

NANOCOLOR® Spektrometer Software

Version 4.5 (Juli 2012)

Ref. 4.5



Bedienungsanleitung

Inhaltsverzeichnis

1	Installation	3
1.1	Systemvoraussetzungen	3
1.2	Installation der Software	3
1.3	Installation der USB-Treiber	5
1.4	Bedienungshinweis	6
2	GLP und FDA 21 CFR Part 11 Konformität	7
3	Teil 1: NANOCOLOR® Photometer Funktionen	8
3.1	NANOCOLOR® Küvettenteste	8
3.1.1	Auslesen des Photometerspeichers	8
3.1.1.1	Export nach MICROSOFT EXCEL	12
3.1.1.2	Export in das XML Datenbankformat	14
3.1.1.3	Export in das TEXT Format	14
3.1.1.4	Export nach OpenOffice SCALC	14
3.1.1.5	Export an ein Laborinformationssystem	15
3.1.2	Messungen online durchführen	15
3.2	Sondermethoden kalibrieren	16
3.2.1	Methodendaten messen	16
3.2.2	Regressionstyp ändern und Protokoll drucken	21
3.2.3	Sondermethode im Photometer speichern	22
3.2.4	Simulationsrechnung	24
3.3	Kinetik	25
3.4	Bioanalytik Funktionen	27
3.5	Photometrische Basisfunktionen	29
3.6	Sondermethoden	32
3.7	Multiwellenlängenmessung	32
3.8	Farbmessung	38
3.9	Brauereianalytik	38
3.10	Enzymatische Tests	38
3.11	Anisidin-Zahl	38
3.12	Von USB-Stick importieren	40
3.13	Original-Dateien	40
3.13.1	Original-Dateien lesen	41
3.13.2	Aus Original wiederherstellen	42
3.14	Autosampler	43
3.15	IQK Karte 4	43
3.15.1	Leere IQK-Karte 4	43
3.15.2	IQK-Karte 4 aus Standardmessungen	44
3.16	Berichtsfunktionen	47
3.16.1	Tagesbericht	47
3.16.2	Bericht mit Ganglinie	50

4	Teil 2 : Scan Funktionen	54
4.1	Umgang mit Wellenlängen-Scans	54
4.2	Funktionen des Scan- und Grafik-Menüs	59
4.2.1	Menüfunktion <i>Scan ausführen</i>	59
4.2.2	Menüfunktion <i>Null messen</i>	62
4.2.3	Menüfunktion <i>Neu Messen</i>	62
4.2.4	Menüfunktion <i>Scan öffnen</i>	62
4.2.5	Menüfunktion <i>Scan speichern</i>	62
4.2.6	Menüfunktion <i>Scan drucken</i>	64
4.2.7	Menüfunktion <i>Scan Methoden</i>	64
4.2.8	Menüfunktion <i>Scan exportieren</i>	65
4.2.8.1	Menüfunktion <i>Scan exportieren / ASCII (;)</i>	65
4.2.8.2	Menüfunktion <i>Scan exportieren / MS EXCEL</i>	65
4.2.8.3	Menüfunktion <i>Scan exportieren / OpenOffice SCALC</i>	66
4.2.8.4	Menüfunktion <i>Scan exportieren / ANDI / netCDF</i>	66
4.2.9	Menüfunktion <i>Scan importieren</i>	67
4.2.10	Menüfunktion <i>Aktuellen Scan schließen</i>	67
4.2.11	Menüfunktion <i>Alle Scans schließen</i>	67
4.2.12	Menüfunktion <i>Beschriftungen löschen</i>	67
4.2.13	Menüfunktion <i>Alle Beschriftungen löschen</i>	67
4.2.14	Menüfunktion <i>Null-Linie löschen</i>	67
4.2.15	Ableitung	68
4.2.16	Menüfunktion <i>Bioanalytik Scan</i>	68
4.3	Funktionen des Scan-Fensters	68
4.3.1	Schalter	69
4.3.1.1	Scans addieren	69
4.3.1.2	Scans subtrahieren	70
4.3.1.2	Bestimmung des Peakfaktors	71
4.3.1.3	Scananalyse	72
4.3.1.3	Integration einzelner Peaks	74
4.3.1.4	Anlegen einer Null-Linie	75
4.3.1.5	Gitternetzlinien	76
4.3.1.6	Beschriftungen	76
4.3.1.7	Auszoomen	78
4.3.1.8	Scan-Kinetik auswerten	78
4.3.1.9	Protokoll-Fenster öffnen	81
4.3.1.10	Protokoll drucken	81
4.3.1.11	Scan-Fenster schließen	82
4.3.2	Funktionen zur Beeinflussung der Scan-Analyse	82
4.3.2.1	Funktionsrahmen <i>Peak Funktionen</i>	82
4.3.2.2	Automatische Markierungen	83
4.3.2.3	Kurvendarstellung	84
4.3.2.4	Funktionsrahmen <i>Scan Funktion</i>	85
4.3.3	Scan-Grundeinstellungen	86
5	Photometer Sondermethoden	88
5.1	Funktionen der Tabelle <i>PC-Datenbank</i>	89
5.2	Funktionen der Tabelle <i>Photometer</i>	91
5.3	Methoden zwischen PC und Photometer austauschen	92

5.4	Sondermethoden anlegen / editieren	93
5.4.1	Einzelwellenlängenmessung	93
5.4.2	Multiwellenlängenmessung	94
5.4.3	Kinetik	95
5.4.4	Wellenlängen-Scan	96
5.4.5	Scan-Kinetik	97
6	Grafikoptionen	98
6.1	Menüfunktion <i>Grafik/In Zwischenablage kopieren</i>	98
6.2	Menüfunktion <i>Grafik/Als Bild speichern</i>	98

7 Handbuch Teil 3 : Software Einstellungen 99

7.1	Verbinden / Trennen	99
7.2	Probenliste	99
7.3	Systemeinstellungen	102
7.3.1	Allgemeine Einstellungen	102
7.3.2	Scan-Einstellungen	105
7.3.3	Farbmanagement	106
7.3.4	Protokoll-Layout	106
7.3.5	Firmenname	109
7.3.6	LIMS-Konfigurator	109
7.3.7	Sipper-Pumpe <i>NANOCOLOR®</i> FP 100	115
7.3.8	<i>NANOCOLOR®</i> Testdaten	116
7.4	Prüfmittelüberwachung (DWA-A 704)	117
7.4.1	Test der Halogenlampe	118
7.4.2	Test der Deuteriumlampe	119
7.4.3	Streulichttest nach DAB, Ph. Eur.	120
7.4.4	Streulichttest Kaliumiodid 220 nm	120
7.4.5	Wellenlängenrichtigkeit	121
7.4.6	Photometrische Richtigkeit mit <i>NANOCHECK</i>	123
7.4.7	Bestimmung des Signal/Rausch-Verhältnisses	125
7.5	LOG Dateien anzeigen	126
7.6	Hashcode zeigen	127
7.7	GUID's verwalten	128

