei, die automatisch abgespielt wird, wenn ein Fehler auftritt.
<b>[LeakageInput]</b>	LeakageInput1=3 LeakageInput2=0 LeakageInput3=0 LeakageInput4=0	[1-12] Event Box Eingang für Leckagesensoren.
	LeakageCountdown=0	[Value] Countdown in Sekunden, bis das System nach der Erkennung eines Lecks gestoppt wird.
	Soundfile=SysAlert.wav	[*.wav] Audio-Datei, die automatisch abgespielt wird, wenn eine Leckage auftritt.
	WindowsShutdown=0	[0/1] Aktivieren/Deaktivieren des Herunterfahrens von Windows im Falle einer Leckage
	Message1=Leakage detected Pump Message2=Leakage detected Pump Message3= Message4=	[Text] Text der Fehlermeldung, die im Falle einer Leckage angezeigt werden soll.
	EluentValveA=0 EluentValveB=0 EluentValveC=0 EluentValveD=0	[Value] Ventilnummer zum Verschließen des Eluenten Lösungsmittel A-D.

	Eingaben		Erläuterung
[LeakageKnauerASM]	Enabled=0	[0/1]	Der Leckagesensor eines ASM kann aktiviert werden.
	IP=192.168.1.105	[IP]	IP-Adresse des ASM
	Port=10001	[Port]	Portnummer für den gesamten ASM.
[DemoMode]	Chromatogram=C:\PurityChrom-MCC-Plus\Data\ResultFileExample_0001.rfp	[*.rfp]	Ergebnisdatei für ein simuliertes Chromatogramm im Demomodus.
[Visualisation]	ValvePartitioning=0	[Value]	Nummer des Fraktionsventils, das in horizontale Segmente unterteilt werden soll. Ein Doppelklick auf ein Segment schaltet das Ventil auf die entsprechende Positionsnummer und nicht auf die nächste Position.
[Recycling]	Solvent=A	[A/B/C/D]	Für das Recycling verwendetes Lösungsmittel
	ValveIndex=0	[Value]	Nummer des Recycling-Ventils
	ValvePosition=2	[Value]	Standpunkt zum Recycling

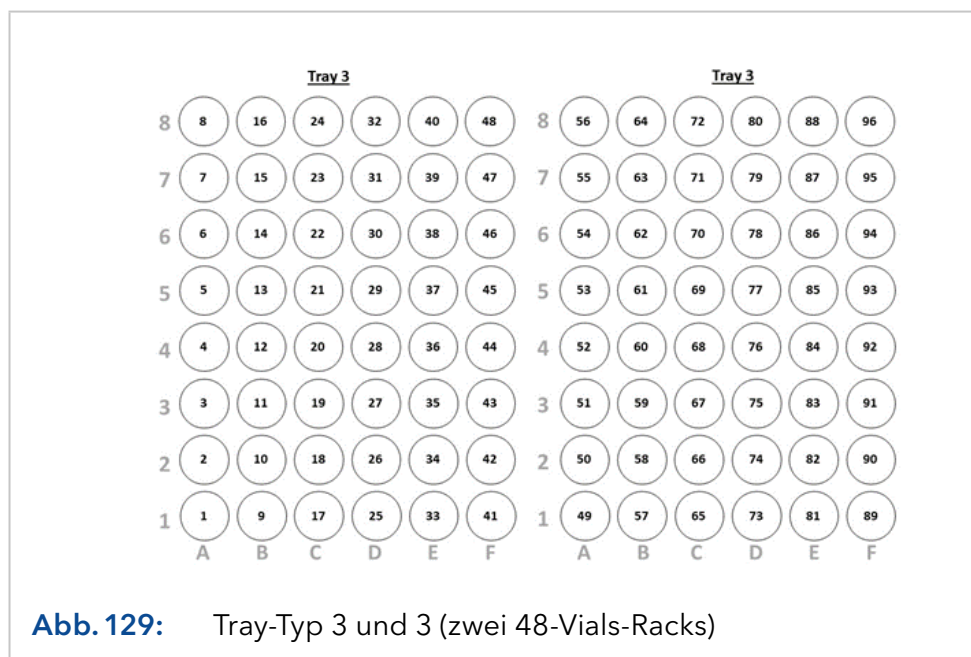
### 21.3 PurityChromfile-Typen

- \*.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.

