

QuickStart



PeakSimple für Windows

Kurzanleitung
Installation & Erste Schritte

1	Vorweg	3
2	Softwareinstallation	4
2.1	Anschluss des Gaschromatographen an den Computer	4
2.2	Installation der Software	4
2.3	Installation des USB-Treibers	7
3	Erster Start	10
3.1	Einrichten des Daten-Interfaces	12
3.2	Kanäle und Zeitbasen	14
3.3	Laden eines Datensatzes	17
3.4	Einstellen der Darstellungsgrenzen	19
3.5	Komponenten zuordnen	21
3.6	Peaks integrieren	25
3.7	Manuelle Veränderung der Basislinie	27
3.7.1	Basislinientool „None“	28
3.7.2	Basislinientool „Drop“	28
3.7.3	Basislinientool „Based“	29
3.7.4	Basislinientool „Rubber Band“	29
3.8	Das Basislinientool „Reverse“	30
3.8.1	Das Basislinientool „Inhibit“	31
3.8.2	Weitere Basislinientools	31
3.8.2.1	Das Basislinientool „Lead Skim“	31
3.8.2.2	Das Basislinientool „Trail Skim“	31
3.8.2.3	Das Basislinientool „Lead Horizontal“	32
3.8.2.4	Das Basislinientool „Trail Horizontal“	33
3.9	Erstellen einer Kalibration	34
3.10	Vergleich von Chromatogrammen	39
3.10.1	Vergleich von Chromatogrammen in der 3D-Ansicht	41
3.11	Chromatogramme ausdrucken	43
3.12	Temperaturprogramme	48
3.13	Event-Programmierung	52
3.14	Erstellung von Arbeitsumgebungen	54
3.14.1	Laden einer Arbeitsumgebung	55
4	Anhang	56
4.1	Schematische Übersicht über den Installationsvorgang	56

1 Vorweg...

Diese Kurzanleitung soll dabei helfen, die Grundfunktionen von PeakSimple zu erlernen. Es wird darauf eingegangen, wie das Programm und die entsprechenden Kommunikationstreiber installiert werden, wie die Kommunikation mit dem Gaschromatographen eingerichtet wird, wie Daten aufgenommen und ausgewertet werden.

Das Programm bietet eine ganze Reihe weiterer Funktionen, die aber nicht im Rahmen dieser Kurzeinführung behandelt werden sollen.

Es soll exemplarisch an Beispielen aufgezeigt werden, wie ein Analysenergebnis aufgenommen und ausgewertet werden kann.

Weitere Anleitungen und Tutorien zum Thema PeakSimple finden sie im Internet unter der Adresse <http://www.sri-instruments.com>. Hier finden sie auch immer die aktuelle Programmversion sowie Programmaktualisierungen zum freien Download.

Um über aktuelle Entwicklungen von PeakSimple und die Verfügbarkeit von Updates informiert zu werden können sie sich bei der Schambeck SFD GmbH in eine Mailingliste eintragen. Besuchen sie hierzu die Internetseiten unter <http://www.schambeck-sfd.com>.

2 Softwareinstallation

Hinweis

Im Internet finden sie Tutorien und Kurzbeschreibungen zur Verwendung der PeakSimple-Software unter der Adresse <http://www.sri-instruments.com>

2.1 Anschluss des Gaschromatographen an den Computer

Die Verbindung zwischen dem Gaschromatographen und dem Computer kann entweder über ein USB- oder ein serielles (RS232) Kabel erfolgen. Welche Anschlussmöglichkeit für sie in Betracht kommt, ist davon abhängig, welche Interface-Hardware in ihrem Gaschromatographen oder PeakSimple Interface verbaut wurde.

Schließen sie das mitgelieferte Verbindungskabel zunächst an den Gaschromatographen oder das Interface an. Die Anschlussbuchse für das USB-Kabel befindet sich auf der rechten Gehäuseseitenwand, die Buchse für das serielle Kabel ist auf der linken Gehäuseseitenwand des Gaschromatographen zu finden. Schließen sie das Kabel hiernach an einen freien USB- oder COM-Port des Messrechners an.

2.2 Installation der Software

Die Installations-CD für PeakSimple finden sie auf der ersten Seite des Handbuchs zu ihrem Gaschromatographen. Die Datenaufnahme- und Auswertesoftware PeakSimple ist in der Version 3.x lauffähig auf allen Windows-Version ab Windows98. Wollen sie PeakSimple auf einem Rechner mit Windows95 laufen lassen, müssen sie auf eine ältere Version zurückgreifen, die sie im Internet herunterladen können.

Hinweis

Aktuelle Programmversionen und Updaten finden sie im Internet, ebenfalls unter der Adresse <http://www.sri-intruments.com>

Um das Programm zu installieren, legen sie zunächst die Installations-CD-ROM in ihr CD-Laufwerk ein. Klicken sie das Symbol **Arbeitsplatz** an oder öffnen sie den Windows-Explorer. Wählen sie das Laufwerkssymbol ihres CD-Laufwerks an. Starten sie das Programm SETUP.EXE, um mit der Installation zu beginnen. Die Installation verläuft weitestgehend automatisch. Während des Installationsprozesses sind noch keine Einstellungen bezüglich der Kommunikation zwischen Computer und Gaschromatograph vorzunehmen. Es ist lediglich festzulegen, in welches Verzeichnis auf der Festplatte das Programm installiert werden soll.

Hinweis

Standardmäßig werden die Daten, die mit der Software aufgenommen werden, sowie die Konfigurations-, Kalibrations-, Report-, Report- und Log-Dateien in dem Verzeichnis abgespeichert, in das das Programm installiert wurde. Achten sie daher vor der Installation darauf, das auf der Festplatte, auf der sie die Installation vornehmen, ausreichend freier Speicherplatz vorhanden ist.

Unter bestimmten Systemvoraussetzungen kann es sein, das die Registrierung der Datei VSFLEX7L.OCX nicht erfolgreich war.

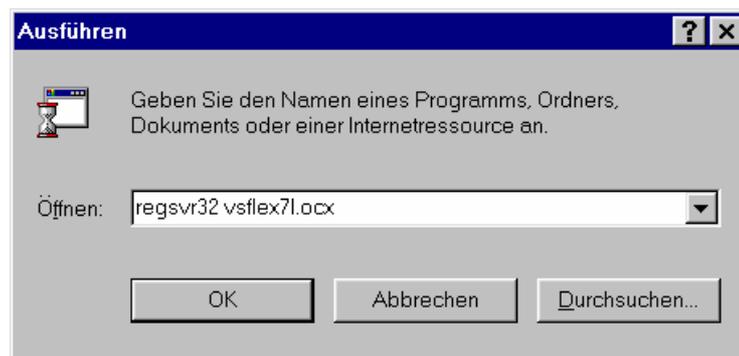
Die können sie feststellen, indem sie PeakSimple starten und nacheinander die Befehle **View** – **Autosampler** auswählen. Klicken die in dem erscheinenden Dialog die Schaltfläche **Edit all** an. Es sollte das folgende Fenster erscheinen:



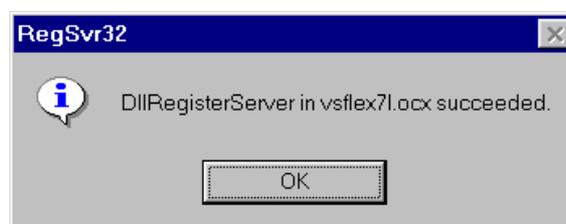
Ist das OCX-Steuerelement richtig registriert, können sie obere Zeile „Num / Control File / Data file“ lesen. Im Falle eines nicht richtig registrierten OCX-Elements würden sie diese Zeile nicht sehen.

Ist „VSFLEX7L.OCX“ nicht richtig registriert, muss dies manuell nachgeholt werden. Dieser Schritt ist nur in dem Fall auszuführen, wenn sie im oben genannten Dialogfenster die Tabellenüberschriften nicht sehen können.

Kopieren Sie dann diese Datei in das Windows Systemverzeichnis „C:\Windows\System“. Am einfachsten verwenden sie hierzu den Windows-Explorer. Rufen sie dann den Befehl **Ausführen** im Windows-Startmenü. Die werden nun aufgefordert, manuell eine Befehlszeile einzugeben. Geben sie hier folgenden Befehl „regsvr32 vsflex7l.ocx“ (siehe Grafik) in das Feld ein. Bestätigen Sie dann mit der Schaltfläche **OK**.



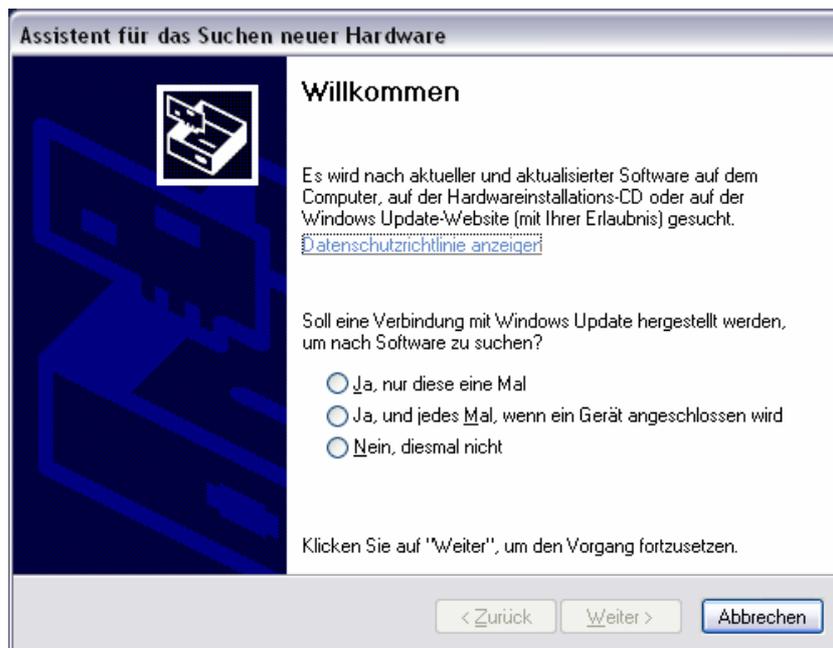
Nach erfolgreicher Registrierung erscheint die folgende Meldung.



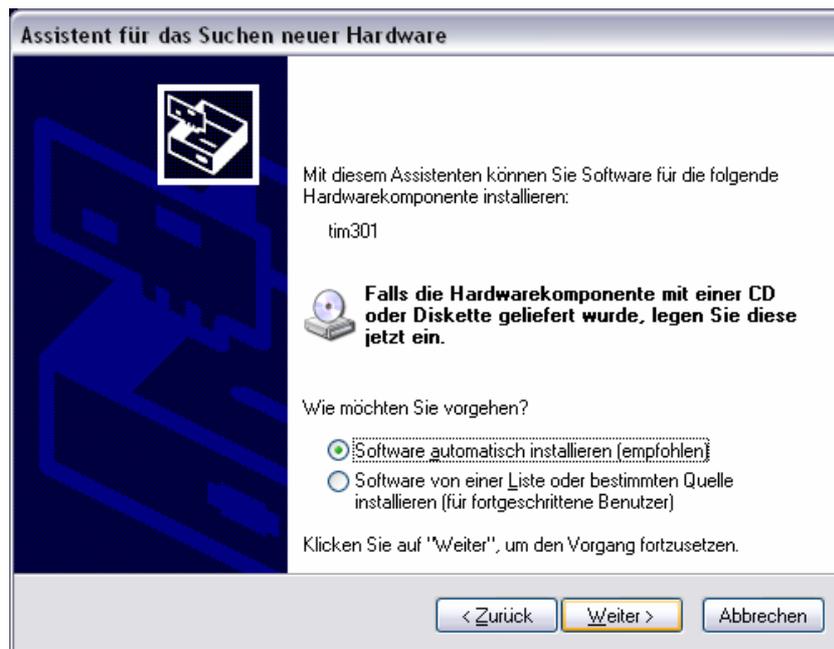
Sollten Sie Fragen zu Installation oder zum Programm haben, rufen sie uns bitte unter der Telefonnummer 02224-9239-0 an oder faxen sie uns unter 02224-9239-20.

2.3 Installation des USB-Treibers

Soll die Datenübertragung über den USB-Port erfolgen, ist es erforderlich, einen zusätzlichen Treiber zu installieren. Die hierzu erforderlichen Dateien (LL_USB.INF, LL_USB.SYS und LL_USB2K.SYS befinden sich in dem Verzeichnis, in welches sie PeakSimple installiert haben (z. B. C:\PEAK321). Sollte Windows nach dem Anschluss und Einschalten des Gaschromatographen nicht direkt den Assistenten zur Installation von neuer Hardware starten, öffnen sie bitte die Systemsteuerung und wählen sie den Menüpunkt **Hardware**. Es erscheint zunächst der folgende Dialog (in diesem Beispiel unter WindowsXP mit ServicePack 2):

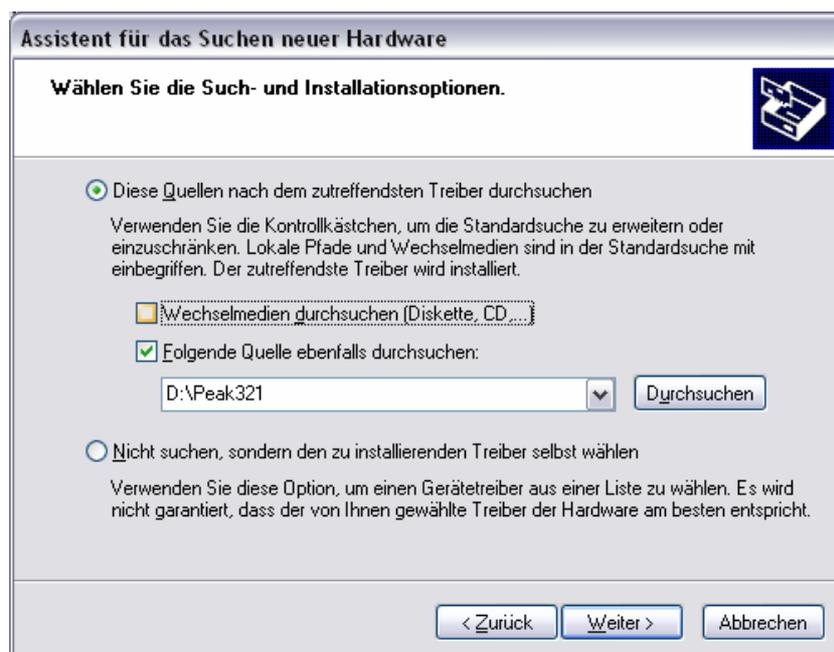


Wählen sie in diesem Fall zunächst **Nein, diesmal nicht**. Klicken sie hiernach auf „Weiter“ um mit dem nächsten Installationsschritt fortzufahren.



Da es sich bei dem benötigten USB-Treiber um eine Spezialentwicklung handelt, wählen sie in diesem Fenster bitte die zweite Option **Software von einer Liste oder bestimmten Quelle installieren**.

Diese Quelle muss nun im folgenden Fenster genauer spezifiziert werden. Die erforderlichen Daten befinden sich alle im Installationsverzeichnis von PeakSimple.

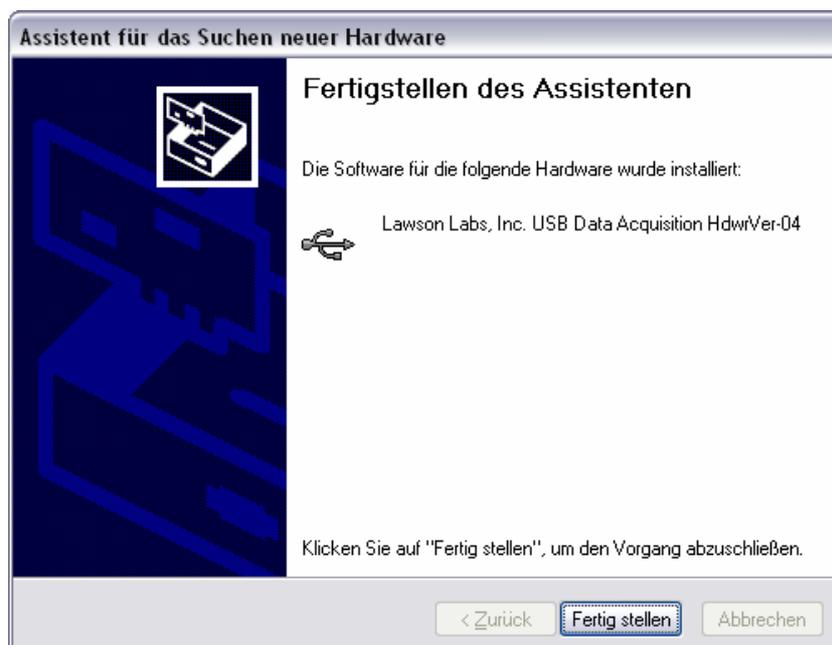


Klicken sie die Schaltfläche **Durchsuchen** an, um das Programmverzeichnis von PeakSimple in der Verzeichnisstruktur auf ihrer Festplatte zu suchen.