8 Anhang 130

8.1	Export des Photometerspeichers nach ASCII	130
8.2	Export des Photometerspeichers nach XML	131
8.3	Export eines Scans, Format ASCII	132
8.4	Export eines Scans, Format netCDF / ANDI	133
8.5	Literaturangaben zu den Bio-Testen	135
8.6	Angaben zur Glättungsfunktion	136
8.7	Sprachauswahl der Software	136

8.8	Auswahl der Einheiten	137
8.9	Ausreißereleminierung und Wiederholungsmessungen	137
8.9.1	Ausreißer	137
8.9.2	Mehrfachmessung	139
8.9.3	Signifikanzniveau α	141
8.10	Bioanalytik Scan	142
8.11	Softwarefehler	144



Sehr geehrter Kunde,

wir beglückwünschen Sie zu dem Kauf eines unserer Photometer **NANOCOLOR®^{uv/vis}** oder **NANOCOLOR® VIS**. Damit besitzen Sie ein extrem leistungsfähiges Spektralphotometer für den Wellenlängenbereich 190 nm bis 1100 nm bzw. 340 nm bis 1100 nm. Um Ihnen die Arbeit mit Ihrem neuen Gerät zu erleichtern und alle Möglichkeiten des Photometers optimal nutzen zu können, wurde die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** entwickelt.

Bitte lesen Sie diese Software-Anleitung sorgfältig durch.

Die Software **NANOCOLOR® Spektrometer Software V 4.5** erfüllt im Wesentlichen folgende Aufgaben:

- Auslesen der Testdaten aus dem Photometerspeicher
- Online-Speicherung von Testdaten
- Exportieren von Testdaten
- Erstellen photometrischer Sondermethoden
- vollständige Steuerung des Photometers
- Verwaltung und Analyse von Wellenlängen-Scans
- Prüfung des Photometers
- Steuerung des **NANOCOLOR®** Autosamplers
- automatisches Erstellen einfacher Berichte
- automatische Erstellung der IQK-Karte 4

Wenn Sie bereits ältere Versionen der **NANOCOLOR® Spektrometer Software** kennen oder die **NANOCOLOR®** Datenexport-Software kennen, werden Sie mit vielen der Softwarefunktionen vertraut sein. Das Handbuch zu der Software gliedert sich in drei Teile. Teil 1 beschreibt die „klassischen“ **NANOCOLOR®** Software-Funktionen, Teil 2 beschreibt das Erstellen von Wellenlängen-Scans und die Photometer-Steuerung. In Teil 3 werden die Einstellungen der Software erklärt.

Dieses Handbuch verwendet einige typographische Konventionen in der Beschreibung des Programms **NANOCOLOR® Spektrometer Software** und wie es zusammen mit Ihrem Photometer verwendet wird. Diese Konventionen werden jetzt beschrieben.

Tasten bzw. Schalter, die an der Computertastatur oder dem Photometer-Touchscreen gedrückt werden müssen, wie z.B. die **[ENTER]** Taste, werden in fetten Grossbuchstaben gedruckt und in eckige Klammern eingeschlossen.

Programm- oder Datenverzeichnisse und Dateinamen werden *kursiv* gedruckt wie das Standardprogrammverzeichnis *c:\programme\macherey_nagel\uvvis*.

Andere Software, die für die Verwendung mit dem Programm **NANOCOLOR® Spektrometer Software** notwendig ist oder zusammen verwendet werden kann, wie z.B. MS EXCEL, werden in Grossbuchstaben gedruckt.

Knöpfe, Schalter, Optionsschalter und Texteingabefelder des Programms **NANOCOLOR® Spektrometer Software**, wie z.B. der Knopf **Öffnen**, werden kursiv gedruckt und mit einem Rahmen markiert. Der größte Teil der Softwareschalter ist graphisch ausgelegt, in diesem Fall wird der entsprechende Schalter wie z. B.  als Icon angezeigt.

Menübefehle wie **Scan/Öffnen** des Programms **NANOCOLOR® Spektrometer Software** werden kursiv gedruckt und mit einem grauen Hintergrund markiert.

Wichtige Hinweise sind mit einem gelben Warndreieck gekennzeichnet.





1 Installation

1.1 Systemvoraussetzungen

Das Programm **NANOCOLOR® Spektrometer Software** benötigt **mindestens** einen Pentium 4 / Athlon XP Prozessor, 100 MB freien Festplattenspeicher, 4 GB RAM unter Windows® XP, VISTA, 7 oder 8. Auf dem System muss das Microsoft **.net-Framework V 2.0** mit allen Service-Packs (3.5) installiert sein. Die VGA-Auflösung sollte mindestens 1024 * 768 Bildpunkte betragen. Der Computer benötigt eine freie serielle RS-232 Schnittstelle bzw. eine freie USB Schnittstelle.

Zur Erzeugung von MS EXCEL Tabellen im XLS- oder XLSX-Format ist weiterhin **Microsoft OFFICE 2003/2007/2010** oder höher erforderlich. Zur Erzeugung von Microsoft Office Spreadsheet Tabellen wird **KEIN** Microsoft Office benötigt. Für die Programminstallation benötigen Sie ein DVD-ROM Laufwerk. Unterstützt wird auch **OPENOFFICE V3.4.4** sowie **LIBREOFFICE V3.4.4**.



OFFICE 2003 / 2007 / 2010 / OPENOFFICE und LIBREOFFICE sind nicht Bestandteil dieser Software!

Bei Installation auf anderen Betriebssystemen kann kein Support gewährt werden!



Bei Verwendung der USB-Schnittstelle muss der mitgelieferte USB-Treiber und der Virtual-Com-Treiber installiert sein.

Für die Installation der Software sind Administrator-Rechte erforderlich.

1.2 Installation der Software

Legen Sie die Installations-DVD in das Laufwerk Ihres Computers und starten Sie die Datei *setup.exe*. Die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** wird standardmäßig im Programmverzeichnis Ihres Computers (in der Regel *c:\Programme*, bei 64 bit-Systemen *c:\Programme (x86)*) im Verzeichnis *MACHEREY-NAGEL\uvvis* installiert. Um einen problemlosen Support sicherzustellen, empfiehlt MACHEREY-NAGEL, den Standard-Installationsort nicht zu ändern.