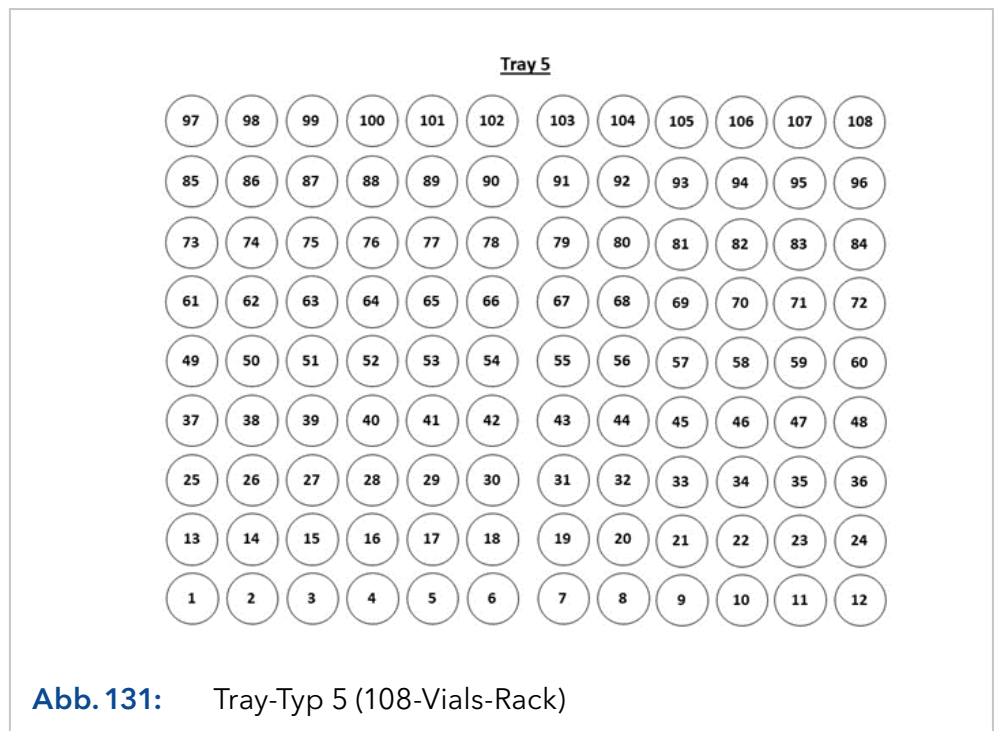
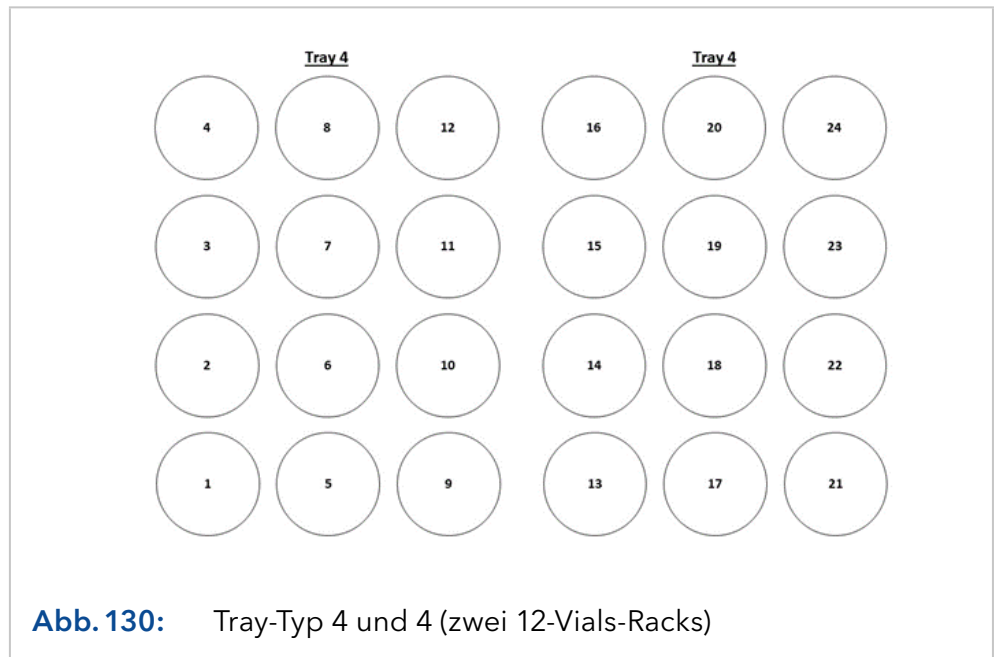
## 21.4 Kombination von Autosampler Tray-Typen