Um mit der Installation fortzufahren, klicken sie die Schaltfläche **Weiter** an, wonach zunächst der folgende Warnhinweis angezeigt wird. Wählen sie „Installation fortsetzen“ um den Treiber fertig einzurichten

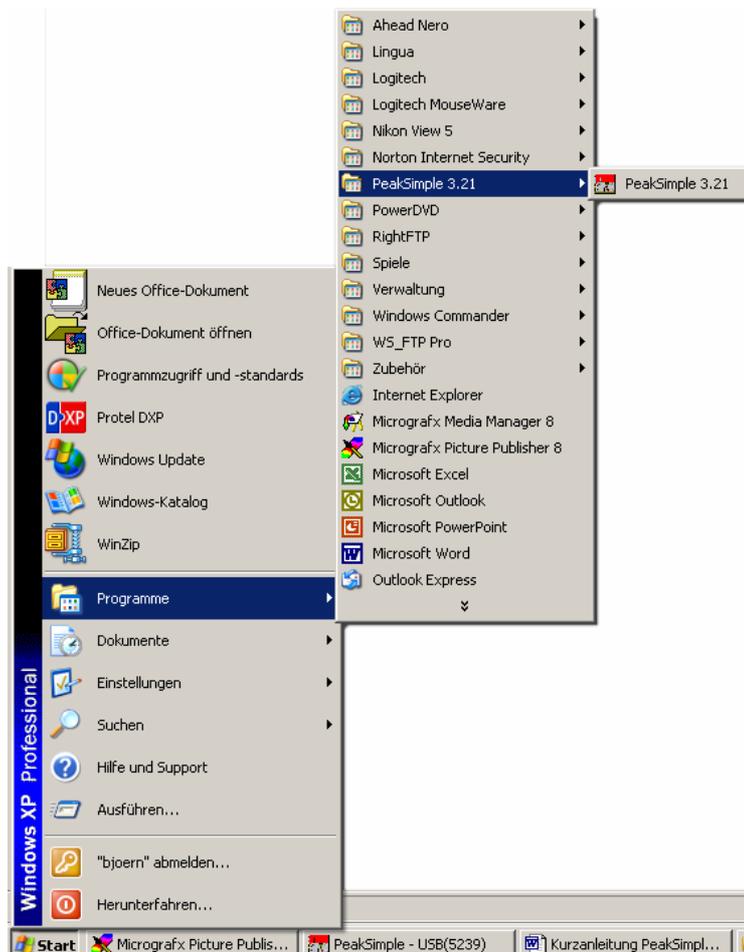


Jetzt werden die Treiberdateien kopiert und die der Registrierdatenbank des Systems eingetragen. Wenn der Vorgang abgeschlossen ist, können sie den Installationsassistenten beenden.

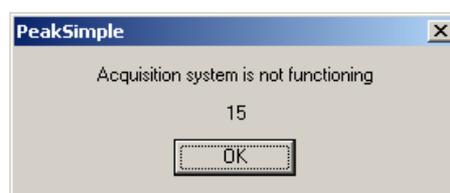


3 Erster Start

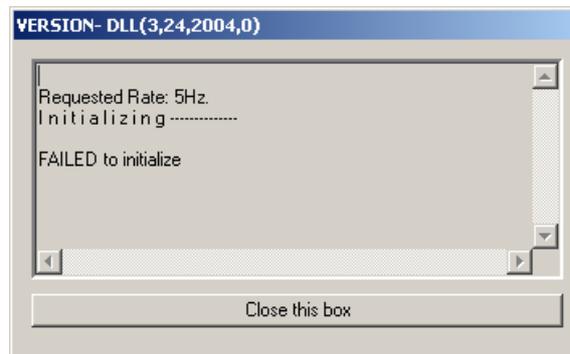
Das Programmsymbol von PeakSimple finden sie im Startmenü unter „Programme“ – „PeakSimple 3.21“. Klicken sie das Symbol an, um PeakSimple zu starten.



Zunächst wird die Kommunikation zwischen dem Gaschromatographen und dem Computer initialisiert. Ist (noch) kein Gaschromatograph oder PeakSimple-Interface angeschlossen, oder es kann keine Kommunikation aufgebaut werden, wird eine entsprechende Fehlermeldung ausgegeben.

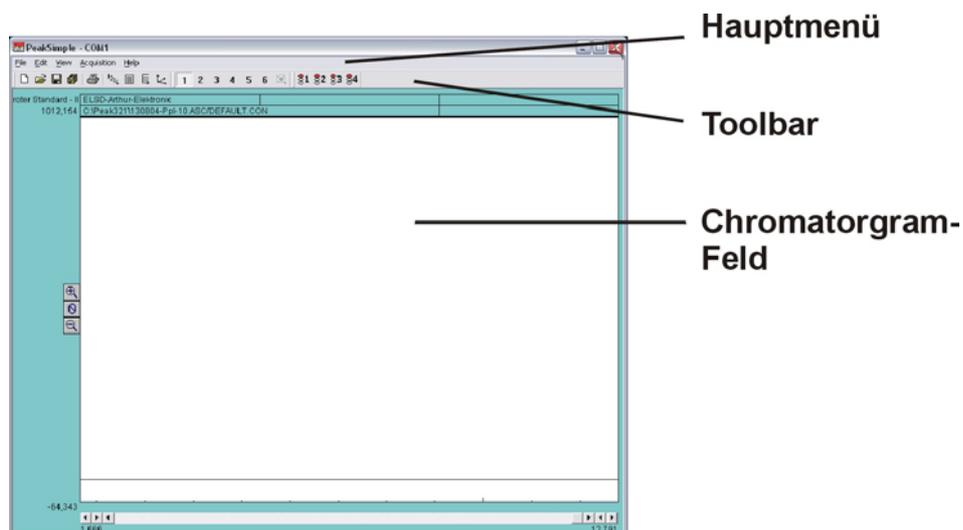


Die Initialisierung der Kommunikation über die USB-Schnittstelle kann in einem separaten Fenster beobachtet werden.



Die Fehlermeldung kann durch Anklicken der Schaltfläche **OK** ausgeblendet werden. Das Initialisierungsfenster der USB-Treibers wird ausgeblendet, wenn die Schaltfläche **Close this box** angeklickt wird.

Die Funktionen des Programms bezüglich der Datenauswertung werden nicht davon beeinflusst, ob beim Programmstart ein Kommunikationsfehler auftritt oder nicht. PeakSimple kann daher auch auf Rechnern installiert und zur Auswertung genutzt werden, die nicht an einen Gaschromatographen angeschlossen sind. Nach dem Programmstart wird das Hauptfenster von PeakSimple angezeigt.

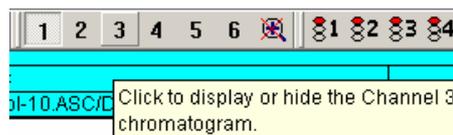


Das Hauptfenster ist unterteilt in die Hauptmenüzeile, die Toolbar sowie Chromatogrammfelder. Die Anzahl der Chromatogrammfelder ist abhängig von der Anzahl der verwendeten Detektoren bzw. der Anzahl der aktivierten Kanäle.

PeakSimple erlaubt das Öffnen von maximal sechs Chromatogrammfeldern zur selben Zeit. Die graphische Anzeige der Kanäle können in der Toolbar mit Hilfe der Schaltflächen **1** bis **6** aktiviert oder deaktiviert werden. Hierbei werden die aktivierten Schaltflächen heller dargestellt. Die Datenaufnahme auf den verschiedenen Kanälen wird nicht davon beeinflusst, ob der die Daten des Kanals dargestellt werden oder nicht.

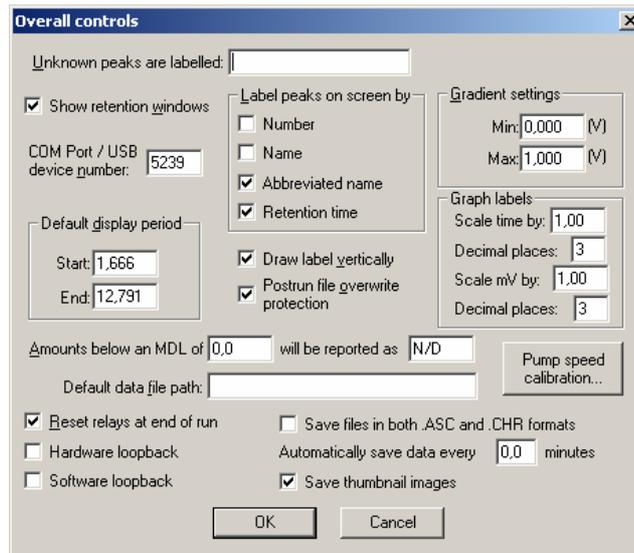


Wenn sie den Mauscursor einige Zeit auf eine Schaltfläche halten, ohne diese anzuklicken, wird ein sog. Tooltip eingeblendet. Hierunter versteht man kurze, erleuternde Texte bezüglich der Funktion der entsprechenden Schaltfläche



3.1 Einrichten des Daten-Interfaces

Um erfolgreich Daten aufnehmen zu können, ist es erforderlich, der Software mitzuteilen, unter welcher Portadresse die Datenaufnahme erfolgen soll. Wählen sie hierzu nacheinander die Menüpunkte **Edit** – **Overall** an. Es erscheint der folgende Dialog, in dem grundlegende Einstellungen bezüglich der Arbeitsumgebung von PeakSimple vorgenommen werden können.



Um die Schnittstelle für die Kommunikation mit dem Gaschromatographen oder PeakSimple-Interface festzulegen, ist es erforderlich, im Feld **COM Port / USB device number** die Nummer entweder des verwendeten seriellen Ports (also 1 für COM1) bzw. die Nummer des USB-Devices, die auf einem Aufkleber neben dem USB-Anschluss am Gaschromatographen zu finden ist, einzutragen.

Durch Anklicken der Schaltfläche **OK** wird das Dialogfenster geschlossen und die Kommunikation erneut initialisiert. Wenn alle Einstellungen richtig vorgenommen wurde, die Verbindung zum Gaschromatographen fehlerfrei ist und der Chromatograph eingeschaltet ist, sollte keine neue Fehlermeldung erscheinen.

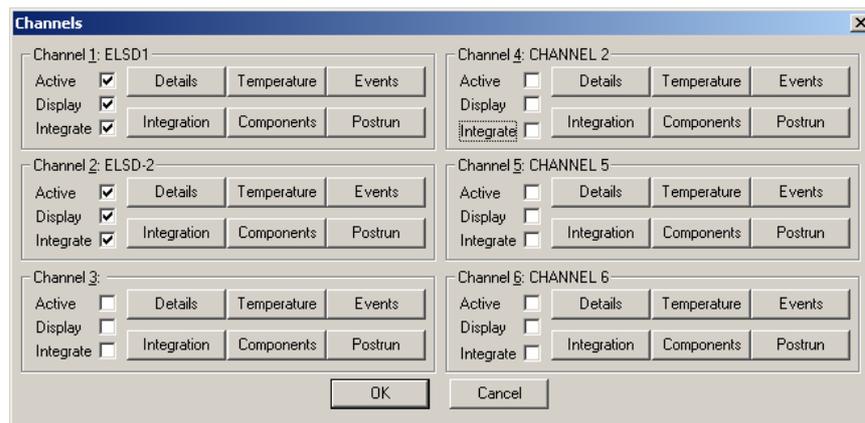
Nach der erfolgreichen Initialisierung wird rechts über dem Chromatogrammfeld eines aktiven Kanals das aktuelle Detektorsignal in mV angegeben.

3.2 Kanäle und Zeitbasen

Je nach verbauter Interface-Hardware stehen ihnen mehrere Datenkanäle und Zeitbasen zur Verfügung. Ist ihr Gaschromatograph oder PeakSimple-Interface über den USB-Port mit ihrem Mess-Rechner verbunden, stehen ihnen sechs Datenkanäle und vier Zeitbasen zur Verfügung. Dies bedeutet, dass Daten von maximal sechs verschiedenen Detektoren aufgenommen werden können. Die Anzahl der Zeitbasen legt fest, wie viele Chromatogramme parallel aufgenommen werden können, die aber nicht die gleiche Start-Zeit haben. Im Falle eines PeakSimple-Interfaces bedeutet das, dass sie in der Praxis die Signale von sechs unterschiedlichen Detektoren aufnehmen können, die sich in vier voneinander unabhängigen Chromatographen befinden können.

Welches Detektor-Signal auf welchem Kanal aufgenommen wird ist dadurch festgelegt, an welches Anschluss des Dateninterfaces das Signalkabel des Detektors angeschlossen ist.

Die Zuordnung der Zeitbasis, auf der die Datenaufnahme erfolgen so, sowie eine Reihe weiterer Einstellungen bezüglich der Datenerfassung können in der Software vorgenommen werden. Wählen sie hierzu im Hauptmenü **Edit – Channels**. Es wird ein Fenster angezeigt, in dem von allen verfügbaren Kanälen die Grundeinstellungen vorgenommen werden können.



Durch setzen des Hakens im Feld „Active“ wird die Datenaufnahme für diesen Kanal aktiviert. Ist **Active** nicht gesetzt, werden die Signale, die der an den entsprechenden Kanal angeschlossene Detektor liefert, nicht erfasst. Wird das Feld **Display** aktiviert, hat dies zur Folge, dass die aufgenommenen Daten auch direkt

graphisch dargestellt werden. Die Anzeige eines Kanals können sie auch über die Schaltfläche **1** bis **6** in der Toolbar einstellen.

Durch Aktivierung des Feldes **Integrate** erreichen sie, dass die aufgenommenen Chromatogramme direkt integriert werden. Dies hat zur Folge, dass sie bereits während des Analysenlaufes sehen können, wie PeakSimple die Basislinie zur Integration setzt und welche Peaks durch die Peakerkennung erfasst wurden. Ein erfolgreich erkannter Peak wird mit einem roten Kreis gekennzeichnet.

Durch Anklicken der Schaltfläche **Details** können sie grundlegende Parameter für diesen Kanal festlegen. Es erscheint der folgende Dialog:

The screenshot shows the 'Channel 1 details' dialog box with the following settings:

- Description: ELSD1
- End time: 14,250 min
- Sample rate: 2 Hz (selected)
- Default display limits: Max: 1012,154 mV, Min: -64,343 mV
- Remote start:
- Timebase: 1 (selected)
- Control by: Temperature (selected)
- Datalogger mode: On
- Offset: 0,000
- Gain: 1,000
- Decimal places: -1 (-1 for autoranging)
- Subtract baseline in channel: 1
- Overlay data in channel: 1
- Relative retention shifts are based at: 0,000 min
- Unretained solute time: 0,000 min
- Absorbance mode:
- Multiply norm area % results by: 1,0000

In das Feld **Description** können sie einen Namen für den Kanal eintragen. Hier ist es sinnvoll, einen Eintrag vorzunehmen, aus dem Rückschlüsse gezogen werden können, um welchen Detektor es sich handelt. Dieser Name wird im Chromatogrammfeld des jeweiligen Kanals angezeigt.

In das Feld **End time** wird die maximale Laufzeit der Datenaufnahme auf diesem Kanal eingetragen. Nach dieser Zeit wird die Datenaufnahme durch das Programm automatisch gestoppt. Ein vorzeitiger Abbruch der Datenaufnahme ist über entsprechende Menübefehle möglich.

Hinweis:

Wird für den entsprechenden Kanal ein Temperatur-, Druck- oder Gradientenprogramm hinterlegt, so wird die Endzeit dieses Programms genutzt. Die im Dialog „Channel details“ eingegebene Zeit wird in diesem Falle ignoriert.