Bei der Installation bzw. während des ersten Starts der Software werden im Installationsverzeichnis folgende Unterverzeichnisse angelegt:

<i>uvvis\backup_database</i>	Ein Backup der <i>NANOCOLOR®</i> Datenbank für Notfälle
<i>uvvis\beer</i>	Standard-Speicherort für Kalibrierdaten der Brauereianalytik
<i>uvvis\bio</i>	Standard-Speicherort für Messungen der Bioanalytik-Funktionen
<i>uvvis\cielab</i>	enthält die Dateien <i>cielab.xml</i> , <i>cielabrefs.xml</i> , <i>color.txt</i> , <i>custom_radiation.txt</i> , <i>hazen.xml</i> , <i>iod.xml</i> , <i>munsell.xml</i> , <i>pheur.xml</i> , <i>us_color.xml</i> . Wird von der Funktion „Farbmessung“ verwendet
<i>uvvis\contract</i>	enthält den Software-Lizenzvertrag als RTF Datei und den rechtlichen Disclaimer als TXT Datei in verschiedenen Sprachen
<i>uvvis\database</i>	Standard-Speicherort für die Datenbank des Photometer-Speichers
<i>uvvis\dll</i>	enthält alle netCDF-DLLs
<i>uvvis\enzymes</i>	enthält die Datei <i>uvtest.xml</i> , wird von der Softwarefunktion „Enzymatische Tests“ benötigt
<i>uvvis\errorlog</i>	enthält die Datei <i>error.log</i> und <i>error.crp</i> in denen Informationen über eventuelle Softwarefehler gespeichert werden (siehe auch Kapitel 7.5)
<i>uvvis\examples</i>	enthält die Dateien <i>example_1.cdf</i> bis <i>example_5.pdf</i> als Beispiel-Scans (siehe auch 4.1)
<i>uvvis\exports</i>	Standard-Speicherort für alle Daten-Export Funktionen
<i>uvvis\guid</i>	Standard-Speicherort für die GUID-Datenbank
<i>uvvis\ini</i>	enthält die Initialisierungsdateien <i>ini.xml</i> und <i>internet.ini</i>
<i>uvvis\methods</i>	Standard-Speicherort für kinetische Messungen
<i>uvvis\language</i>	enthält die Datei <i>mn_uvvis_language.xml</i> , die alle Sprachen der Software beinhaltet (siehe auch Kapitel 8.7) und das Programm LANGUAGE_TOOL
<i>uvvis\logos</i>	Standard-Speicherort für Ihr Firmenlogo (Protokoll-Layout)
<i>uvvis>manual</i>	enthält alle Handbücher im PDF-Format



<i>uvvis\methods</i>	Standard-Speicherort für die Methodendatenbank
<i>uvvis\nanocheck</i>	ist nach der Installation leer und wird für die Speicherung der NANOCHECK LOT-Daten benötigt (siehe auch Kapitel 7.4.6)
<i>uvvis\originals</i>	ist nach der Installation leer und wird für die Speicherung der Original-Dateien benötigt (siehe Kapitel 3.13)
<i>uvvis\protocols</i>	Standard-Speicherort für Berichte und Protokolle
<i>uvvis\sample_list</i>	Standard-Speicherort für Probenlisten
<i>uvvis\scans</i>	Standard-Speicherort für Wellenlängen-Scans
<i>uvvis\syslog</i>	enthält die Datei <i>sys.log</i> , <i>sys.crp</i> und <i>environment.log</i> die technische Informationen über Ihr Computersystem für den Support-Fall speichert (siehe auch Kapitel 7.5)

1.3 Installation der USB-Treiber

Wenn Sie ein **NANOCOLOR® Spektrometer** über die USB-Schnittstelle mit dem Computer verbinden möchten, müssen zwei Treiberdateien auf Ihrem PC installiert werden. Gehen Sie für die Treiber-Installation bitte wie folgt vor :

Verbinden Sie das **NANOCOLOR® Spektrometer** im ausgeschalteten Zustand mit einer freien USB Schnittstelle Ihres Computers. Schalten Sie das **NANOCOLOR® Spektrometer** ein.

Warten Sie, bis WINDOWS® die neue Hardware erkannt hat und nach einer Treiber-CD fragt. Erkennt Ihr WINDOWS® die neue Hardware nicht automatisch, prüfen Sie bitte, ob die automatische Hardware-Erkennung im BIOS Ihres Computers ausgeschaltet wurde bzw. informieren Sie Ihren Systemadministrator.

Legen Sie die mitgelieferte **NANOCOLOR® Spektrometer Software – DVD** in Ihr DVD-ROM Laufwerk ein UND Starten Sie die Treiberinstallation mit einem Klick auf .

WINDOWS® installiert nun zuerst den USB-Chip Treiber. Danach meldet Windows® noch einmal neue Hardware und der Installationsprozess startet erneut. Windows® installiert nun die Virtual-COM-Port Treiber.

Sollte Ihr PC neue Hardware nicht automatisch erkennen können, gehen Sie bitte wie folgt vor:



Verbinden Sie das **NANOCOLOR® Spektrometer** im ausgeschalteten Zustand mit einer freien USB Schnittstelle Ihres Computers. Schalten Sie das **NANOCOLOR® Spektrometer** ein.

Starten Sie die WINDOWS® Systemsteuerung über **Start/Einstellungen/Systemsteuerung**.

Legen Sie die mitgelieferte **NANOCOLOR® Spektrometer Software – DVD** in Ihr DVD-ROM Laufwerk ein.

Öffnen Sie die Systemsteuerung.

a) Windows® XP

Klicken Sie auf **Hardware** und dann auf **Weiter**. Wenn der Hardware-Assistent Sie nach einem Pfad für die Treiberdaten fragt, geben Sie Ihr CD-Laufwerk an.

b) Ab Windows® Vista

Öffnen Sie in der Systemsteuerung den Geräte manager. Erweitern Sie den Knoten „USB-Controller“. Doppel-Klicken Sie auf den Eintrag „USB Serial Converter“. Öffnen Sie den Karteireiter **Treiber**. Klicken Sie auf **Treiber aktualisieren** und geben Sie den Pfad zu der DVD an.

Wiederholen Sie diesen Vorgang für den Knoten „Anschlüsse (COM & LPT) bei dem Eintrag „USB Serial Port“.

1.4 Bedienungshinweis

Die **NANOCOLOR® Spektrometer** Software wurde unter dem Aspekt entwickelt, allen Anforderungen an die Regeln der „Good Laboratory Praxis“ (GLP) gerecht zu werden. Dies setzt eine eindeutige Rechtevergabe der Computer-Anwender voraus, die z. B. das unbeabsichtigte Löschen von Informationen verhindert. Daher sind einige in dieser Anleitung beschriebenen Funktionen **nur** ausführbar, wenn der Anwender über **Administrationsrechte** verfügt. Alle für normale Anwender gesperrte Funktionen sind in dieser Anleitung mit dem roten X-Symbol am rechten Rand des Textes gekennzeichnet. Verwechseln Sie dieses Symbol bitte nicht mit



dem Abbrechen-Schalter .



Wenn Funktionen dieser Software auf Ihrem PC scheinbar nicht funktionieren, wenden Sie sich bitte an Ihren System-Administrator.

2 GLP und FDA 21 CFR Part 11 Konformität

Die **NANOCOLOR® Spektrometer** Software stellt GLP und 21 CFR Part 11 Konformität über folgende Maßnahmen sicher:

- LOG-File

Alle Änderungen an Softwareeinstellungen und Löschungen werden unter Angabe des Datums, Uhrzeit und Anwenders protokolliert.

- RECHTE

Sicherheitsrelevante Änderungen und Löschungen sind nur dem Systemadministrator möglich

- DRUCKAUSGABE

Alle Ausdrücke werden mit Datum, Anwendernamen, Softwareversion, Geräte-Seriennummer und einer einmaligen ID versehen.