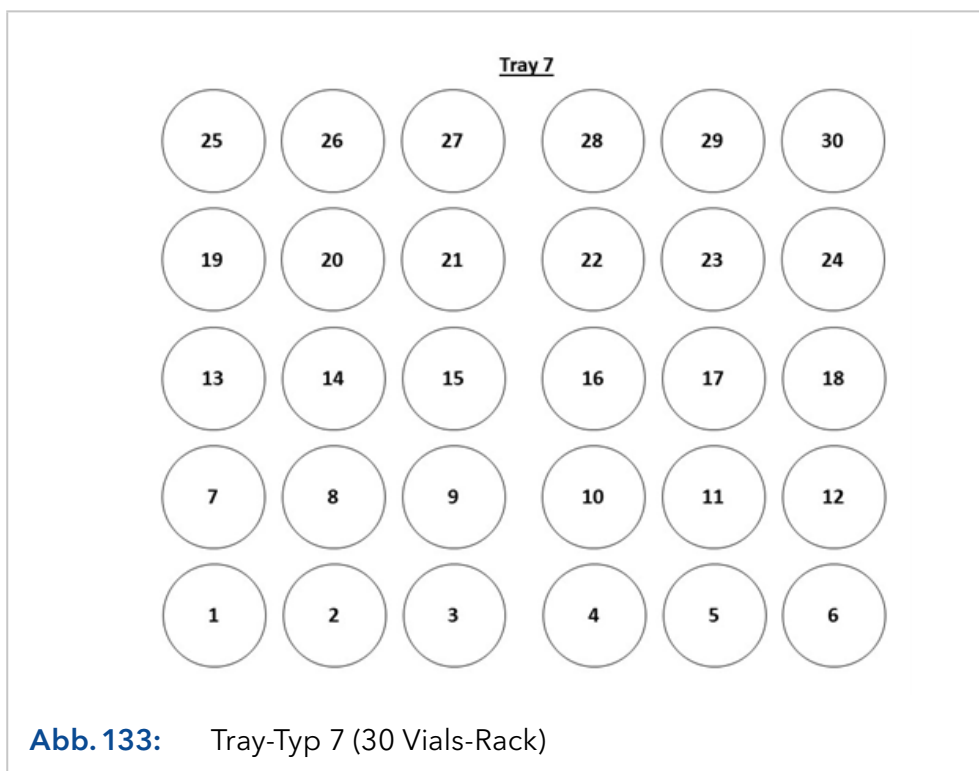
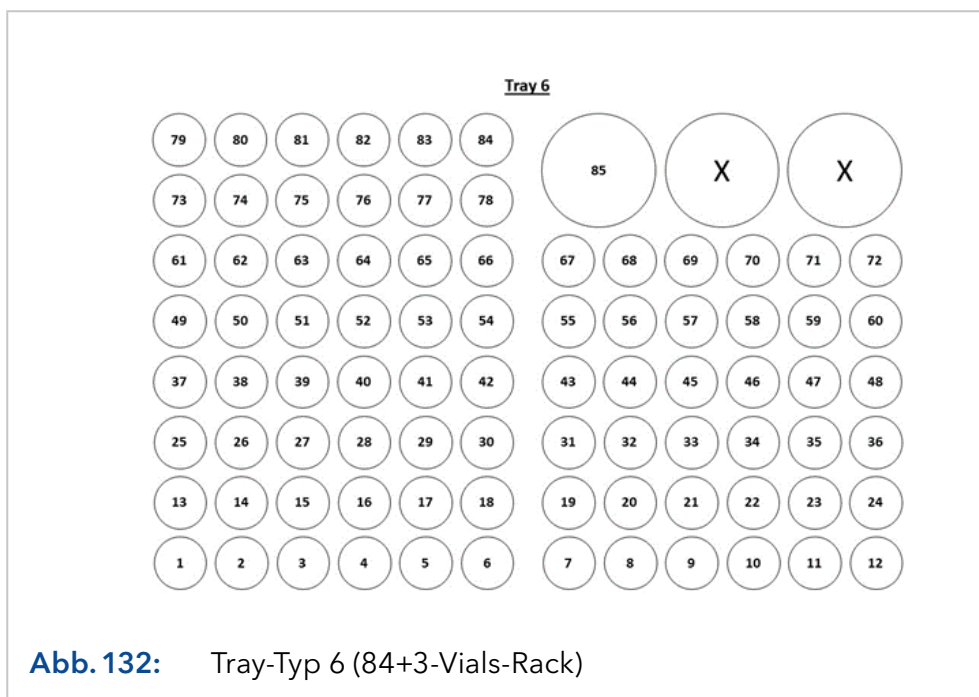


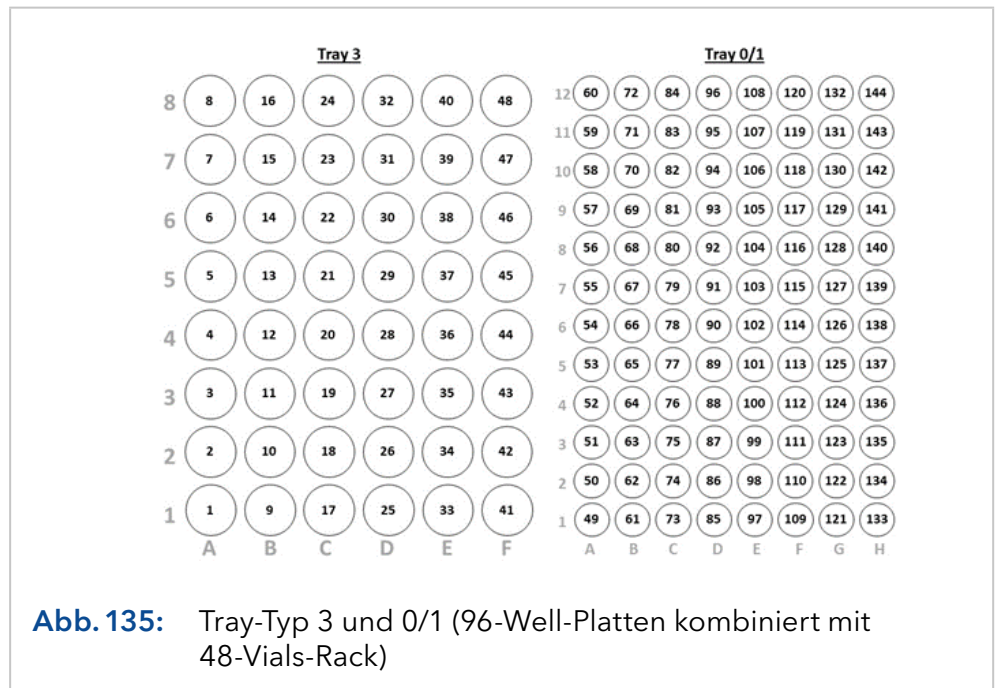