Im Feld **Time base** ordnen sie dem Signal eine der verfügbaren Zeitbasen zu. Das Feld **Sample rate** dient dazu festzulegen, mit welcher Frequenz die Daten aufgenommen werden sollen. 1 Hz bedeutet hierbei, dass ein Datenpunkt pro Sekunde aufgenommen wird.

Hinweis:

Es ist völlig ausreichend die Datenaufnahmerate so zu wählen, dass die auftretenden Peaks mit jeweils zwanzig Datenpunkten erfasst werden. Diese Anzahl ist für eine mathematisch korrekte Beschreibung des Peaks ausreichend. Mehr Datenpunkte haben eine Vergrößerung der Datenfiles zur Folge.

Die Eingabe von **Default display limits** kann dazu genutzt werden, die Achsenskalierungen für die graphische Darstellung während der Datenaufnahme zu beeinflussen.

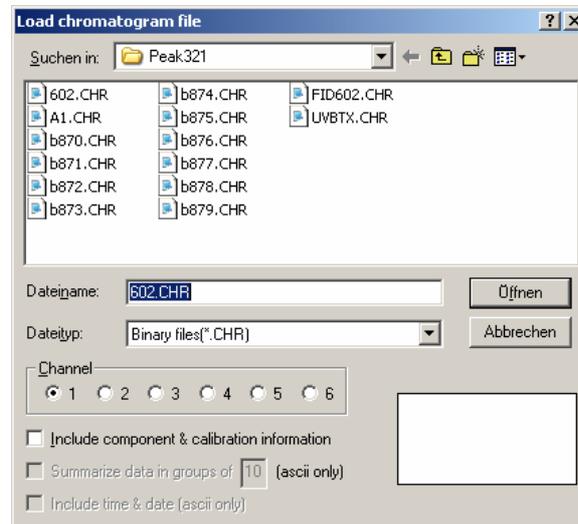
Sind die Einstellungen für einen Kanal abgeschlossen, werden diese durch Anklicken der Schaltfläche **OK** abgespeichert.

Auf die Funktionen, die sich hinter den Schaltflächen **Temperature**, **Events**, **Integration**, **Components** und **Postrun** verbergen wird später eingegangen.

3.3 Laden eines Datensatzes

Die aufgenommenen Messwerte können mit PeakSimple entweder in einem Binär- oder im ASCII-Format abgelegt werden. Die Speicherung im ASCII-Format bietet den Vorteil, dass die Daten anschließend „im Klartext“ vorliegen, also mit jeder anderen Software, die in der Lage ist, ASCII-Daten zu importieren, weiterverarbeitet werden kann. Bei der Verwendung des Binär-Formats wäre hierzu erforderlich, die genaue Dateistruktur zu kennen.

Im Lieferumfang des Programms befinden sich einige Beispieldateien. Um beispielsweise die Datei „602.CHR“ zu öffnen, klicken die nacheinander die Menüpunkte **File** – **Open** an. Es erscheint ein Dialogfenster, in dem im oberen Bereich die im aktuellen Verzeichnis vorhandenen Dateien angezeigt werden, im unteren Bereich ist eine Vorschau des Chromatogramms dargestellt, ferner kann festgelegt werden, in welchen Kanal – und damit in welches Chromatogrammfeld – die Daten geladen werden sollen.



Legen sie im ersten Schritt fest, in welchem Kanal die Datei geöffnet werden soll. Wählen sie hiernach im oberen Bereich aus, welche Datei geöffnet werden soll. Sollten sie die gewünschte Datei nicht in der Liste sehen, ist es möglich, dass diese in einem anderen Dateiformat abgelegt wurde. Klicken sie in diesem Falle auf den Pfeil rechts von der Liste „Dateityp“. Es wird eine Liste aller Dateitypen angezeigt, die sie mit PeakSimple öffnen können.



Haben sie die gewünschte Datei, das entsprechende Formular und den Kanal festgelegt, können sie diesen Dialog durch einen Klick auf die Schaltfläche **OK** wieder verlassen. Die Daten werden gelesen und im entsprechenden Chromatogrammfeld dargestellt.

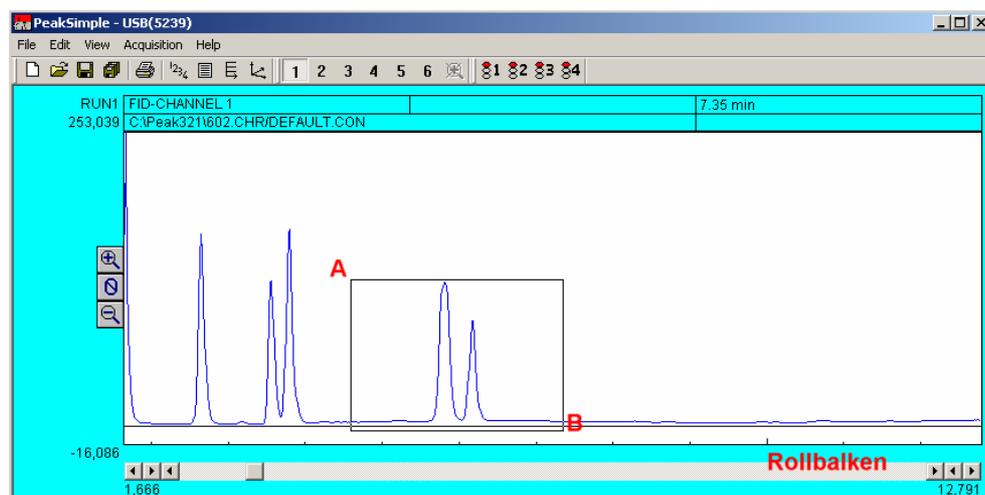
ACHTUNG:

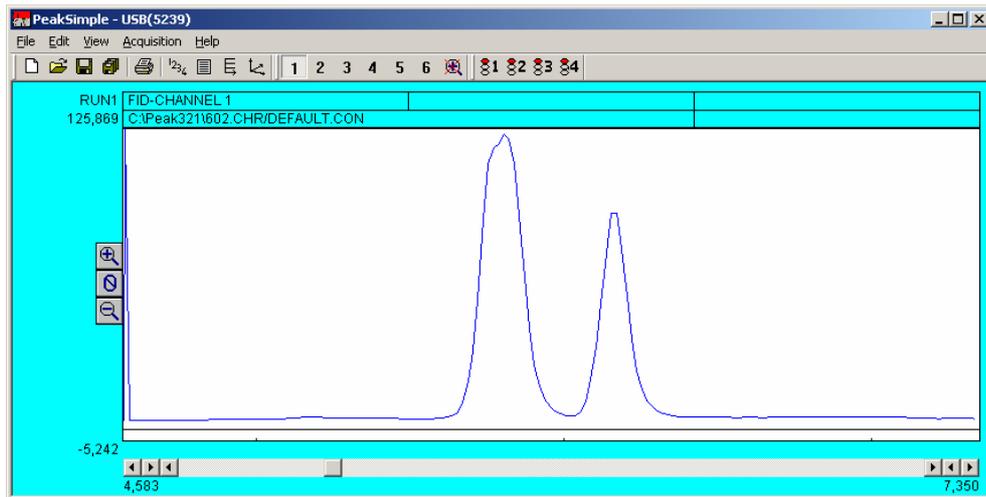
Legen sie zuerst den Kanal fest, in dem ein Chromatogramm dargestellt werden soll, bevor sie die Datei aus der Dateiliste auswählen. Gehen sie hin umgekehrt vor, kann es dazu kommen, dass ein falscher Datensatz eingelesen wird.

3.4 Einstellen der Darstellungsgrenzen

Um die Grenzen, in denen die Messwerte dargestellt werden sollen festzulegen, haben sie mehrere Möglichkeiten. Um eine Vergrößerung um den Faktor zwei in Y-Richtung zu erreichen, klicken sie bitte die Schaltfläche  an. Diesen Vorgang können sie durch einen Klick auf  wieder rückgängig machen. Durch die Betätigung des Rollbalkens am unteren Rand des Chromatographiefeldes können sie sich entlang der Zeit- (X-) Achse bewegen. Eine Spreizung oder Stauchung der Zeit-Achse erreichen sie durch Verwendung der Schaltflächen  , die sie rechts des Rollbalkens unterhalb des Chromatogramm-feldes finden. Mit den Schaltflächen   links vom Rollbalken kann der Anfang der dargestellten Zeitachse verschoben werden.

Um einen Bereich des Chromatogramms zu vergrößern, können sie mit der Maus einen rechteckigen Kasten um diesen Bereich aufziehen. Bewegen sie hierzu den Mauscursor auf eine Ecke dieses Bereiches und drücken sie die linke Maustaste (Punkt A). Während sie die Maustaste weiter gedrückt halten bewegen sie die Maus. Es wird ein Rechteck angezeigt, welches den zu vergrößernden Bereich einschließt. Haben sie den gewünschten Bereich erfasst, lassen sie die Maustaste wieder los (Punkt B). Das Chromatogramm wird neu dargestellt, wobei die Grenzen des Chromatogramm-feldes jetzt den Ausmaßen des aufgezogenen Fensters entsprechen.

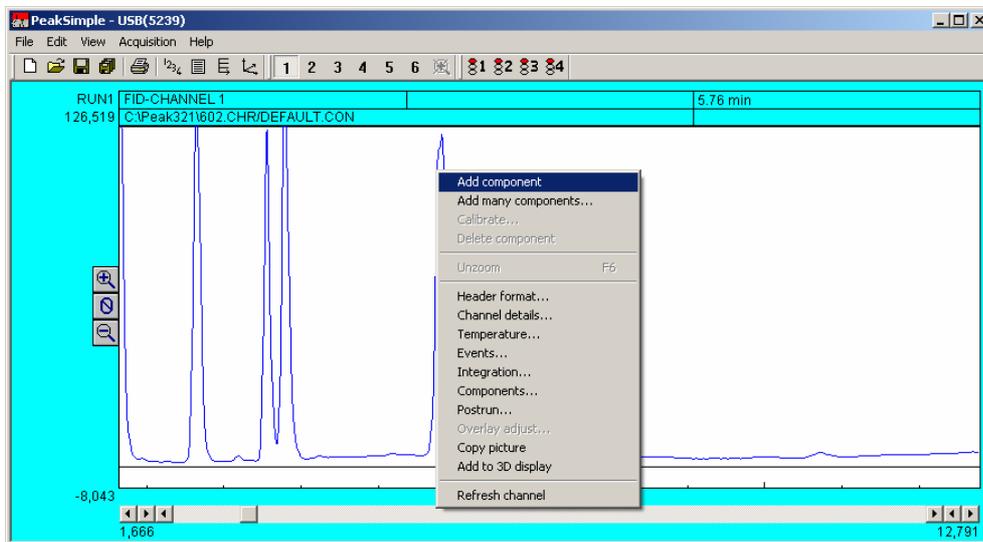




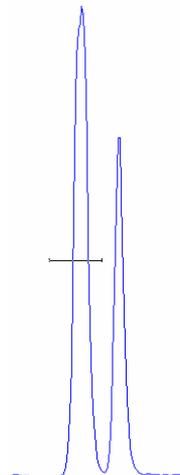
Dieser Schritt kann mehrfach nacheinander wiederholt werden. Um jeweils zur vorletzten Darstellung zurückzukehren, können sie die Unzoom-Schaltfläche  in der Toolbar anklicken. Alternativ hierzu können sie auch die Taste F6 drücken.

3.5 Komponenten zuordnen

Um einen Peak im Chromatogramm zu integrieren ist es erforderlich, zunächst das Zeitfenster festzulegen, in dem die entsprechende Komponente im Chromatogramm auftritt (Retentionszeit). Auf diesem Wege können sie der Komponente auch gleich einen Namen zuweisen. Klicken sie hierzu das Chromatogramm im Bereich des gewünschten Peaks mit der rechten Maustaste an. Wählen sie hier-nach im angezeigten Kontextmenü den Punkt **Add Component** aus.

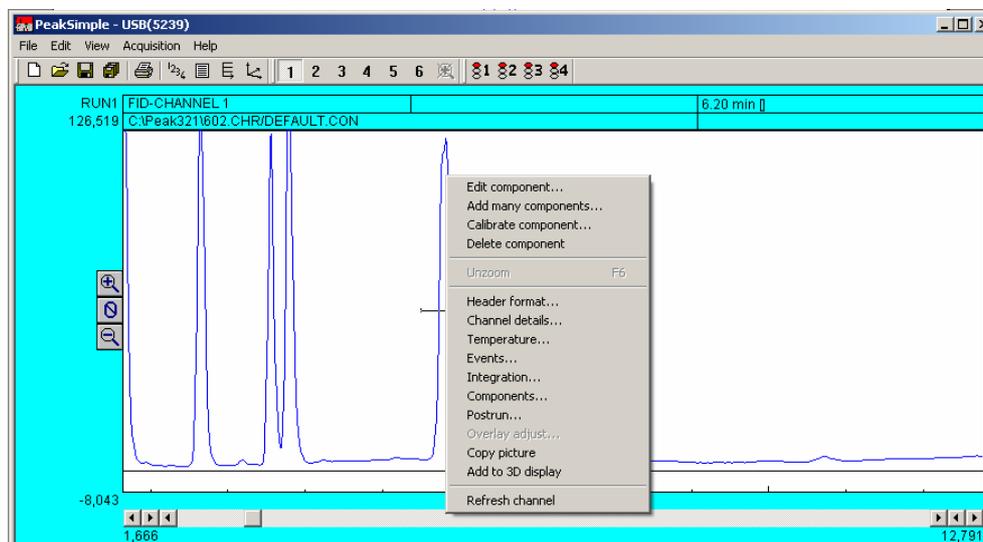


Es wird ein Zeitfenster vorgegebener Breite für den Peak eingezeichnet, der der Retentionszeit der entsprechenden Komponente entspricht.

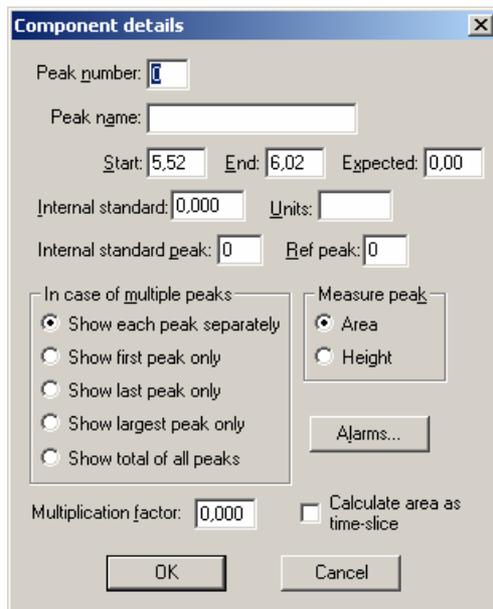


Die Breite dieses Peak-Zeitfensters können sie variieren, indem sie den Mauscursor auf die senkrechten Markierungen am Anfang oder am Ende bewegen. Der Cursor verändert sich nun von dem normalen Pfeil in einen nach rechts oder links weisenden Pfeil (\leftarrow / \rightarrow). Halten sie die linke Maustaste gedrückt und verschieben sie die Markierung. Haben sie die gewünschte Position erreicht, lassen sie die Maustaste wieder los. Wenn sie den Mauscursor in den mittleren Bereich des Retentionsmarkers bewegen, verändert er sich in einen nach rechts und links weisenden Doppelpfeil (\leftrightarrow). Wenn sie jetzt die linke Maustaste gedrückt halten und die Maus bewegen, können sie den gesamten Retentionsmarker verschieben, wobei seine Breite beibehalten wird.

Um dem Peak einen Namen zuzuordnen, klicken sie mit der Rechten Maustaste auf das Chromatogrammfeld, wenn sich der Mauscursor im Bereich eines Retentionsmarkers befindet. Wählen sie anschließend im erscheinenden Kontextmenü den ersten Punkt **Edit component** aus. Alternativ können sie auch einen Doppelklick mit der Maus auf den Peak machen.