- ORIGINALDATEN

Alle originalen Daten werden in binär codierten, nicht-editierbaren Dateien mit Check-Summe gespeichert.

- SYSTEMDATEN

Alle Systemeinstellungen und die LOG-Datei sind verschlüsselt und mit einer Check-Summe versehen.

- ERKENNEN VON MANIPULATIONEN

Die Software erkennt selbsttätig, ob Messdaten oder Systemdaten manipuliert wurden (Check-Summe). Dabei stehen zwei unterschiedliche Sicherheitseinstellungen zur Verfügung: **NIEDRIG** (Warnmeldung bei Manipulation, Anwender kann Datei aber öffnen, soweit technisch möglich), **HOCH** (manipulierte Dateien können nicht geöffnet werden)

- AUSTAUSCHBARKEIT DER DATEN

NANOCOLOR® Test-Daten lassen sich im SDF oder XML Format ausgeben, Scandaten als netCDF/ANDI Datei speichern. Die Daten entsprechen der Norm **ASTM E 1947 -98 (2004)** und **ASTM E 1948 -98 (2004)**.

- SICHERE DATENÜBERTRAGUNG

Die Datenübertragung erfolgt über ein bidirektionales Protokoll.



Um 21 CFR Part 11 Konformität vollständig zu erreichen, muss die Software auf einem zertifizierten Rechner mit NTFS-Dateisystem installiert werden. Der Zugriff auf die Software muss über Windows-Berechtigungen geregelt werden.

Die Sicherheitseinstellung muss auf HOCH gesetzt werden.

Die Option GUIDs verwenden muss eingeschaltet sein.

3 Teil 1: **NANOCOLOR®** Photometer Funktionen

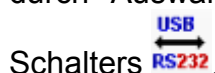
Der erste Teil des Handbuches beschreibt die Funktionen zum Speichern, Verwalten und Exportieren der Testdaten.

3.1 **NANOCOLOR®** Küvettenteste

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit den **NANOCOLOR®** Rundküvetten- und Rechteckküvetten-Testen.

3.1.1 Auslesen des Photometerspeichers

Um den Speicher Ihres Photometers auszulesen, schließen Sie das Gerät zunächst über die RS-232 oder eine USB-Schnittstelle an Ihren PC an und schalten es ein. Starten Sie nun die **NANOCOLOR® Spektrometer Software**. Abbildung 1 zeigt den Startbildschirm der Software. Verbinden Sie nun die Software mit dem Photometer durch Auswahl der Menüfunktion **System/Verbinden** oder durch klicken des



Schalters



Während der Verwendung dieser Software sind – mit Ausnahme der Online-Messung - die Bedienelemente des Photometers über das Photometer-Display nicht nutzbar. Dieser PC-Modus des Photometers wird über das Software Menü **System/Trennen**

oder durch anklicken des Schalters  oder durch Ausschalten des Photometers aufgehoben.

Das Photometer schaltet in den PC-Modus.



Wenn sich eine Küvette im Photometer befindet, bevor das Gerät mit dem Computer verbunden wurde, kann der PC-Modus nicht eingestellt werden. Entfernen Sie vor dem Computeranschluss eine ev. vorhandene Küvette aus dem Photometer!

Sollten Sie einmal das Kabel bei bestehender Verbindung abziehen und die Software beenden, muss das Photometer NICHT neu gestartet werden. Starten Sie einfach die Software neu und verbinden Sie sie mit dem Photometer.

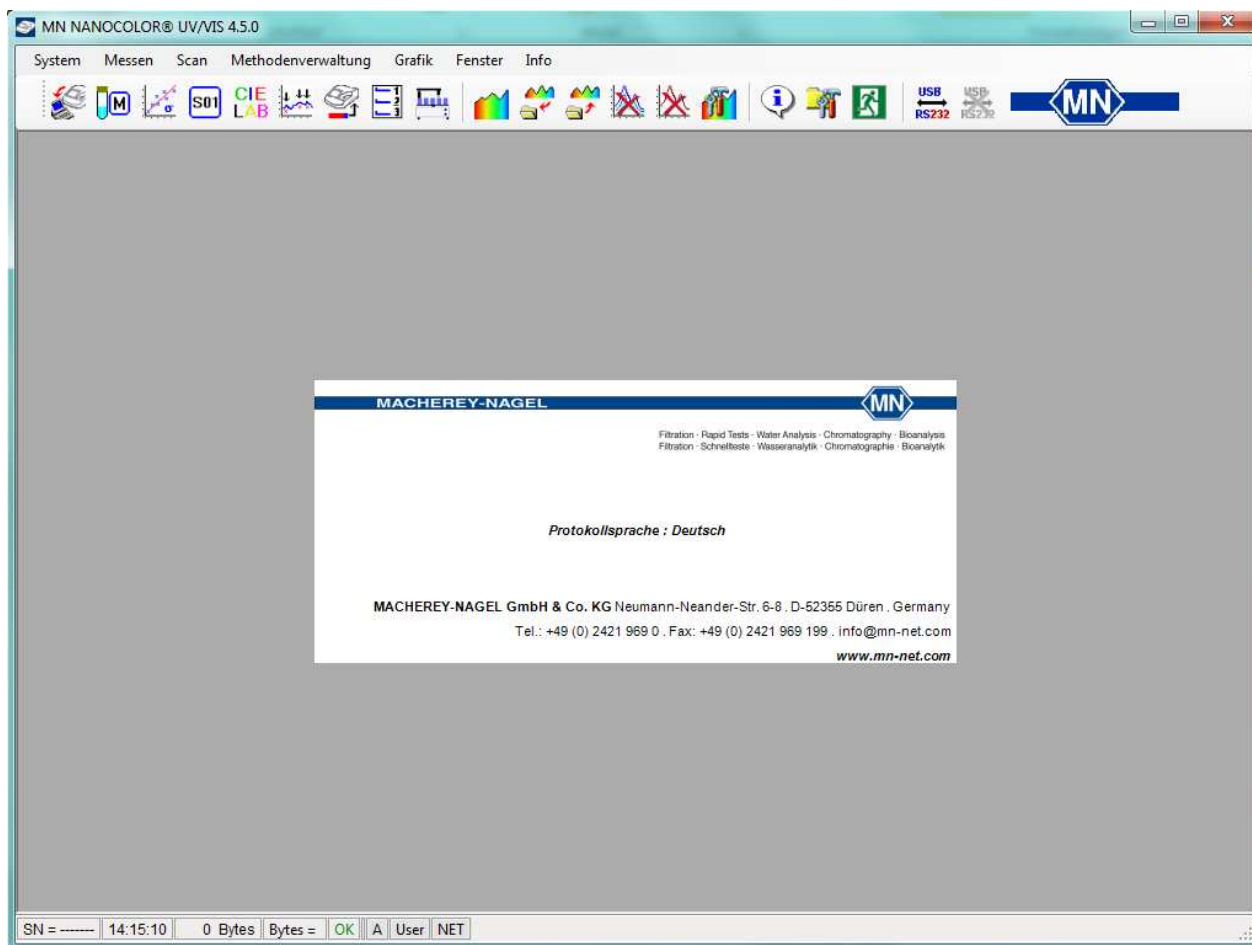


Abb. 1 : Startbildschirm

Klicken Sie nun auf den Menübefehl **Messen/Photometer Speicher lesen**. Abbildung 2 zeigt die nötige Menüauswahl.