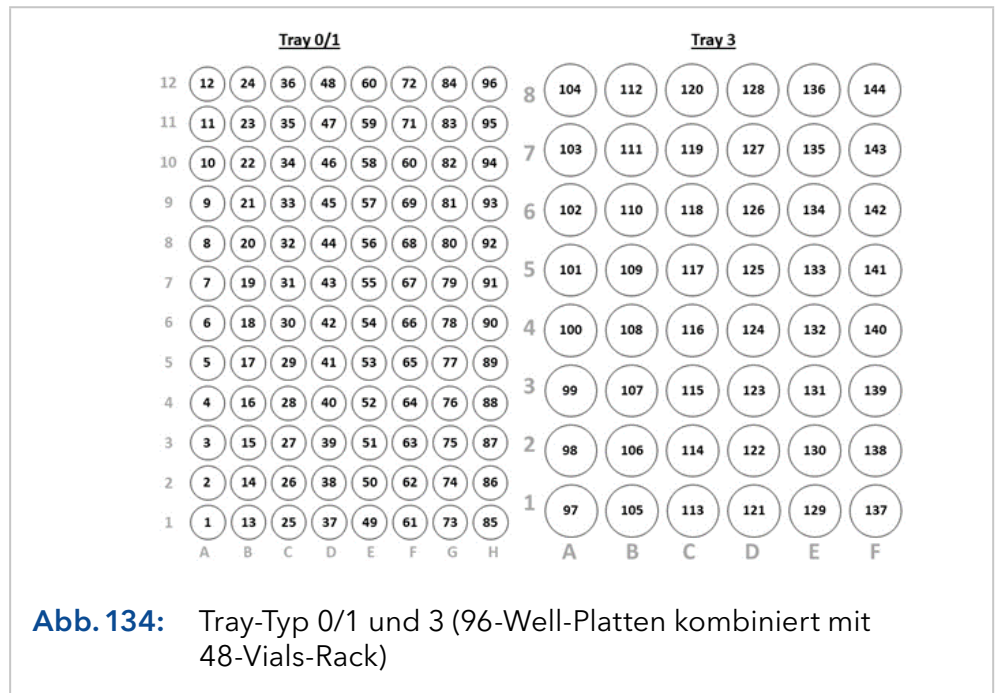
**Abb. 128:** Tray-Typ 0/1 und 0/1 (zwei 96-Well-Platten)

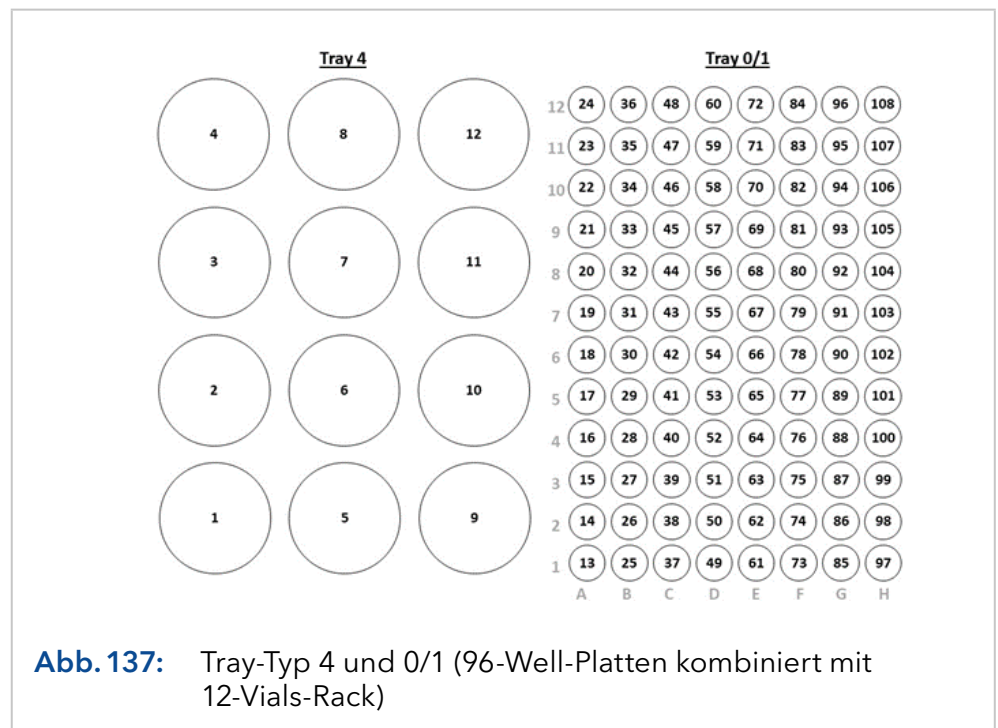