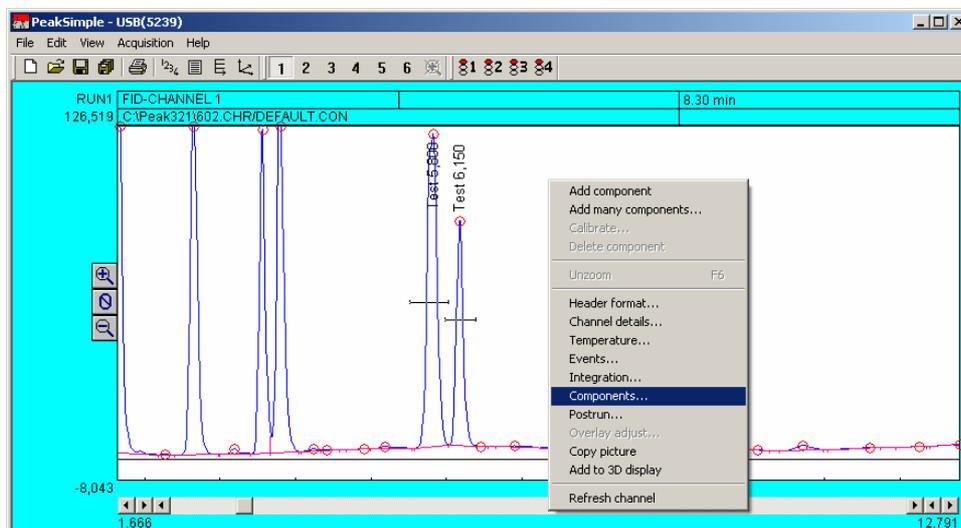


Es erscheint ein Fenster, in dem sie zunächst dem Peak eine Nummer geben müssen. Ferner können sie einen Komponentennamen eingeben und die Retentionszeiten manuell verändern.

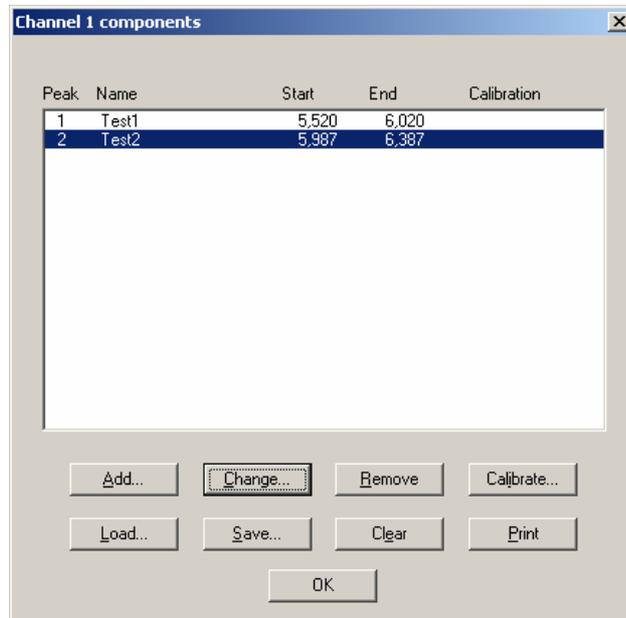


Tragen sie einen Komponentennamen ein und verändern sie – wenn erforderlich die Retentionszeit des Peaks. Die Werte in den Feldern „Start“ und „End“ entsprechen den Zeiten zu Beginn und am Ende des Zeitfensters für den entsprechenden Peak. Anschließend können sie dieses Feld durch Anklicken der Schaltfläche **OK** wieder verlassen. Wiederholen sie diesen Vorgang für alle Komponenten, die in ihrer Probe vorhanden sind.

Sind allen Peaks die entsprechenden Komponenten zugewiesen, können sie die Liste der Komponenten abspeichern. Klicken die hierzu wieder mit der rechten Maustaste das Chromatogrammfeld des entsprechenden Kanals an und wählen sie im Kontextmenü den Menüpunkt **Components**.



Es erscheint ein Fenster, in dem alle bisher eingegebenen Komponenten zusammengestellt sind. Hier können sie jetzt noch weitere Änderungen vornehmen, wie beispielsweise eine Komponente entfernen oder umzubenennen.



Um die Einträge endgültig abzuspeichern, klicken sie die Schaltfläche **Save** an. Sie werden nun aufgefordert, einen Dateinamen zu vergeben.

Klicken sie nach dem Abspeichern die Schaltfläche **OK** an, um dieses Dialogfenster wieder zu schließen.

Hinweis

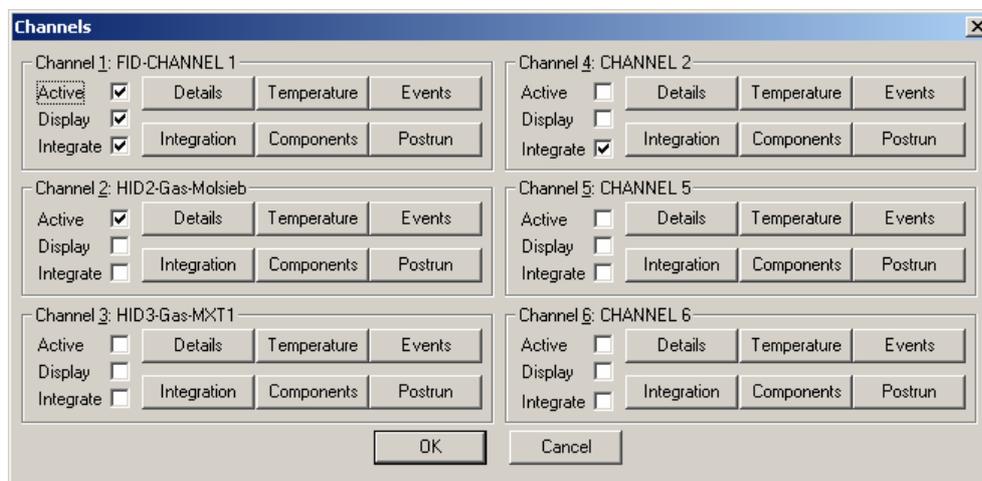
Die Komponententabellen werden standardmäßig in das Verzeichnis abgelegt, in welches das Programm installiert wurde.

Wenn sie eine Probe analysiert haben, zu der sie bereits eine Komponententabelle erstellt haben, können sie direkt nach dem Öffnen des Chromatograms das entsprechende Chromatogrammfeld mit der rechten Maustaste anklicken, im Kontextmenü den Punkt **Components** auswählen und dann durch Anklicken der Schaltfläche **Load** die entsprechende Komponententabelle laden.

3.6 Peaks integrieren

Um eine Integration des Chromatogramms vorzunehmen ist es zunächst erforderlich, die Peaks – wie im vorausgegangenen Artikel beschrieben – den verschiedenen Komponenten zuzuordnen.

Um die Flächenanteile der einzelnen Peaks zu berechnen, aktivieren sie die Integrationsfunktion durch Auswahl der Punkte **Edit** – **Channels** im Hauptmenü. Es wird ein Dialogfenster angezeigt, in dem für jeden verfügbaren Kanal die Grundeinstellungen vorgenommen werden können.



Aktivieren sie für den Kanal, in dem sich das Chromatogramm, welches sie integrieren möchten, befindet, die Funktion **Integrate**. Schließen sie dieses Fenster hiernach durch Klicken auf die Schaltfläche **OK**.

Im Chromatogramm wird jetzt in die Basislinie eingezeichnet, die der Integration zu Grunde liegt. Die Basislinie wird zunächst einmal vom Programm automatisch festgelegt, um eine Berechnung vornehmen zu können. Wie sie den Verlauf der Basislinie manuell beeinflussen können, wird später beschrieben,

Um das Ergebnis der Integration angezeigt zu bekommen, wählen sie im Hauptmenü nacheinander die Punkte **View** und **Results** aus. Es wird das Ergebnisfenster angezeigt.

Component	Retention	Area	Height	External	Units
SOLVENT	0,516	71594,2015	3994,752	0,0000	%
Benzene	1,633	939,6270	180,764	104,9534	ppm
Toluene	2,633	953,8550	163,898	106,7319	ppm
Chlorobenzene	3,550	676,9720	122,832	72,1215	ppm
Ethylbenzene	3,783	998,4475	166,671	112,3059	ppm
m_p-Dichloroben	5,800	1093,6590	119,011	124,2074	ppm
o-Dichlorobenz	6,150	536,7670	85,159	54,5959	ppm
		76793,5290		574,9159	

Channel: 1

Recognized peaks only
 Undetected components also

Achten sie darauf, dass unten links im Dialogfenster der richtige Kanal ausgewählt ist. Durch Umschalten der Kanal-Nummer ist es möglich, die Ergebnisse verschiedener Kanäle nacheinander zu betrachten und miteinander zu vergleichen.

3.7 Manuelle Veränderung der Basislinie

Wenn sie mit der Basislinie, die automatisch vom Programm gesetzt wurde nicht einverstanden sind, können sie diese manuell nachbearbeiten. Hierzu bietet PeakSimple eine Reihe verschiedener Basislinien-Werkzeuge. Die wohl am häufigsten verwendeten Tools stellen wahrscheinlich „None“, „Drop“, „Based“ und „Rubber Band“ dar. Funktionsweisen der einzelnen Tools werden im Folgenden näher dargestellt.

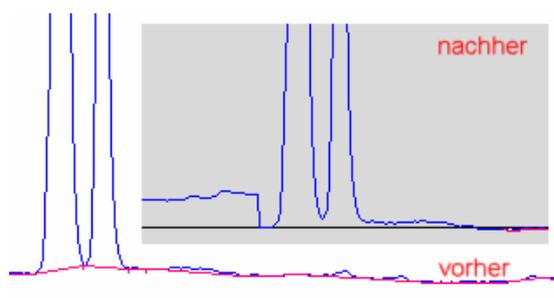
Um die manuelle Basislinienbearbeitung zu beginnen, wählen sie im Hauptmenü nacheinander die Punkte **Edit** – **Manual integration**. Hiernach werden am linken Bildschirmrand die verfügbaren Werkzeuge zur Basislinienbearbeitung angezeigt. Wenn sie einen Schritt der Basislinienbearbeitung wieder rückgängig machen

wollen, können sie die *Undo*-Schaltfläche  anklicken. Hiernach wird die jeweils letzte Operation wieder rückgängig gemacht.

Um das Signal zu einer beliebigen Zeit im Chromatogramm auf Null zu setzen und von hier aus normal weiter laufen zu lassen, können sie das Basislinienwerkzeug Zero verwenden. Klicken sie hierzu die Schaltfläche  an und wählen sie anschließend mit der Maus die Position im Chromatogramm, an der das Signal auf Null gesetzt werden soll.

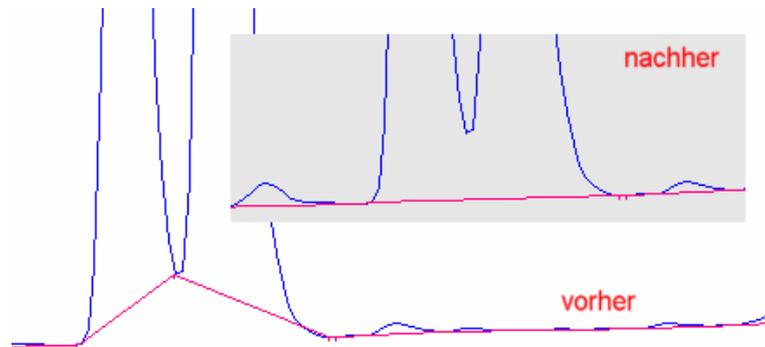
Hinweis:

Änderungen am Chromatogramm, die sie unter Verwendung des Zero-Basislinientools durchführen können nicht mit der Undo-Funktion rückgängig gemacht werden.



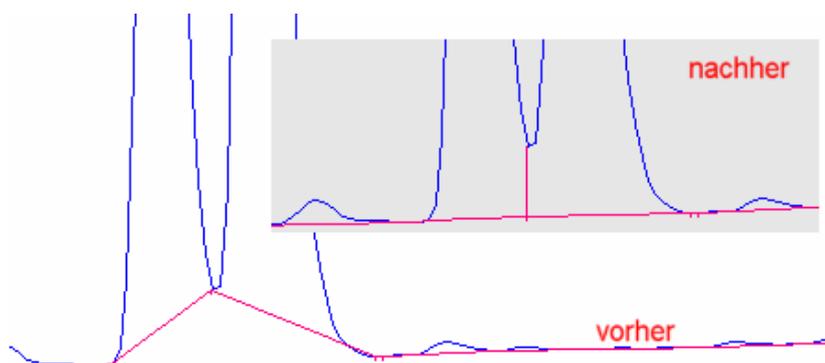
3.7.1 Basislinientool „None“

Durch die Verwendung dieses Tools *None*  können sie einen Peak, der von der Software erkannt und zur Integration genutzt wurde, aus der Berechnung herausnehmen. Hierdurch wird er mit einem benachbarten Peak zusammengefasst. Klicken sie hierzu zunächst die Schaltfläche des Basislinientools und hiernach das Tal zwischen den beiden Peaks.



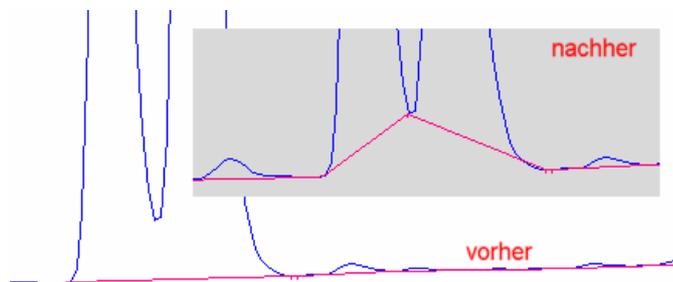
3.7.2 Basislinientool „Drop“

Bei der Verwendung dieses Tools wird im Tal zwischen zwei Peaks eine Senkrechte auf die Basislinie projiziert, deren Drift durch das Tal zwischen den zwei benachbarten Peaks nicht beeinflusst wird. Klicken sie auch in diesem Falle zunächst die Schaltfläche für das Tool *Drop*  und anschließend das gewünschte Tal zwischen zwei Peaks an.



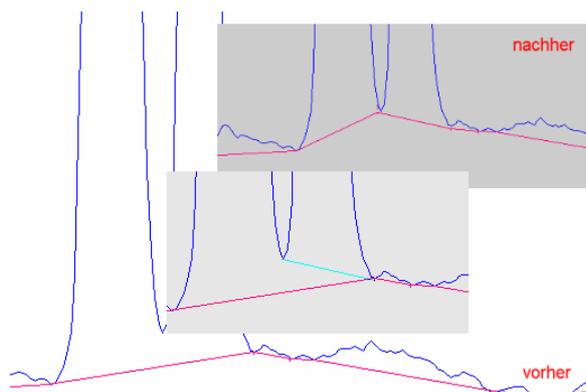
3.7.3 Basislinientool „Based“

Bei Einsatz dieses Tools wird ein zusätzlicher Basislinienpunkt gesetzt. Die Drift der Basislinie vor und nach diesem Punkt wird verändert. Klicken sie auch in diesem Falle das Symbol für das Tool *Based*  an und wählen sie hiernach ein Tal zwischen zwei benachbarten Peaks im Chromatogramm.



3.7.4 Basislinientool „Rubber Band“

Als letztes Tool zur Veränderung der Basislinie sei das Tool *Rubber Band* erwähnt. Dieses Tool eignet sich zum „freien Zeichnen“ der Basislinie. Aktivieren sie das Tool durch Anklicken der entsprechenden Schaltfläche . Klicken sie jetzt mit dem Mauscursor auf einen beliebigen Punkt der Basislinie. Bewegen sie die Maus bei gedrückter linker Maustaste. Während der Bewegung wird eine blaue Hilfslinie gezeichnet. Nach dem Loslassen der Maustaste wird die Basislinie gemäß dieser Hilfslinie neu berechnet.