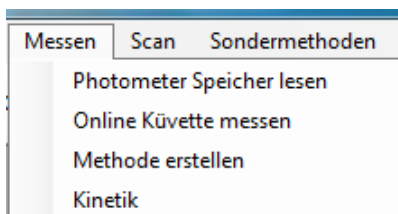


Abb. 2 : Menübefehl **Messen/Photometer Speicher lesen**

Alternativ dazu können Sie auch auf die erste Schaltfläche in der Icon-Leiste im Bereich **NANOCOLOR®**  klicken. Die Software öffnet das Datenfenster und füllt die Tabelle mit den Daten des Photometers. Je nach verwendeter Schnittstelle und Anzahl der Datensätze kann dieser Vorgang mehr als eine Minute dauern. Abbildung 3 zeigt das Datenfenster mit einigen Messungen.



NANOCOLOR® VIS - Messdaten - OFFLINE, Zeilen : 117

	Methode	Methodenname	Probenort	Datum	Zeit	Zaehler	Messwert	Einheit	Bemerkun
	0291	CSB1500	Oberhausen	11.07.2012	16:11	13	1178	mg/L O2	
	0291	CSB1500	Oberhausen	11.07.2012	16:11	12	1180	mg/L O2	
	0291	CSB1500	Oberhausen	11.07.2012	16:11	11	1028	mg/L O2	
	0291	CSB1500	Oberhausen	11.07.2012	16:11	10	926	mg/L O2	
	0291	CSB1500	Oberhausen	11.07.2012	16:11	9	934	mg/L O2	
	0291	CSB1500	Oberhausen	11.07.2012	16:11	8	896	mg/L O2	
	0291	CSB1500	Oberhausen	11.07.2012	16:11	7	1030	mg/L O2	
	0291	CSB1500	Oberhausen	11.07.2012	16:10	6	1032	mg/L O2	
	0291	CSB1500	Oberhausen	11.07.2012	16:10	5	1175	mg/L O2	
	0291	CSB1500	Oberhausen	11.07.2012	16:10	4	896	mg/L O2	
	0291	CSB1500	Oberhausen	11.07.2012	16:10	3	896	mg/L O2	
	0291	CSB1500	Oberhausen	11.07.2012	16:10	2	1032	mg/L O2	
	0291	CSB1500	Oberhausen	11.07.2012	16:10	1	1175	mg/L O2	
	0291	CSB1500	Koeln	11.07.2012	12:35	15	1114	mg/L O2	
	0291	CSB1500	Koeln	11.07.2012	12:34	14	1032	mg/L O2	
	0291	CSB1500	Koeln	11.07.2012	12:34	13	0	mg/L O2	<100 (~16
	0291	CSB1500	Koeln	11.07.2012	12:34	12	158	mg/L O2	
	0291	CSB1500	Koeln	11.07.2012	12:33	11	310	mg/L O2	
	0291	CSB1500	Koeln	11.07.2012	12:32	10	451	mg/L O2	

Schließen Exportieren nach Bericht Daten trennen nach Gerätespeicher

☒ nicht trennen
☐ nach Probeort
☐ nach Testnummer
☐ nach Datum

☐ nach Anwender
☐ umgekehrte Reihenfolge

Abb. 3 : Datenfenster mit Messdaten

Die angezeigte Tabelle dient nur zur Übersicht, Sie können hier keine Daten bearbeiten. Durch doppelklicken der Spaltentitel können Sie die Tabelle sortieren. Das Fenster bietet Ihnen die Möglichkeit, die Messdaten in drei verschiedenen Formaten zu speichern, um sie in anderen Softwareprodukten zu bearbeiten oder zu archivieren.

Einige der Zeilen in Abbildung 3 sind **rot**, **orange** bzw. **grün** gezeichnet.

Bei **rot** oder **grün** markierten Zeilen handelt es sich um Messungen, die im Photometer als IQK-Standardmessung markiert wurden, siehe Kapitel 3.15 IQK Karte 4, Seite 43. Bei einer **rot** markierten Zeile wurde der Standard nicht innerhalb des Vertrauensbereiches wiedergefunden, **grün** markierte Zeilen liegen innerhalb des Vertrauensbereich.

Bei **orange** markierten Zeilen handelt es sich um Messungen, bei denen das Spektrometer eine Trübung größer als die erlaubte maximale Trübung festgestellt hat.



Diese Funktion ist nur verfügbar wenn im Photometer die Einstellung „NTU check“ aktiviert ist (^{UV}/_{VIS} ab Version 4.1, VIS ab Version 2.01)

Die Messdaten können nun in verschiedene Formate exportiert werden. Es stehen die Formate Microsoft® EXCEL *.xls bzw. *.xlsx, XML, Text (ASCII, semikolon formatiert), OpenOffice® und LibreOffice® *.ods zur Verfügung.



Für das Format *.ods wird eine Installation von OpenOffice® bzw. LibreOffice® benötigt.

Für das Format *.xls wird eine Installation von Microsoft® Office ab Version 2003 benötigt (für *.xlsx ab Version 2010).

Wenn die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** keine gültige Office-Installation vorfindet, stellt sie das Format Microsoft Office XML-Spreadsheet (*.xml) zur Verfügung. Dieses Format kann von allen hier genannten Office-Programmen gelesen und geschrieben werden.

Am unteren rechten Rand finden Sie fünf Schaltflächen, die den entsprechenden Exportvorgang auslösen, siehe Abbildung 4 (siehe auch Kapitel 3.1.1.1, Seite 12).

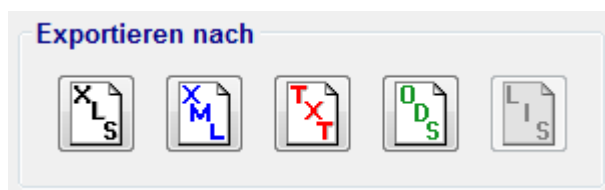


Abb. 4 : Schaltflächen für den Datenexport

Mit den Optionen im Rahmen **Daten trennen nach** können Sie die Daten in einzelne Tabellen aufteilen. Sie können die Messdaten **nach Probenort**, **nach Testnummer**, **nach Anwender** und **nach Datum** in einzelne Tabellen aufteilen.

Dabei können Sie bis zu 3 Optionen miteinander kombinieren. Bei Auswahl einer 4. Option werden alle Optionen deselektiert und der Schalter **nicht trennen** aktiviert.



Diese Optionen haben beim Export in eine Text-Datei keine Funktion.