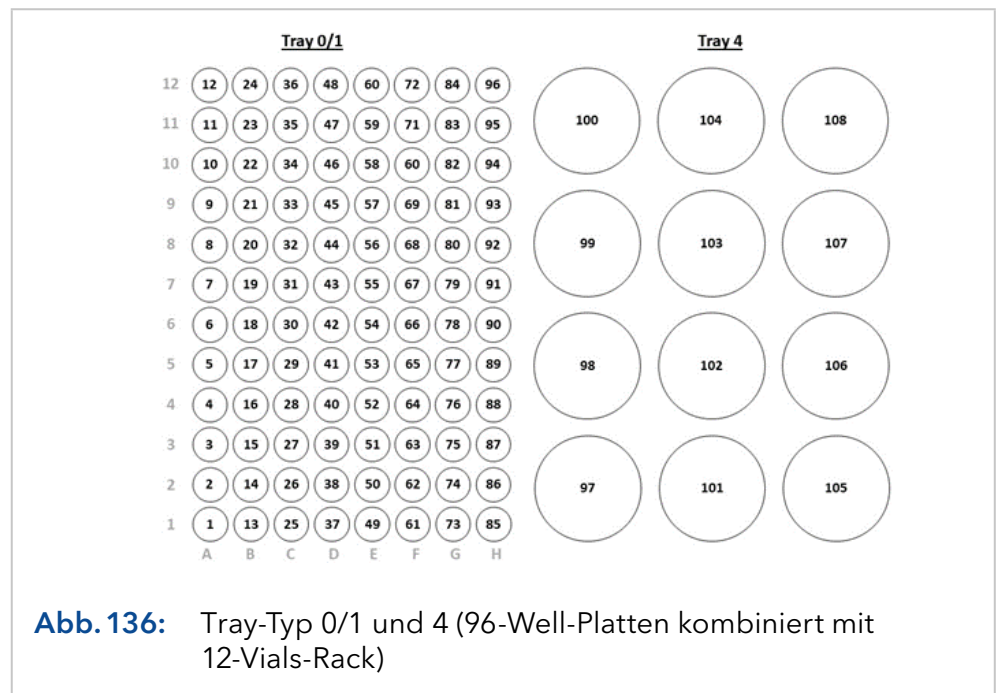


**Abb. 129:** Tray-Typ 3 und 3 (zwei 48-Vials-Racks)

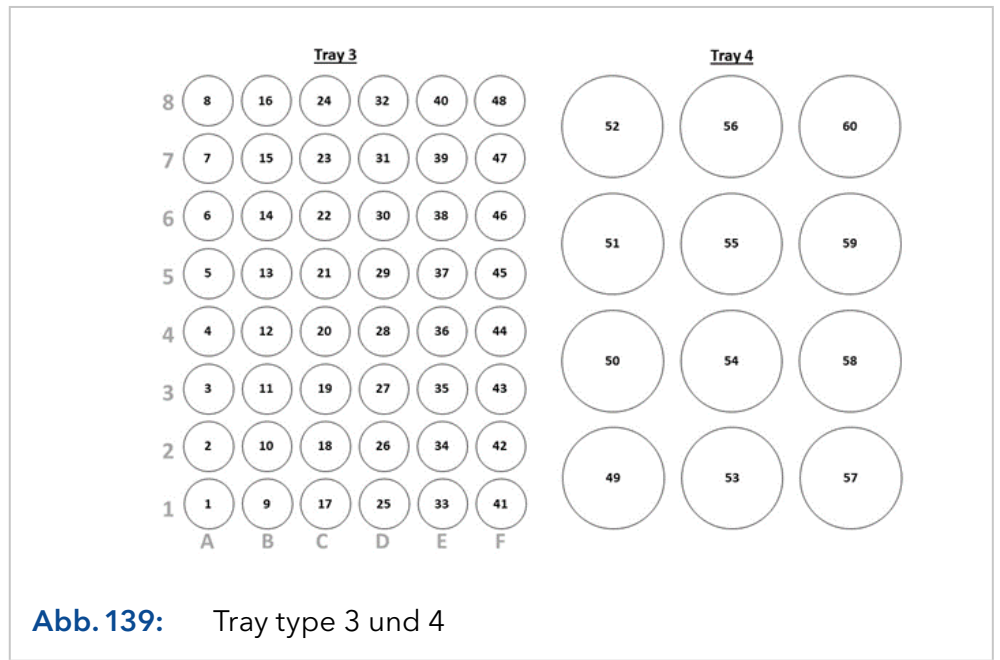