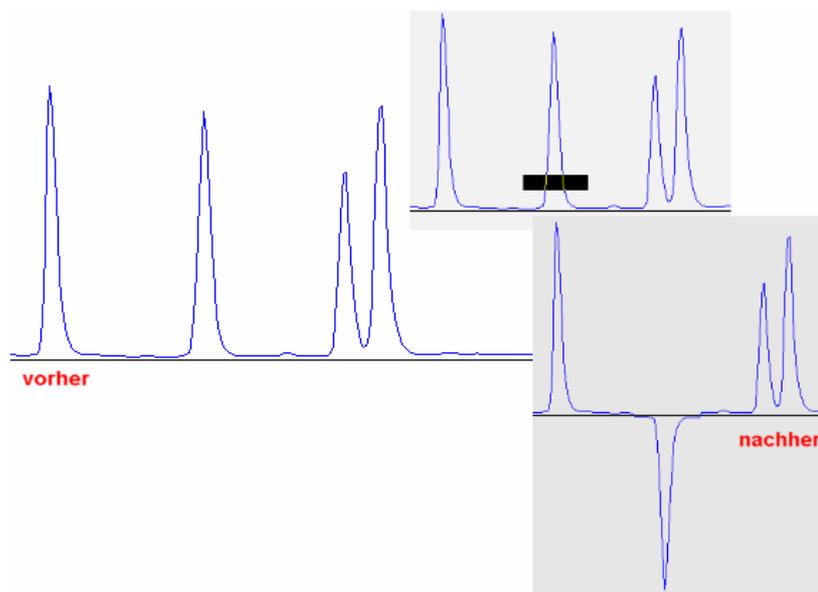
Die Auswirkungen der Manipulationen an der Basislinie auf die berechneten Peakflächen kann direkt im Ergebnisfenster (unter **View** – **Results**) verfolgt werden.

3.8 Das Basislinientool „Reverse“

Durch die Verwendung des Basislinientools Reverse ist es möglich, einen negativen Peak in einen positiven zu wandeln und umgekehrt. Nach dem Anklicken der entsprechenden Schaltfläche  ist es erforderlich, den Bereich des Chromatogramms zu selektieren, auf den das Reverse-Tool angewandt werden soll. Drücken sie hierzu die linke Maustaste und halten sie diese gedrückt, während sie den gewünschten Bereich markieren. Durch Loslassen der Maustaste wird der markierte Bereich des Chromatogramms invertiert.

Hinweis:

Änderungen am Chromatogramm, die sie unter der Verwendung des Reverse-Tools vornehmen, können nicht durch die Undo-Funktion rückgängig gemacht werden.



3.8.1 Das Basislinientool „*Inhibit*“

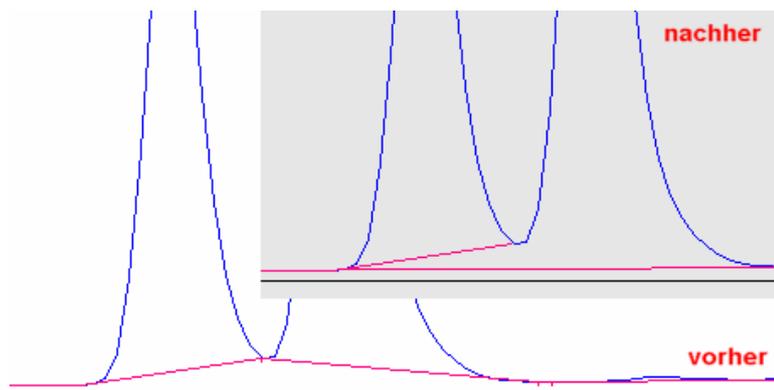
Durch die Verwendung des Basislinientools *Inhibit* können sie die Basislinie beenden, wodurch es möglich ist, Peaks aus bei der Berechnung der Flächenanteile unberücksichtigt zu lassen.

3.8.2 Weitere Basislinientools

Neben den zuvor beschriebenen Basislinientools, die wohl in den meisten Fällen Anwendung finden werden, werden noch weitere Basislinien-Tools angeboten. Hierzu gehören „*Lead Skim*“, „*Trail Skim*“, „*Lead Horizontal*“ und „*Trail Horizontal*“.

3.8.2.1 Das Basislinientool „*Lead Skim*“

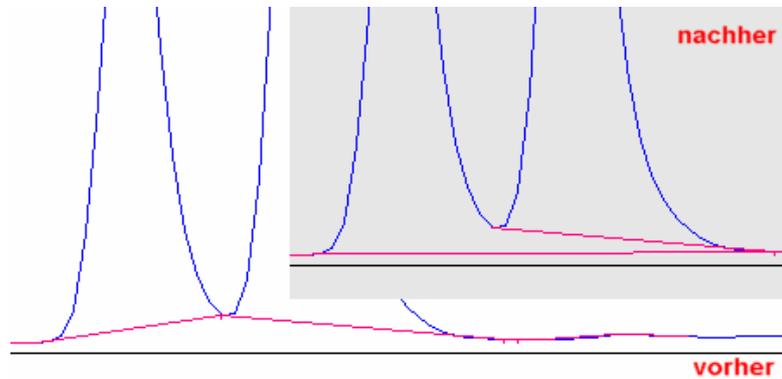
Durch die Verwendung des Basislinientools *Lead Skim* können sie einen auf der aufsteigenden Flanke eines Peaks aufsitzenden Peak ausschneiden und so separat zu integrieren. Klicken sie zunächst die entsprechende Schaltfläche  in der Menüleiste der Basislinientools an. Klicken sie anschließend auf das Tal zwischen den zwei Peaks, die sie voneinander trennen wollen.



3.8.2.2 Das Basislinientool „*Trail Skim*“

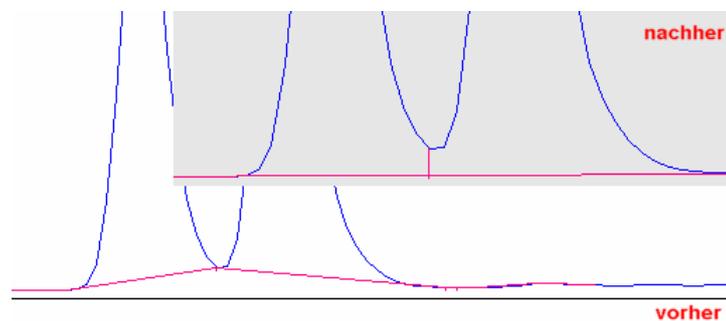
Dieses Tool funktioniert prinzipiell wie das zuvor beschriebene Tool *Lead Skim* mit dem Unterschied, dass in diesem Falle ein aufsitzender Peak auf der abfal-

lenden Flanke eines Peaks abgeschnitten wird. Klicken sie auch in diesem Falle zunächst die entsprechende Schaltfläche im Menü  und anschließend des Tal zwischen den beiden zu trennenden Peaks an.



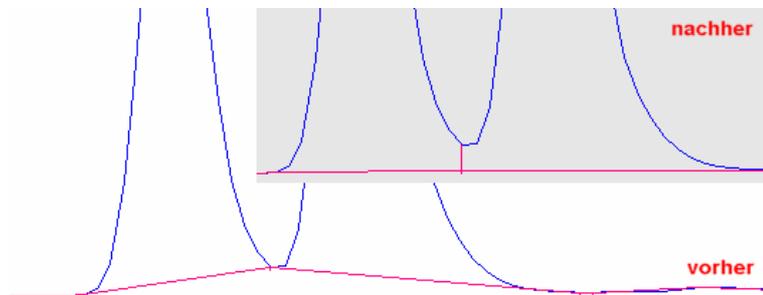
3.8.2.3 Das Basislinientool „Lead Horizontal“

Durch die Verwendung des Tools *Lead Horizontal* können sie einen auf der aufsteigenden Flanke eines Peaks aufsitzenden Peak abtrennen, wobei für den aufsitzenden Peak eine horizontale Basislinie konstruiert wird. Zur Verwendung dieses Tools klicken sie zunächst die entsprechende Schaltfläche  im Menü der Basislinientools an und klicken sie hiernach auf das Tal zwischen den beiden Peaks die sie voneinander trennen möchten.



3.8.2.4 Das Basislinientool „*Trail Horizontal*“

Dieses Tool funktioniert prinzipiell wie das zuvor beschriebene Tool *Lead Horizontal* mit dem Unterschied, dass für den zweiten Peak eine horizontale Basislinie konstruiert wird. Klicken sie auch in diesem Fall zunächst das entsprechende Icon, für das Basislinientool  an und klicken sie hiernach das Tal zwischen den beiden zu trennenden Peaks an.



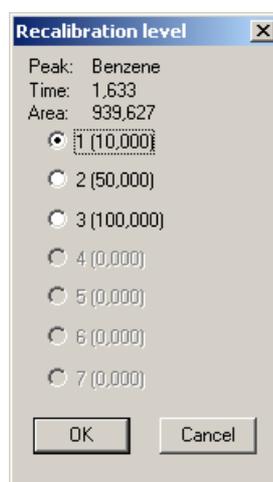
3.9 Erstellen einer Kalibration

Die Umwandlung von gemessenen Flächenanteilen, die aus den aufgenommenen Rohdaten durch Integration gewonnen werden können, in reale Anteile der verschiedenen Komponenten an der Probe erfordert zunächst die Ermittlung einer Kalibrationsfunktion, die eine Korrelation zwischen Peakflächen und Komponentenanteilen darstellt.

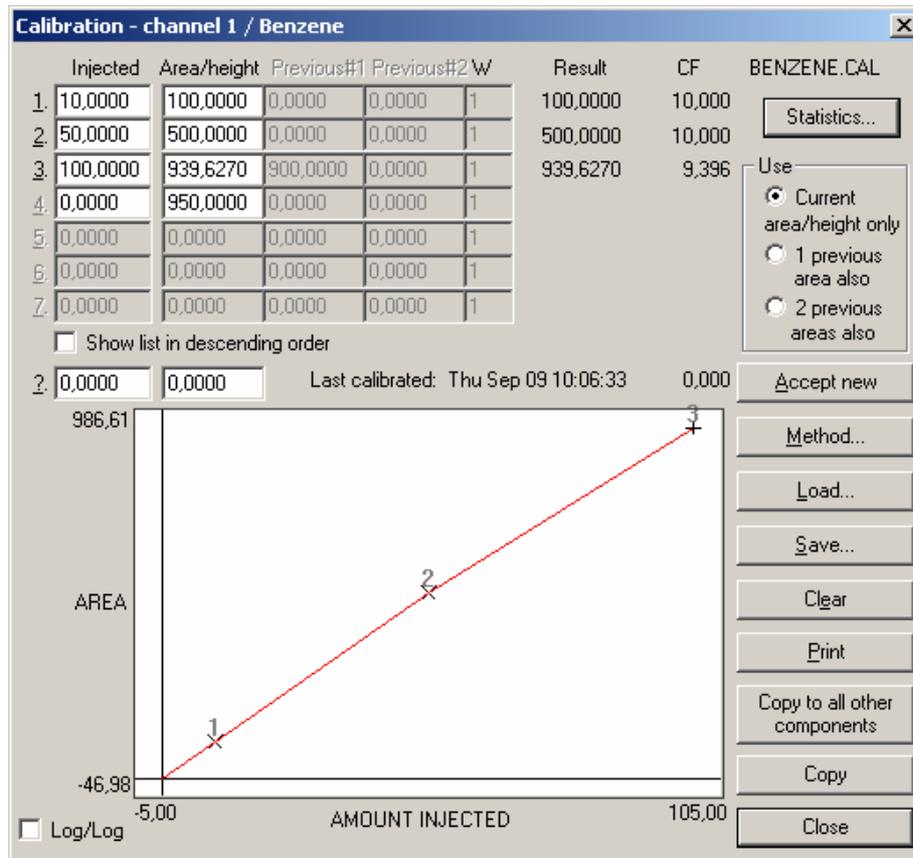
Um eine Kalibration zu erstellen, ist es erforderlich, einen Analysenlauf oder mehrere Analysenläufe mit verschiedenen Standards durchzuführen, deren Anteile an der Mischung genau bekannt ist. Auf Basis dieser Kalibrationsmessungen kann schließlich die Kalibrationsfunktion erstellt werden, die dann dazu genutzt wird, die Komponentenanteile in einer „realen“ Probe zu berechnen.

Um eine neue Kalibration zu erstellen, öffnen sie zunächst den Datenfile des Kalibrationslaufes sowie die dazugehörige Komponententabelle.

Klicken sie den Peak der Komponenten, für die sie eine Kalibration erstellen möchten mit der rechten Maustaste an und wählen sie im angezeigten Kontextmenü den Punkt **Calibrate (Komponente)**. Im ersten Schritt müssen sie jetzt festlegen, den wievielten Datenpunkt der Kalibrationsfunktion die Fläche des angeklickten Peaks entspricht. Hierzu fragt das Programm nach dem Kalibrationslevel. Klicken sie den entsprechenden Punkt an und fahren sie durch Anklicken der Schaltfläche **OK** fort.

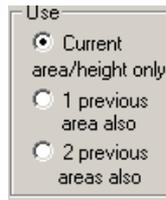


Jetzt wird der Kalibrationsdialog der entsprechenden Komponente angezeigt. Hier sind die bisher eingegebenen Datenpunkt mit gemessener Fläche und entsprechendem Injektionsvolumen in einer Tabelle zusammengefasst.

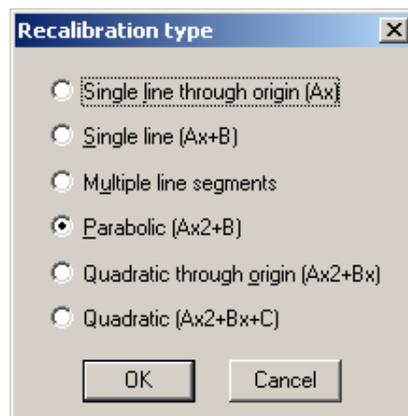


Im unteren Bereich des Fensters ist die Kalibrationskurve graphisch dargestellt. Der neu einzufügende Kalibrationspunkt wird als blinkender Stern dargestellt. Durch anklicken der Schaltfläche **Accept new** wird dieser Punkt in die Tabelle und damit auch in die Graphik übernommen, was in der Regel durch eine Verschiebung der Kalibrationskurve zu bemerken ist.

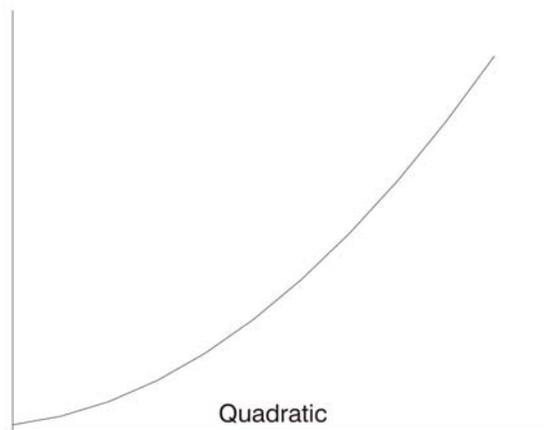
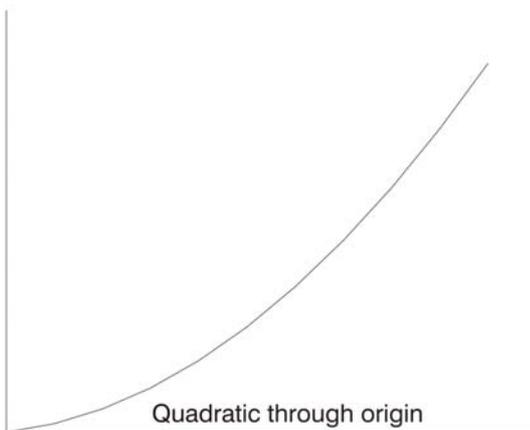
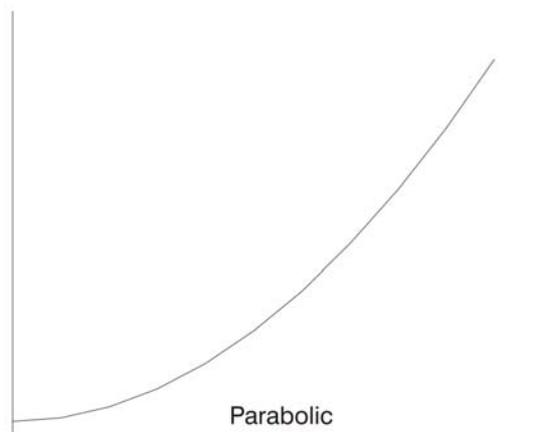
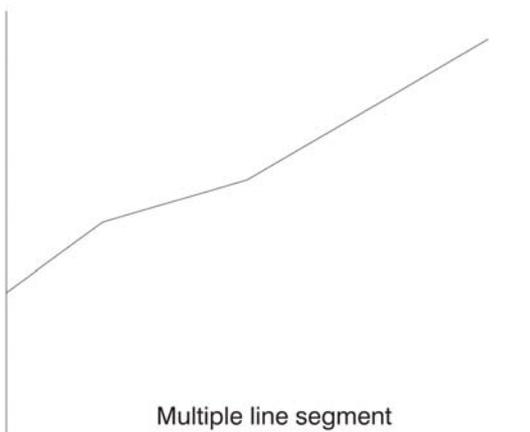
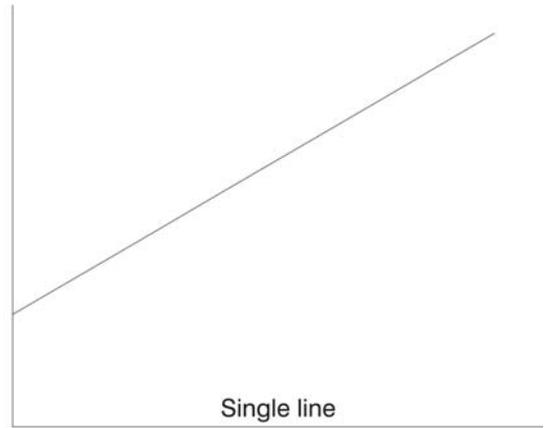
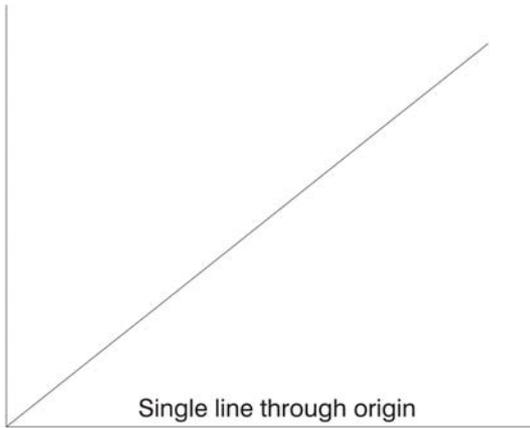
Die Anzahl der Flächendatenpunkte, die zur Berechnung eines Kalibrationspunktes gemittelt werden soll, legen sie im Feld **Use** fest. Hier haben sie die Auswahl zwischen einer, zwei und drei unabhängigen Messungen, aus denen jeweils der Mittelwert berechnet wird.