3.1.1.1 Export nach MICROSOFT EXCEL, Schalter

Dieser Schalter exportiert die Daten in eine MS EXCEL Tabelle. Um *.xls/*.xlsx Dateien zu erzeugen, müssen Sie Microsoft® EXCEL 2003/2010 oder höher auf Ihrem Rechner installiert haben. Ist kein gültiges Microsoft® Office Produkt vorhanden, wird automatisch das Format XML-Spreadsheet erzeugt. Die Software öffnet ein Dateiauswahlfenster (Abbildung 5). Wählen Sie einen geeigneten Dateipfad und geben Sie in das Feld **Dateiname:** einen gültigen Namen für Ihre EXCEL Datei an und klicken Sie dann auf den Schalter **Speichern**.

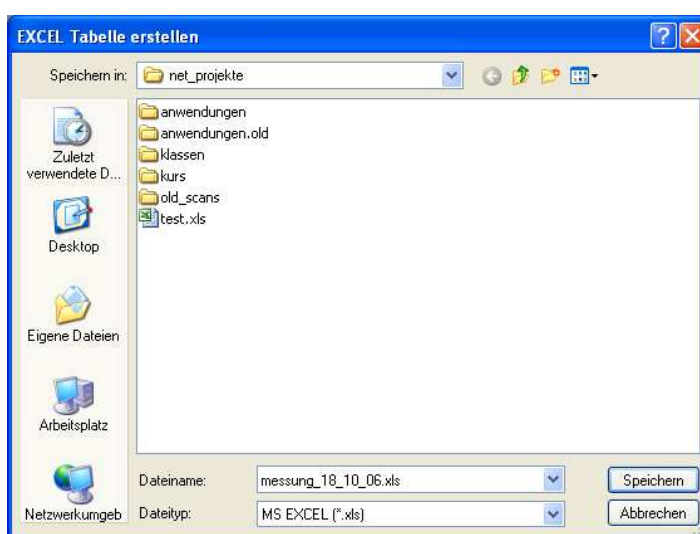


Abb. 5 : Dateiauswahlfenster „EXCEL Tabelle erstellen“

Wenn eine gültige EXCEL Version installiert ist, erstellt die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** eine neue Microsoft® EXCEL Tabelle mit den Messwerten. Die MS EXCEL Tabelle wird automatisch unter dem gewählten Dateinamen gespeichert. Ob MS EXCEL automatisch angezeigt wird, hängt von der Einstellung **MS EXCEL automatisch starten** in den Einstellungen ab, siehe Kapitel 7.3.1 Allgemeine Einstellungen, Seite 105. Abbildung 6 zeigt die entsprechende Ansicht der MS EXCEL Tabelle.

Microsoft Excel - messung_18_10_06.xls												
Datei Bearbeiten Ansicht Einfügen Format Extras Daten Fenster ?												
Frage hier eingeben												
G19 0,3 Arial 10 F U												
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	Methodennr	Methodennr	Probenort	Datum	Zeit	Zähler	Messwert	Einheit	Bemerkung	Verdünnung	Anwender	Seriennummer
2	941	TOC 70	Koeln	15.09.2006	12:46	1	mg/l C		<2	0	Anwender	UVVISD00031
3	261	CSB 160	Koeln	15.09.2006	09:38	2	mg/l O2		>160	0	Anwender	UVVISD00031
4	261	CSB 160	Koeln	14.09.2006	16:40	3	mg/l O2		>160	0	Anwender	UVVISD00031
5	261	CSB 160	Koeln	14.09.2006	16:36	2	mg/l O2		>160	0	Anwender	UVVISD00031
6	681	NITRIT 2	Koeln	14.09.2006	16:29	2	0,5 mg/l NO2-N			0	Anwender	UVVISD00031
7	681	NITRIT 2	Koeln	14.09.2006	16:28	1	0,7 mg/l NO2-N			0	Anwender	UVVISD00031
8	43	AMMONIUM	Koeln	14.09.2006	16:26	4	0,6 mg/l NH3			0	Anwender	UVVISD00031
9	43	AMMONIUM	Koeln	14.09.2006	16:00	3	1 mg/l NH3			0	Anwender	UVVISD00031
10	43	AMMONIUM	Koeln	14.09.2006	15:46	2	1,2 mg/l NH3			0	Anwender	UVVISD00031
11	43	AMMONIUM	Koeln	14.09.2006	15:46	1	1,3 mg/l NH3			0	Anwender	UVVISD00031
12	611	NICKEL 7	Koeln	14.09.2006	15:25	1	1,1 mg/l Ni			0	Anwender	UVVISD00031
13	941	TOC 70	Koeln	14.09.2006	15:24	1	mg/l C		<2	0	Anwender	UVVISD00031
14	291	CSB 1500	Koeln	14.09.2006	15:24	2	179 mg/l O2			0	Anwender	UVVISD00031
15	291	CSB 1500	Koeln	14.09.2006	15:23	1	353 mg/l O2			0	Anwender	UVVISD00031
16	43	AMMONIUM	Koeln	08.09.2006	10:08	2	0,2 mg/l NH3			0	Anwender	UVVISD00031
17	43	AMMONIUM	Koeln	08.09.2006	10:07	1	0,1 mg/l NH3			0	Anwender	UVVISD00031
18	43	AMMONIUM	Koeln	08.09.2006	10:07	1	0,1 mg/l NH3			0	Anwender	UVVISD00031
19	43	AMMONIUM	Koeln	08.09.2006	10:07	1	0,3 mg/l NH3			0	Anwender	UVVISD00031
20	2011	Einzel	Aachen	08.09.2006	09:52	2	0,2 mg/l NH3			0	Anwender	UVVISD00031
21	762	gesamt-P 1	Aachen	08.09.2006	09:44	2	2 mg/l PO4			0	Anwender	UVVISD00031
22	762	gesamt-P 1	Aachen	08.09.2006	09:43	1	2 mg/l PO4			0	Anwender	UVVISD00031
23	762	gesamt-P 1	Koeln	08.09.2006	09:42	1	3 mg/l PO4			0	Anwender	UVVISD00031

Abb. 6 : Messdaten in MS EXCEL

Haben Sie eine der Optionen aus der Auswahl **Daten trennen** gewählt, wird für jeden Probenort bzw. NANOCOLOR®-Testnummer bzw. Anwender bzw. Tagesdatum eine eigene Tabelle erzeugt. Die Tabelle wird automatisch mit dem Auswahlkriterium beschriftet. Es können bis zu 3 Auswahloptionen miteinander kombiniert werden.

Ist MS EXCEL bereits geöffnet oder die gewählte Datei enthält bereits Daten, werden die neuen Daten nach einer Leerzeile angehängen.



Liegen die Messwerte außerhalb des Messbereichs (</> Symbol), werden die Werte in der Spalte *Bemerkung* zusammen mit einem Schätzwert angezeigt.

Benutzernamen, Probenorte und Verdünnungen werden ausgegeben, wenn sie im Photometer während der Messung angegeben wurden. Wird kein Benutzername angegeben, wird der Windows-Anmeldename ausgegeben.



Sobald die Daten erfolgreich gespeichert wurden, wird der Schalter **Gerätespeicher löschen** am unteren rechten Rand des Datenfensters aktiviert (Abbildung 7).