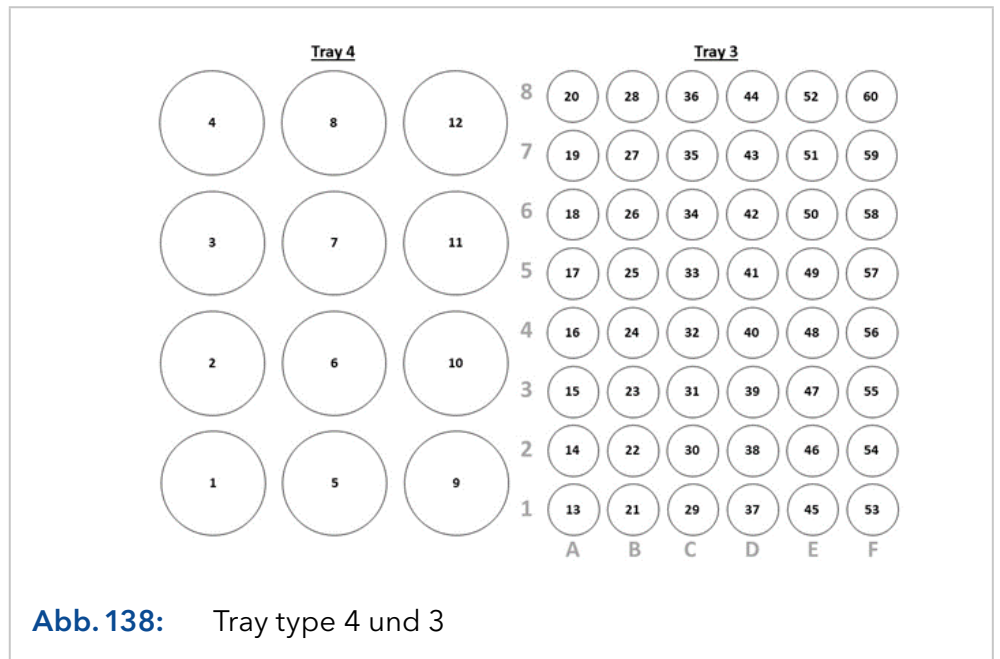












Science with Passion



Aktuelle KNAUER Betriebsanleitungen online:  
[www.knauer.net/bibliothek](http://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](mailto:info@knauer.net)  
Internet: [www.knauer.net](http://www.knauer.net)