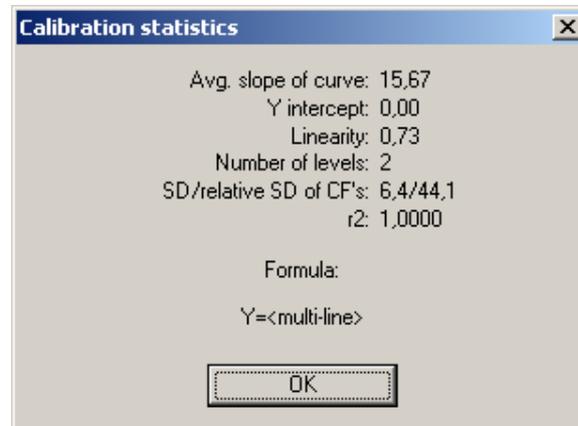
Die mathematische Funktion, nach der die Kalibration berechnet wird, kann durch anklicken der Schaltfläche **Method** definiert werden. Nach Anklicken dieser Schaltfläche wird eine Liste aller verfügbaren Rechenmodelle angezeigt.



Treffen sie die Auswahl und schließen sie dieses Fenster durch Anklicken der Schaltfläche **OK**. Nach dem Schließen dieses Fensters wird die Kalibrationsfunktion neu berechnet und der Funktionsgraph entsprechend neu dargestellt. Der grobe Kurvenverlauf der verfügbaren Rechenmodelle ist in der folgenden Abbildung wiedergegeben.



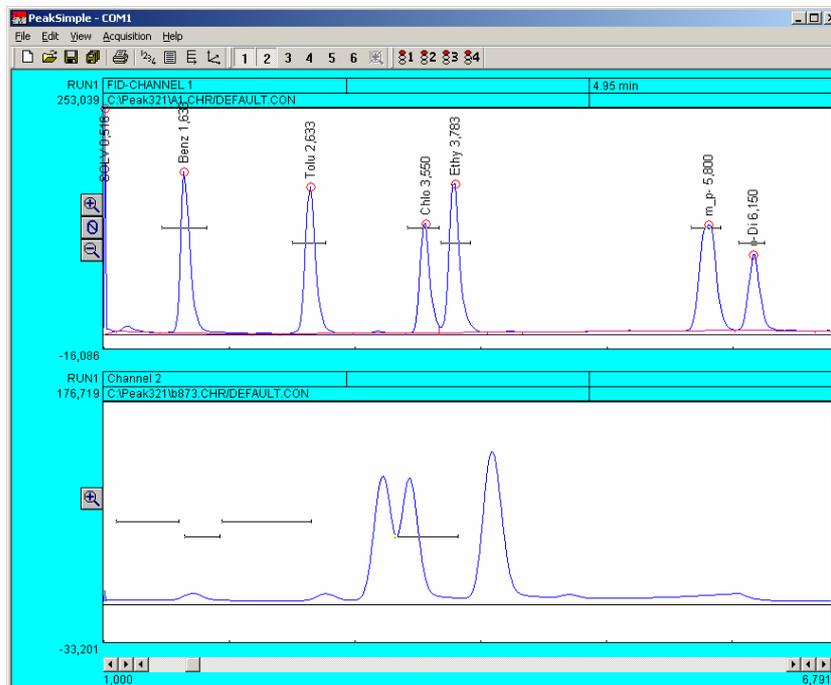
Um Informationen über die Statistik der Kalibration zu bekommen, können sie die Schaltfläche **Statistics** oben rechts im Fenster an. Es erscheint der folgende Informationsdialog.



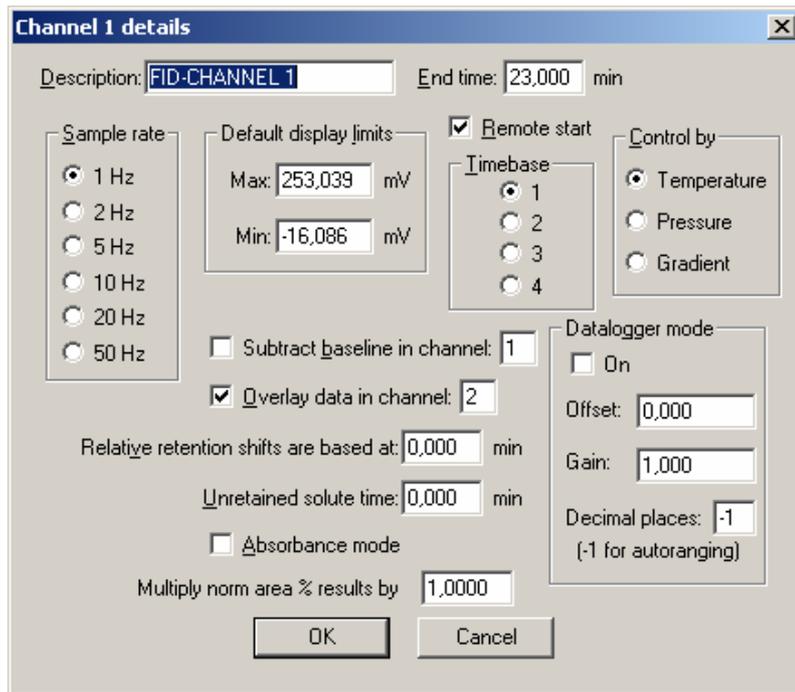
3.10 Vergleich von Chromatogrammen

Um die Chromatogramme von zwei Analysenläufen miteinander zu vergleichen bietet PeakSimple eine Funktion an, mit der zwei Chromatogramme übereinander gelegt werden können. Sollen mehr Chromatogramme verglichen werden, kann die 3D-Funktion von PeakSimple verwendet werden.

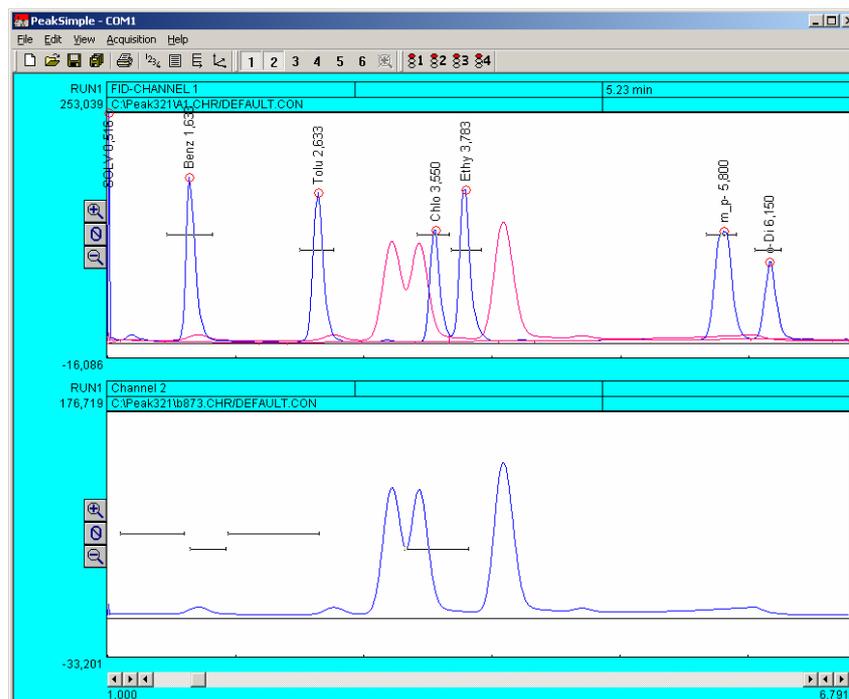
Um zwei Chromatogramme übereinander zu legen, öffnen sie zunächst jedes Chromatogramm in einem separaten Kanal. Um einen weiteren Kanal zur Ansicht zu aktivieren, aktivieren sie eine weitere der Schaltflächen **1** bis **6** in der Toolbar. Es erscheint ein weiteres Chromatogrammfeld.



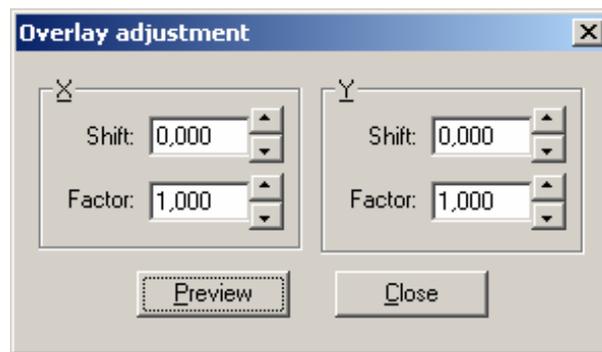
Wenn beide Chromatogramme geöffnet sind, klicken sie das obere Chromatogramm mit der rechten Maustaste an und wählen sie im Kontextmenü den Punkt **Channel details** aus. Es erscheint ein Dialogfeld, in dem alle Einzelheiten und Einstellungen des entsprechenden Kanals zusammengefasst sind.



Um das Chromatogramm des zweiten Kanals über das des ersten zu legen, aktivieren sie die Option **Overlay data in channel** und tragen sie in dem danach folgenden Feld eine **2** ein. Schießen sie das Dialogfenster durch Anklicken der Schaltfläche **OK**. Das Chromatogramm, welches in den zweiten Kanal gelesen wurde, wird nun in einer anderen Farbe im ersten Chromatogrammfeld dargestellt.



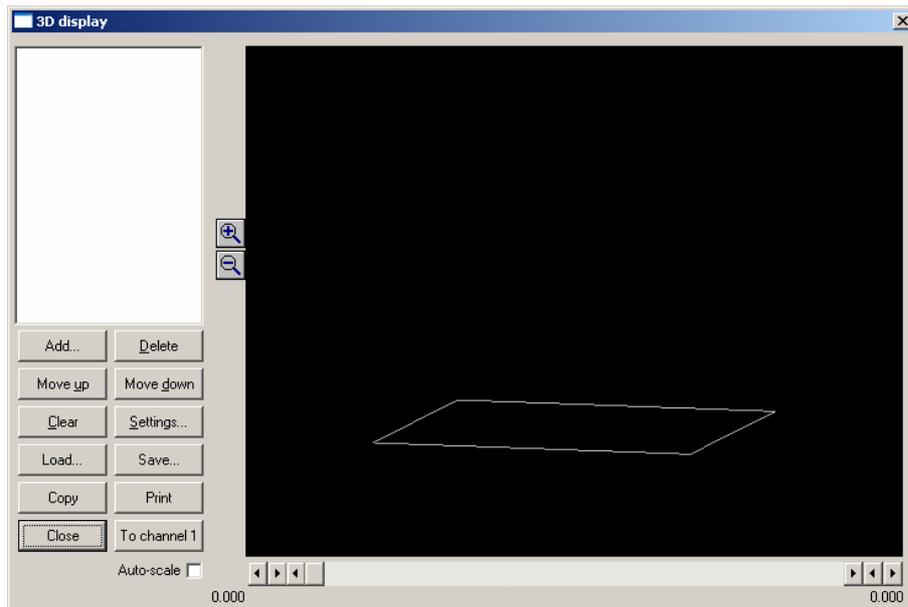
Wollen sie die Chromatogramme gegeneinander verschieben, etwa weil sich Retentionszeiten geringfügig verschoben haben, können sie dies dadurch erreichen, dass sie das Chromatogrammfeld, in dem die übereinander gelegten Chromatogramme dargestellt sind, wiederum mit der rechten Maustaste anklicken und im Kontextmenü den Punkt **Overlay adjust** anklicken. Es wird das folgende Dialogfenster angezeigt:



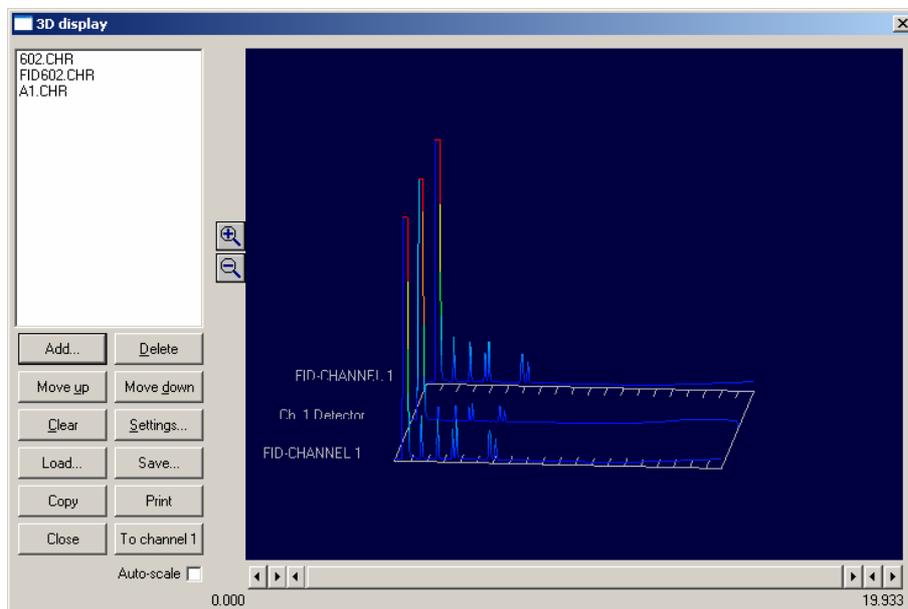
Um das Chromatogramm in Richtung der Zeitachse zu verschieben, verändern sie den Wert **Shift** in der Gruppe **X**. Durch die Veränderung des Wertes **Factor** können sie das Chromatogramm auf der Zeitachse stauchen oder strecken. Wollen die die Chromatogramme in Richtung der Intensitätsachse verschieben, nehmen sie die Änderungen im in der entsprechenden Gruppe **Y** vor. Auch hier können sie das Chromatogramm entlang der Intensitätsachse stauchen und strecken, indem sie den Wert im Feld **Factor** variieren.