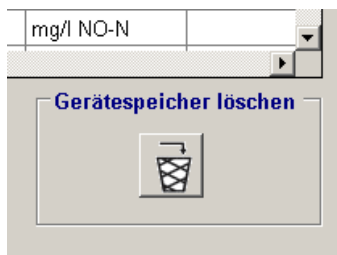


Abb. 7 : Schaltfläche Photometerspeicher löschen

Mit diesem Schalter können Sie den Speicher Ihres Photometers löschen und es für zukünftige Messungen vorbereiten. Es wird empfohlen, den Photometerspeicher zu löschen, wenn alle Daten sicher archiviert sind.



Der Löschvorgang kann nicht rückgängig gemacht werden! Löschen Sie die Daten im Photometer nur, wenn Sie Ihre Daten erfolgreich gespeichert / exportiert haben.

Der Schalter mit dem roten X am linken unteren Rand schließt das Datenfenster.



3.1.1.2 Export in das Datenbankformat XML, Schalter

Mit dem zweiten Exportschalter erstellen Sie eine XML-Datenbank. Die Software öffnet ein Dateiauswahlfenster (Abbildung 5). Wählen Sie einen geeigneten Dateipfad und geben Sie in das Feld Dateiname: einen gültigen Namen für Ihre XML Datenbank an und klicken Sie dann auf den Schalter Speichern.

Die XML Datenbank kann von allen Datenbankprogrammen, unabhängig vom verwendeten Betriebssystem gelesen werden. Eine Beschreibung der XML-Struktur finden Sie im Anhang unter **Kapitel 8.2**. Bei Fragen zum Import in bestehende Datenbanksysteme fragen Sie bitte Ihren Datenbankadministrator.

Haben Sie eine der Optionen aus der Auswahl Daten trennen gewählt, wird für jede Auswahl eine eigene Tabelle in der XML-Datei erzeugt. Bei einem Import in ein Datenbanksystem werden die Messwerte automatisch den verschiedenen Tabellen zugeordnet.



3.1.1.3 Export in das TEXT-Format, Schalter

Mit dem dritten Exportschalter erstellen Sie eine Semikolon formatierte Textdatei. Die Software öffnet ein Dateiauswahlfenster (Abbildung 5). Wählen Sie einen geeigneten Dateipfad und geben Sie in das Feld Dateiname: einen gültigen Namen für Ihre TEXT Datei an und klicken Sie dann auf den Schalter Speichern. Informationen zum verwendeten Dateiformat können Sie dem Anhang, **Kapitel 8.1**, entnehmen.



3.1.1.4 Export nach OpenOffice-SCALC, Schalter

Um diese Funktion nutzen zu können, müssen Sie OpenOffice, Version 3.4 bzw. LibreOffice, Version 3.4.4 oder höher auf Ihrem Rechner installiert haben. Dieser Schalter exportiert die Daten in eine SCALC Tabelle. Die Software öffnet ein Dateiauswahlfenster (Abbildung 5). Wählen Sie einen geeigneten Dateipfad und



geben Sie in das Feld **Dateiname:** einen gültigen Namen für Ihre SCALC Datei an und klicken Sie dann auf den Schalter **Speichern**.

Die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** speichert die Messdaten in einer SCALC-Tabelle. Ob das Programm SCALC automatisch gestartet wird, hängt von der Einstellung **OpenOffice automatisch starten** bzw.

LibreOffice automatisch starten ab. Siehe Kapitel 7.3.1.

Sollten Sie sowohl OpenOffice als auch LibreOffice installiert haben, verwendet die NANOCOLOR® Spektrometer Software LibreOffice.

Haben Sie eine der Optionen aus der Auswahl **Daten trennen** gewählt, wird für jeden Probenort bzw. **NANOCOLOR®**-Testnummer bzw. Anwender bzw. Tagesdatum eine eigene Tabelle erzeugt. Die Tabelle wird automatisch mit dem Auswahlkriterium beschriftet. Es können bis zu 3 Auswahloptionen miteinander Kombiniert werden.

Ist OpenOffice SCALC bereits geöffnet oder die gewählte Datei enthält bereits Daten, werden die neuen Daten nach einer Leerzeile angehängen.

3.1.1.5 Export an ein Laborinformationssystem, Schalter



Dieser Schalter exportiert die Messdaten an ein angeschlossenes Laborinformationssystem. Der Schalter ist nur aktiv, wenn das Senden der Daten im Laborinformationssystem-Konfigurator eingeschaltet ist. Bitte lesen Sie Kapitel 7.3.6.

3.1.2 Messungen online durchführen

Um Messungen online durchführen zu können schließen Sie das Photometer zunächst über die RS-232 oder eine USB-Schnittstelle an Ihren PC an und schalten es ein. Starten Sie die **NANOCOLOR® Spektrometer Software**.

Klicken Sie auf den Menübefehl **Messen/Online Küvette messen**. Abbildung 2 zeigt die korrekte Menüauswahl. Sollte sich das Photometer im PC-Modus befinden, wird das Photometer durch die Menüauswahl in den normalen Arbeitsmodus gesetzt.

Alternativ dazu können Sie auch auf die zweite Schaltfläche in der Icon-Leiste klicken. Die Software öffnet das Datenfenster mit einer leeren Tabelle und wartet auf Daten.



Führen Sie Ihre Messungen durch. Die Messdaten werden beim Ziehen der Küvette an den PC übertragen. Vor dem Ziehen der Küvette haben Sie die Möglichkeit, auf dem Photometer-Display Ihre Einstellungen für den Probenort, die Verdünnung und den Anwender vorzunehmen. Abbildung 8 zeigt das Fenster der Online-Messung.