3.10.1 Vergleich von Chromatogrammen in der 3D-Ansicht

Wenn sie mehr als zwei Chromatogramme miteinander vergleichen möchten, können sie hierzu die 3D-Darstellung nutzen, die PeakSimple hierzu anbietet. Um diese Darstellung zu öffnen, wählen sie **View** – **3D display** im Hauptmenü. Es wird ein neues Fenster geöffnet, welches im linken Bereich die Steuerelemente und eine Liste der geöffneten Chromatogramme enthält, im rechten Bereich erfolgt die 3D-Darstellung.



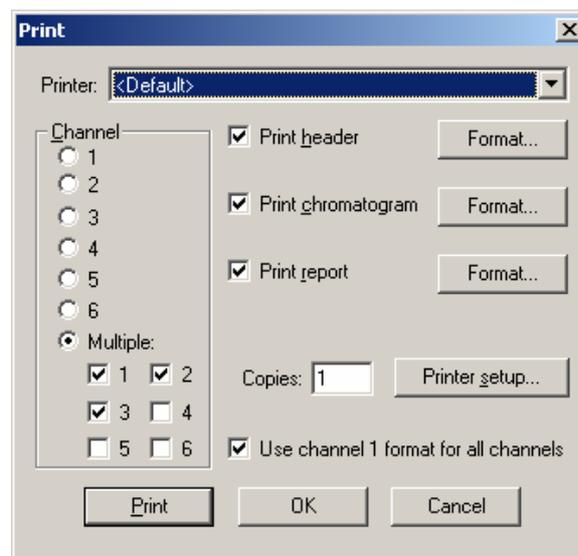
Um ein Chromatogramm der Darstellung hinzuzufügen, klicken sie auf die Schaltfläche **Add**. Es erscheint der Standard-Dialog zum Öffnen einer Datei. Wählen sie eine Datei aus und bestätigen sie mit der Schaltfläche **OK**. Das Programm fügt das gewählte Chromatogramm der 3D-Ansicht hinzu.



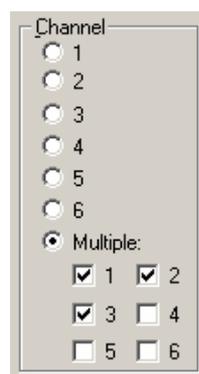
3.11 Chromatogramme ausdrucken

Die Chromatogramme sowie die Analysenergebnisse können zu Zwecken der Dokumentation ausgedruckt werden. Um ein Chromatogramm zu drucken, laden sie dieses zunächst in einen leeren Kanal.

Wählen sie hiernach die Punkte **File** – **Print** im Hauptmenü.



Es erscheint ein Dialogfenster, in dem sie zunächst einmal auswählen müssen, welches Chromatogramm ausgedruckt werden soll. Wählen sie hierzu den entsprechenden Kanal aus.



Die letzte Option **Multiple** ist dazu gedacht, mehrere Chromatogramme auf einer Seite auszudrucken. Die einzelnen Kanäle, die zusammen ausgedruckt werden sollen, können sie unterhalb der Option **Multiple** festlegen.

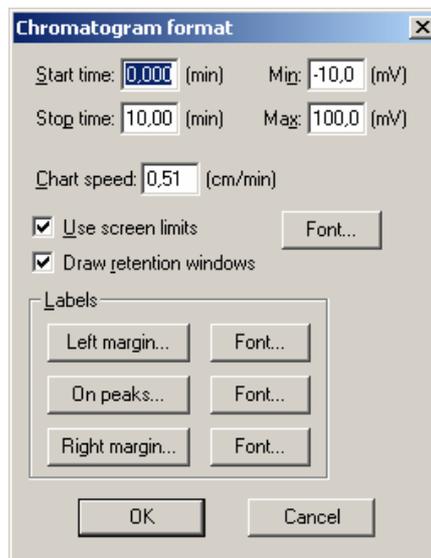
Der Ausdruck kann zusätzlich mit einem Kopf versehen werden, in dem verschiedene Informationen zum Analysenlauf enthalten sein können. Hier können beispielsweise der Name des Labors, der Name desjenigen, der die Analyse durchgeführt hat, die Analysenzeit, das Analysendatum, das Carriergas, die verwendete Säule und viele weitere Informationen ausgegeben werden. Um den Kopf auszudrucken, aktivieren sie im Druck-Dialog zunächst die Option **Use Header** und klicken sie hiernach die benachbarte Schaltfläche **Format**. Es wird ein neuer Dialog geöffnet.

The screenshot shows a 'Header format' dialog box with the following elements:

- Fields with checkboxes: Lab name, Client, Client ID, Collection date, Holding time, Analysis date, Method, Lab ID, Description, Column, Carrier, Temp. prog, Events, Components, Integ details, Control file, Data file, Sample, Operator, Comments, QC batch number.
- Checkboxes for 'List' are present for Temp. prog, Events, Components, and Integ details.
- A 'Copy from' section on the right has radio buttons for options 1 through 6, with option 1 selected.
- A 'Font...' button is located below the 'Copy from' section.
- Buttons at the bottom: OK, Cancel, and Comments...

Füllen sie die Felder, deren Informationen sie im Kopf des Ausdrucks verwenden wollen mit den entsprechenden Informationen und aktivieren die die CheckBox vor diesem Feld. Nur Felder, deren CheckBox aktiviert ist, werden im Ausdruck ausgegeben. Durch Anklicken der Schaltfläche **Comment** wird ein weiteres Fenster geöffnet, in das sie einen frei formatierbaren Kommentar eintragen können. Durch Anklicken der Schaltfläche **Font** öffnen sie den Windows-Standard-Dialog zum Verändern der verwendeten Schriftart. Es wird empfohlen, die die Schrift „Arial“ in der Größe 8 bis 10 Punkte zu verwenden, um eine optimale Darstellung im Ausdruck zu erhalten. Haben sie alle Einträge vorgenommen können sie das Fenster durch Anklicken der Schaltfläche **OK** wieder schließen und zum Druck-Dialog zurückkehren.

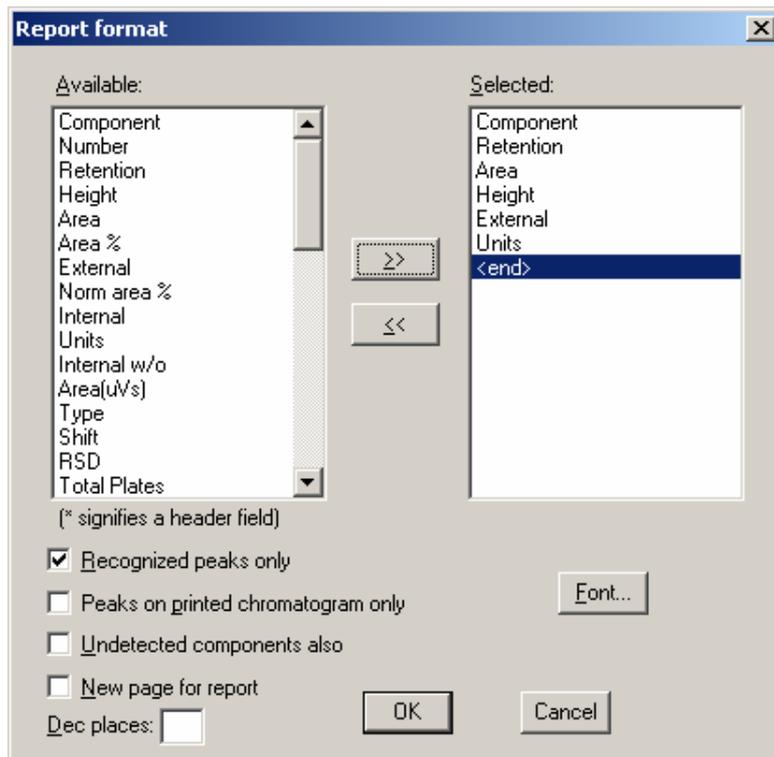
Die Option **Print chromatogram** im Druck-Dialog sollte aktiviert sein, durch klicken der benachbarten Schaltfläche **Format** können die die Chromatogramm-Ausgabe auf dem Ausdruck beeinflussen. Hier können sie beispielsweise Einstellungen am Zeit- und Intensitätsfenster vornehmen, welches auf dem Papier dargestellt werden soll.



Die Schaltflächen **Font** öffnen jeweils den Windows-Standard-Dialog zum Verändern der Schriftart der entsprechenden Beschriftungen. Für den Ausdruck des Chromatogramms wird in allen vier Fällen die Schriftart „Arial“ in der Größe von 6 Punkten empfohlen.

Durch Aktivierung der Option **Print Report** im Druck-Dialog wird das Ergebnis der Auswertung unter der Chromatogrammdarstellung ausgegeben.

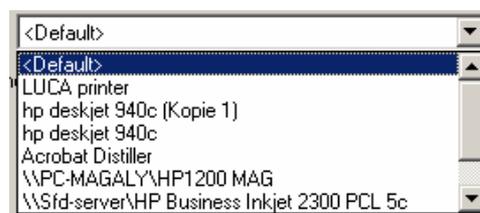
Die erfolgt in Form einer Tabelle. Welche Spalten diese Tabelle enthalten soll, können sie beeinflussen, indem sie die benachbarte Schaltfläche **Format** anklicken. Es erscheint ein Dialog, der im linken Teil alle verfügbaren Datenfelder enthält, im rechten Teil ist eine Liste zu finden, die die Felder, die der Tabelle bisher hinzugefügt wurden, enthält. Benutzen die die Schaltflächen **<<** und **>>**, um der Tabelle Felder hinzuzufügen oder Felder zu löschen. Legen sie, bevor sie einen neuen Eintrag in die rechte Spalte übernehmen im unteren Bereich der Dialogbox die Anzahl der auszugebenden Nachkommastellen in das Feld „Dec places“ ein. Die Anzahl der Nachkommastellen kann nach der Zusammenstellung der Tabelle zu einem späteren Zeitpunkt nicht mehr verändert werden.



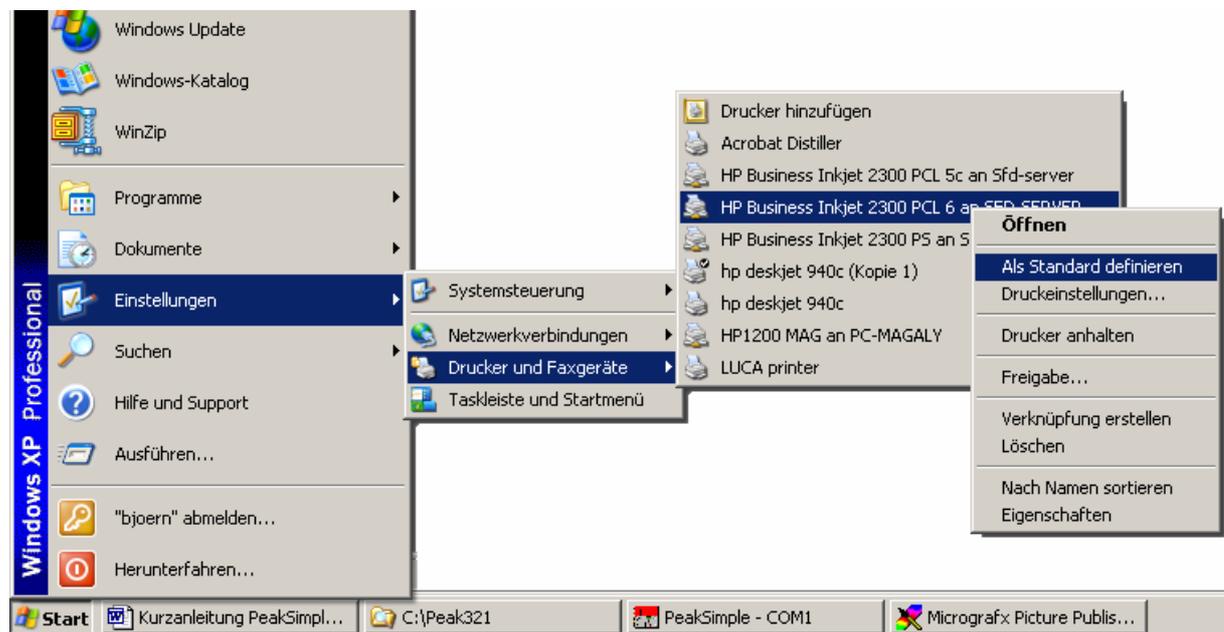
Auch in diesem Dialog ist eine Schaltfläche **Font** vorhanden, mit der sie Einfluss auf die Schriftart nehmen können, in der die Ergebnistabelle auf den Drucker ausgegeben wird. Hier wird ebenfalls die Schriftart „Arial“ in der Größe von 10 Punkten empfohlen, um ein optimales Ergebnis zu erzielen.

Ferner befindet sich im Druck-Dialog eine Schaltfläche **Printer setup**. Wenn sie diese anklicken, wird der Einstellungsdialog ihres installierten Druckers geöffnet. Dieser Dialog variiert von Hersteller zu Hersteller und soll daher hier nicht weiter diskutiert werden.

Sind auf dem System mehrere Drucker installiert, können die im oberen Bereich des Druck-Dialogs den Drucker wählen, auf den der Ausdruck ausgegeben werden soll.



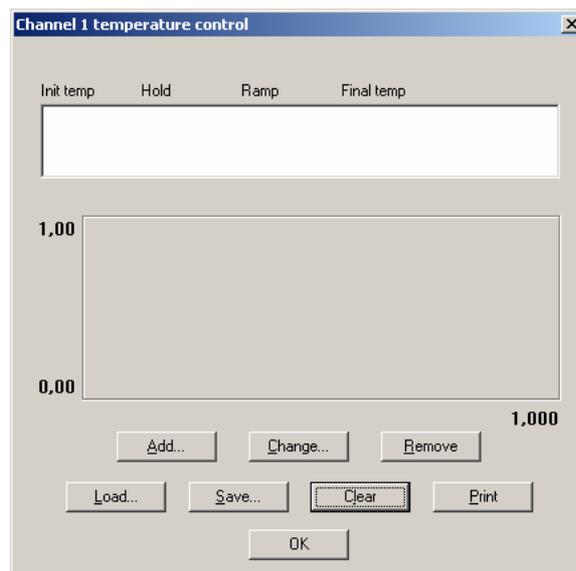
Standardmäßig ist in diesem Feld der Drucker „<Default>“ aktiviert. Hierunter ist der Drucker zu verstehen, der auf ihrem System als Standard-Drucker eingerichtet ist. Die Einstellung des Standard-Druckers können sie vornehmen, indem sie aus dem Windows-Start-Menü die Punkte **Einstellungen** – **Drucker und Faxgeräte** aufrufen. Hiernach erscheint eine Liste aller auf dem System verfügbaren Drucker. Klicken sie den Eintrag, den sie zum Standard definieren möchten mit der rechten Maustaste an und wählen sie im Kontextmenü den Punkt **Als Standard definieren**.



3.12 Temperaturprogramme

In der Gaschromatographie ist es weit verbreitet, dass man eine bessere Trennung der Probenkomponenten auf der GC-Säule erreichen kann, wenn man die Temperatur der Säule während der Trennung verändert. Hierzu bietet PeakSimple die Möglichkeit der Erstellung von Temperaturprogrammen.

Bewegen sie hierzu den Mauscursor auf das Chromatogramm des Kanals, für den sie ein neues Temperaturprogramm erstellen möchten. Betätigen sie die rechte Maustaste und wählen sie den Eintrag **Temperature...** im Kontextmenü. Es wird ein Dialog-Fenster angezeigt, in dem das Temperaturprogramm schrittweise zusammengesetzt werden kann.

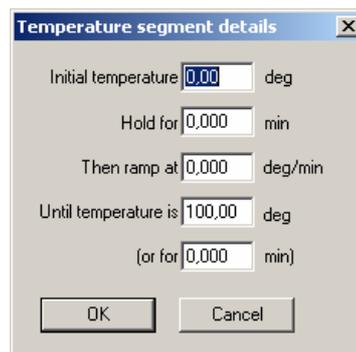


Im oberen Bereich des Fensters wird das Programm zusammengestellt, im unteren Bereich wird der Verlauf der Temperatur in Abhängigkeit von der Zeit dargestellt. Ist für den Kanal noch kein Temperaturprogramm erstellt worden, ist das obere Feld leer.

Das Temperaturprogramm wird aus mehreren Schritten zusammengesetzt, die nacheinander abgearbeitet werden. Jeder Schritt fängt mit einer Anfangstemperatur (initial temperature) an, die für eine definierte Zeit gehalten werden kann, bevor eine Temperaturänderung durchgeführt wird. Wird die Haltezeit (*hold for*) auf Null gesetzt, wird direkt mit der Temperaturänderung begonnen. Die Temperaturänderung (*ramp*) ist definiert durch die Temperaturänderung pro Minute, d. h. in

einer Minute wird eine definierte Temperaturerhöhung bzw. –senkung durchgeführt. Diese Änderung kann entweder durch das Erreichen einer definierten Endtemperatur oder nach einer definierten Zeit abgebrochen werden.

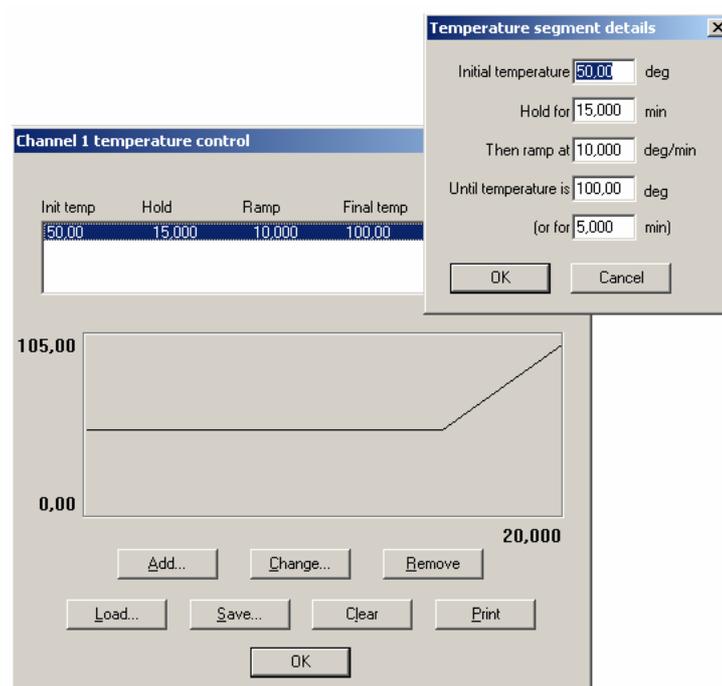
Um einen neuen Temperaturschritt einzufügen, klicken sie mit der Maus auf die Schaltfläche **Add**. Es wird ein neues Fenster geöffnet, in dem sie die oben beschriebenen Parameter für die neuen Schritt eintragen.



The dialog box titled "Temperature segment details" contains the following input fields and buttons:

- Initial temperature: 0.00 deg
- Hold for: 0.000 min
- Then ramp at: 0.000 deg/min
- Until temperature is: 100.00 deg
- (or for: 0.000 min)
- Buttons: OK, Cancel

Haben sie alle Parameter eingetragen, wird das Fenster durch Anklicken der Schaltfläche OK wieder geschlossen. Der neu erstellte Schritt erscheint jetzt im oberen Bereich des zuvor beschriebenen Fensters. Im unteren Bereich erfolgt direkt die graphische Darstellung des Temperaturprogramms. Diese soll im folgenden Beispiel verdeutlicht werden.



Hinweis:

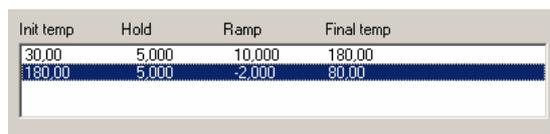
Es ist wichtig, dass der Temperaturverlauf eine durchgezogene Linie darstellt. Unterbrechungen im Temperaturverlauf können zu Fehlfunktionen während des Analysenlaufes führen.

Haben sie das Temperaturprogramm vollständig eingegeben, klicken sie auf die Schaltfläche **Save...** und dieses Programm in einer Datei abzuspeichern. Das Temperaturprogramm können sie hinterher immer wieder durch Anklicken der Schaltfläche **Load...** öffnen und entweder verändert oder ohne Änderung erneut nutzen.

Hinweis:

Die Dateien, die die Temperaturprogramme enthalten werden standardmäßig in dem Verzeichnis auf der Festplatte abgelegt, in welches PeakSimple installiert wurde.

Wenn sie einen Schritt aus dem Programm entfernen möchten, müssen sie diesen zunächst einmal mit der linken Maustaste in der Liste der Programmschritte auswählen. Der jeweils aktive Eintrag der Liste ist an der blauen Markierung zu erkennen. Klicken sie anschließend die Schaltfläche **Remove** an, um den aktiven Schritt zu entfernen.



Init temp	Hold	Ramp	Final temp
30,00	5,000	10,000	180,00
180,00	5,000	-2,000	80,00

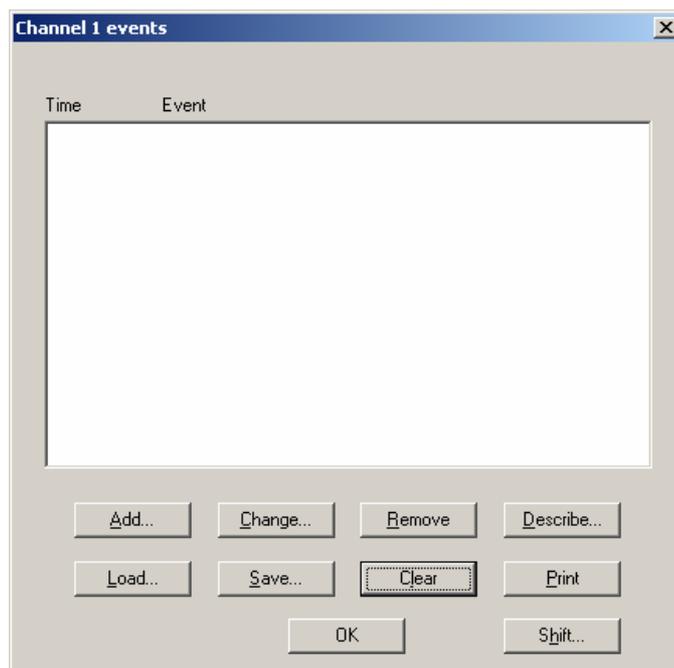
Wenn sie auf einen Eintrag de Liste doppelt mit der linken Maustaste klicken, wird das Parameterfenster für diesen Eintrag erneut geöffnet und sie können Änderungen an diesem Programmschritt vornehmen. Den gleichen Effekt hat es, wenn sie einen Programmschritt auswählen und anschließend die Taste **Change...** anklicken.

Durch das Anklicken der Schaltfläche **Clear** erreichen sie das Löschen aller Einträge in der Liste. Die ist sinnvoll, wenn sie ein völlig neues Temperaturprogramm erstellen möchten.

3.13 Event-Programmierung

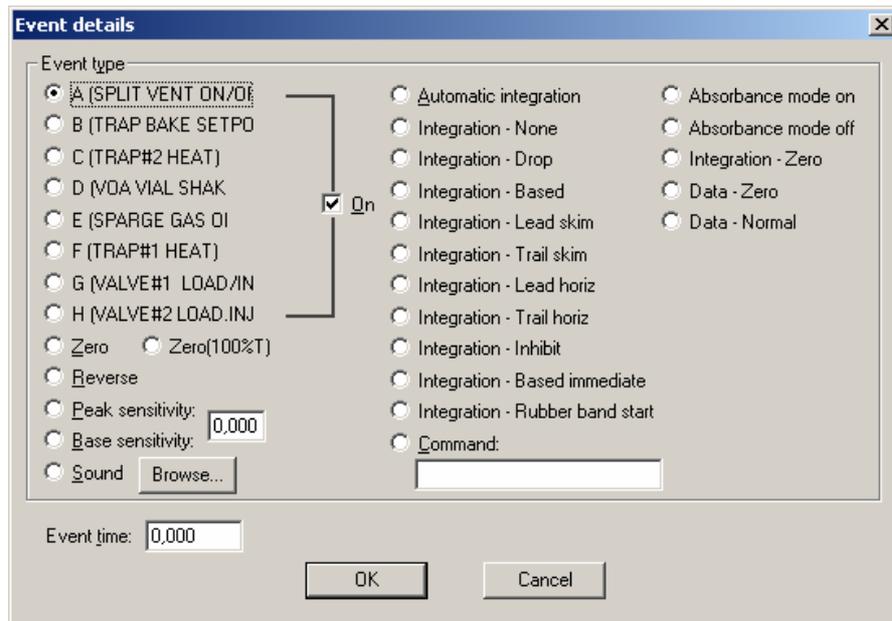
Ebenso, wie eine Veränderung der Säulentemperatur während der Analyse durch Hinterlegung eines Temperaturprogrammes, ist es möglich eine Reihe anderer Funktionen zeitabhängig während des Analysenlaufes zu nutzen, wie beispielsweise das Schalten eines Ventils oder die AutoZero-Funktion.

Auch in diesem Falle erstellen sie eine Liste, in der festgehalten wird, zu welchem Zeitpunkt nach dem Start-Signal welches Ereignis (Event) stattfinden soll. Klicken sie auch jetzt wieder mit der rechten Maustaste in das Chromatogrammfeld des entsprechenden Kanals. Wählen sie jetzt den Punkt **Events** im Kontextmenü. Es erscheint ein neues Fenster, in dem alle bisher für diesen Kanal programmierten Events aufgelistet sind. Rufen sie diese Funktion zum ersten Mal auf, ist diese Liste leer.



Haben sie bereits eine Eventtabelle zu einem früheren Zeitpunkt erstellt und abgespeichert, können sie diese jetzt durch Anklicken der Schaltfläche **Load...** laden und gegebenenfalls verändern.

Um ein neues Ereignis in die Liste aufzunehmen klicken sie die Schaltfläche **Add**. Es wird ein Fenster angezeigt, in dem alle programmierbaren Events aufgelistet sind.



Im oberen Bereich sind die verfügbaren Events aufgelistet, unten links wird die Zeit (*Event time*) angegeben, zu der das Ereignis eintreten soll. Am Anfang der Liste sind verschiedene Relais aufgelistet, die Erläuterungen beziehen sich auf Relais in SRI Gaschromatographen. Die Schaltposition des Relais wird bestimmt durch die Checkbox **On**.

Um ein neues Event zu programmieren, geben sie zunächst die gewünschte Eintrittszeit in Minuten ein und wählen sie hiernach das Event aus. Durch Anklicken der Schaltfläche **OK** kehren sie zum vorherigen Dialogfenster zurück. Das neue Ereignis ist nun in der Liste der Programmierten Events enthalten.

Sind alle gewünschten Events programmiert, klicken sie die Schaltfläche **Save** an, um die Eventtabelle zu speichern.

Hinweis:

Auch die Dateien, in denen die Eventtabellen abgelegt werden, werden in das Verzeichnis geschrieben, in das das Programm installiert wurde.

Die Funktionen der übrigen Schaltflächen entsprechen denen im vorherigen Abschnitt.

3.14 Erstellung von Arbeitsumgebungen

PeakSimple erlaubt die Erstellung und Speicherung von verschiedenen Arbeitsumgebungen. In den so genannten „Controlfiles“ werden Informationen wie Komponenten- und Eventtabellen sowie Kanal-Einstellungen gespeichert. Es können beliebig viele Controlfiles angelegt werden, so dass für verschiedene Analysen die entsprechenden erforderlichen Einstellungen nicht immer wieder neu vorgenommen werden müssen.

Um einen neuen Controlfile zu erstellen, nehmen sie zunächst aller erforderlichen Programmeinstellungen vor. Ist dieser Vorgang abgeschlossen, wählen sie im Hauptmenü **File** – **Save control file**. Das Programm fordert sie jetzt auf, einen Dateinamen einzugeben.

Verwenden sie hier am besten einen beschreibenden Namen, der es ihnen hinterher erleichtert, die entsprechende Arbeitsumgebung wieder zu finden.

Schließen sie die Eingabe durch einen Mausklick auf die Schaltfläche **OK** ab.

Hinweis:

Beim Programmstart wird automatisch die Arbeitsumgebung geladen, die in der Datei DEFAULT.CON gespeichert ist. Wenn sie in den meisten Fällen mit sehr ähnlichen Einstellungen arbeiten, ist es sinnvoll, die von ihnen bevorzugten Einstellungen in dieser Datei abzuspeichern. Gehen sie hierzu wie oben beschrieben vor und wählen sie im Speichern-Dialog die Datei DEFAULT.CON aus. PeakSimple fragt nach, ob es die existierende Datei wirklich überschreiben soll. Wählen sie hier die Schaltfläche **Ja.**

3.14.1 Laden einer Arbeitsumgebung

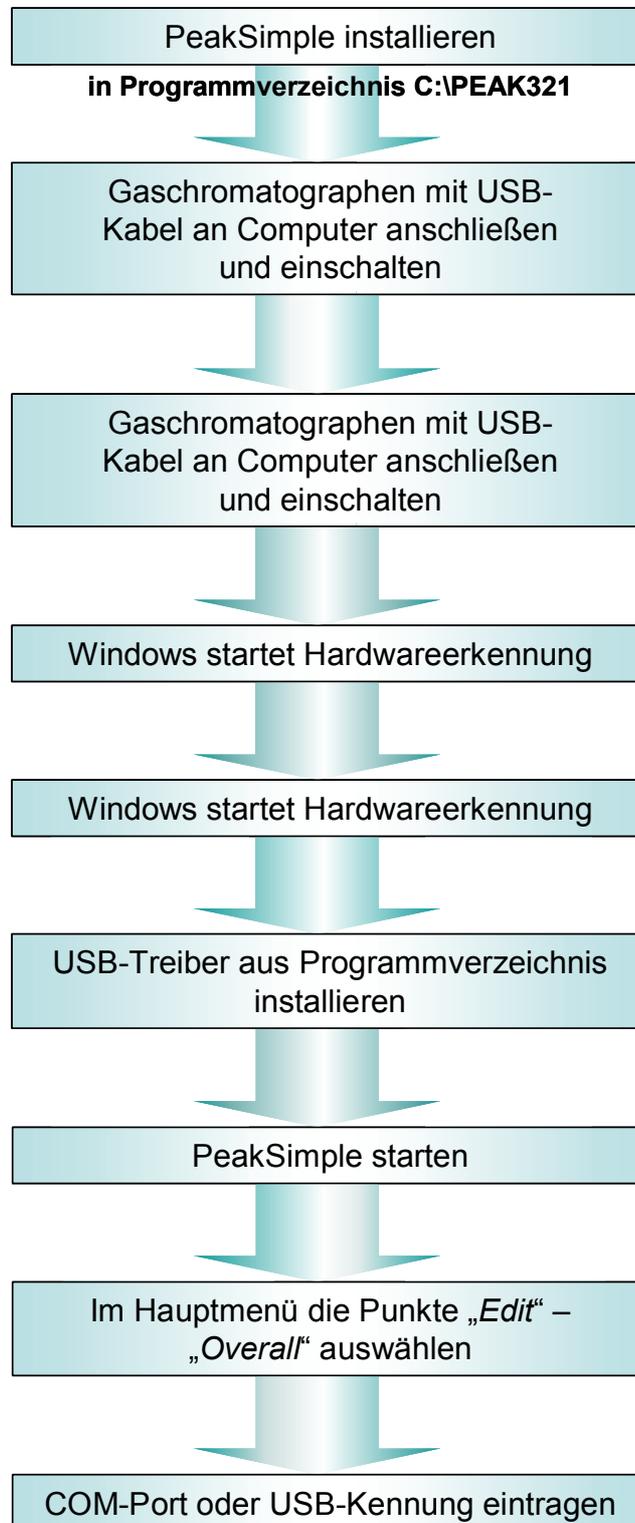
Um eine Control-Datei zu laden, wählen sie im Hauptmenü File – Open control file. Es wird ein Fenster angezeigt, in dem die vorhandenen Controlfiles aufgelistet werden. Wählen sie eine der Dateien aus und schließen sie den Ladevorgang durch Anklicken der Schaltfläche **OK** ab.

Hinweis:

Die Controlfiles werden in dem Ordner abgelegt, in den das Programm installiert wurde.

4 Anhang

4.1 Schematische Übersicht über den Installationsvorgang



Version 1.0 / Stand 09-2004

Schambeck SFD GmbH

Rhöndorfer Straße 51 · 53604 Bad Honnef
Tel.: 02224 9239 0 · Fax: 02224 9239 20
Email: mailto@schambeck-sfd.com
<http://www.schambeck-sfd.com>