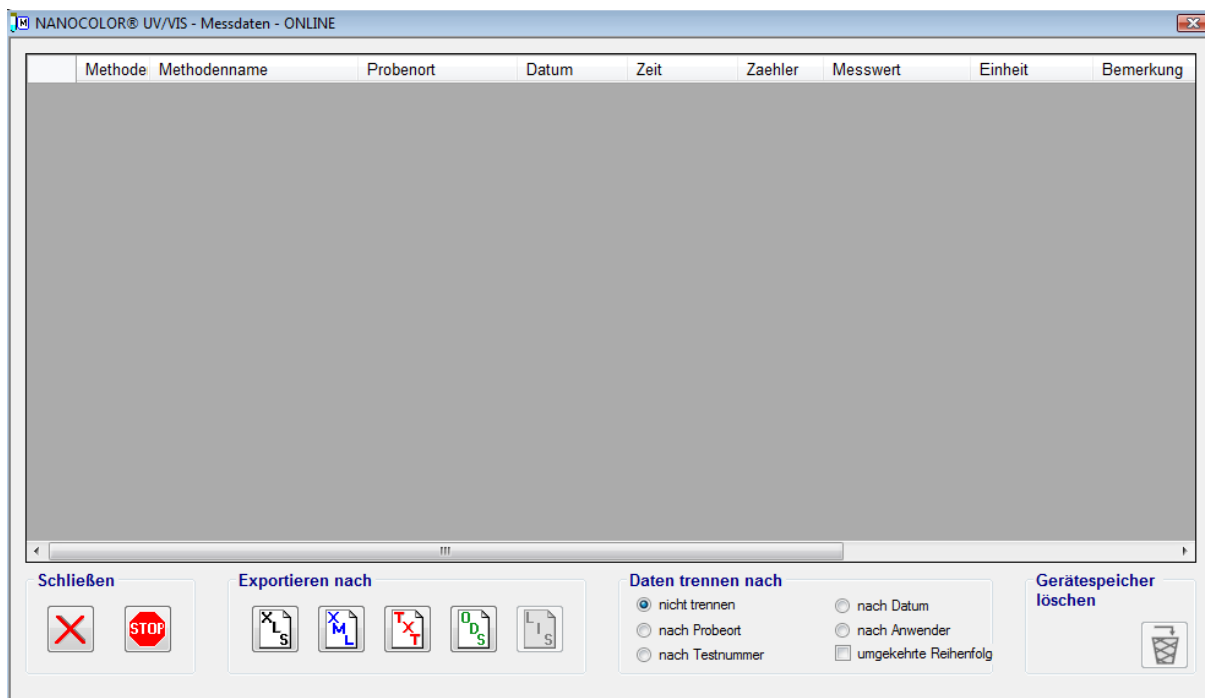


Abb. 8 : Online Messung, warten auf Dateneingang

Im Online-Modus erscheint am unteren linken Rand des Datenfensters die Schaltfläche . Damit können Sie den Online-Modus beenden, ohne das Datenfenster zu schließen.

Am unteren Rand des Datenfensters finden Sie die Schalter für den Datenexport. Diese Funktionen werden Kapitel 3.1.1 erläutert.

3.2 Sondermethoden kalibrieren

Die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** ermöglicht Ihnen das Erstellen Ihrer eigenen Sondermethoden. Sie benötigen lediglich eine Reihe Küvetten mit eingestellten Probenkonzentrationen. Nach dem Messen der Küvetten werden automatisch alle relevanten statistischen Parameter bestimmt und angezeigt. Auf Wunsch können Sie ein Messprotokoll drucken und die Methode per Mausklick im Photometer ablegen.

3.2.1 Methodendaten messen

Um eine Sondermethode zu erstellen, klicken Sie auf die Menüfunktion **Messen/Methode erstellen**. Das Photometer befindet sich im PC-Modus. Abbildung

2 zeigt die nötige Menüauswahl. Alternativ klicken Sie auf den Schalter . Es öffnet sich das Methodenfenster, siehe Abbildung 9.

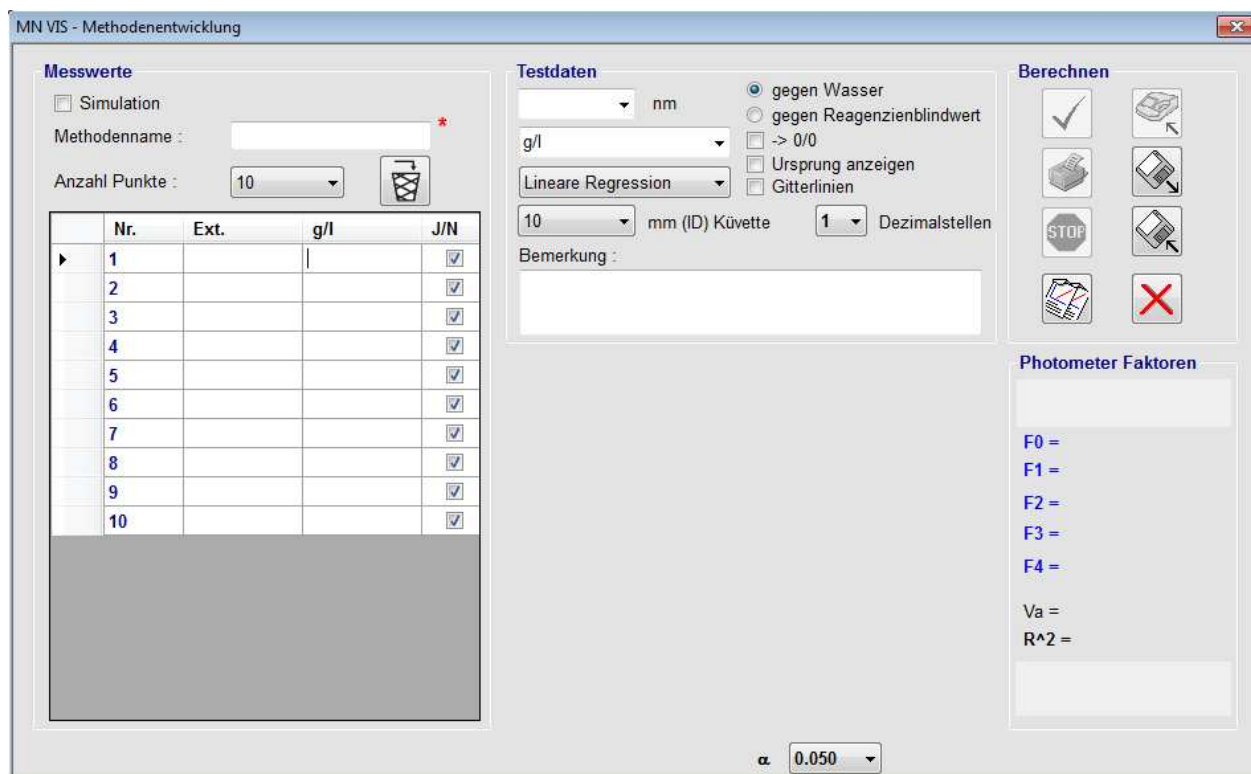


Abb. 9 : Fenster Methodenentwicklung

Der Optionsschalter **Simulation** muss ausgeschaltet sein. Stellen Sie in der Liste **Anzahl Punkte** die Anzahl Ihrer Messpunkte ein. Wir empfehlen analog DIN 38 402 (Teil 51) mindestens 10 Konzentrationen zu messen. Geben Sie in das Feld **Methodenname** einen Namen für die neue Methode an.

Stellen Sie im Rahmen **Testdaten**, siehe Abbildung 10, die benötigte Wellenlänge ein. Sollten Sie die benötigte Wellenlänge nicht in der Auswahlliste finden, können Sie den Wert dort direkt eingeben (kleinstmöglicher Wert 190 nm ($^{UV}_{VIS}$) bzw. 340 nm (VIS), größtmöglicher Wert 1100 nm, keine Nachkommastellen).

In der zweiten Liste stellen Sie die von Ihnen verwendete Konzentrationseinheit ein. Sollte die von Ihnen benötigte Einheit nicht angegeben werden, können Sie in das Textfeld der Liste Ihre Einheit eingeben. Bitte lesen Sie auch Kapitel 8.8 des Anhangs. In der dritten Liste wird die Art der zu berechnenden Regression gewählt. Es stehen die Regressionen „linear“, „quadratisch“, „kubisch“ und „4. Grades“ zur Verfügung.

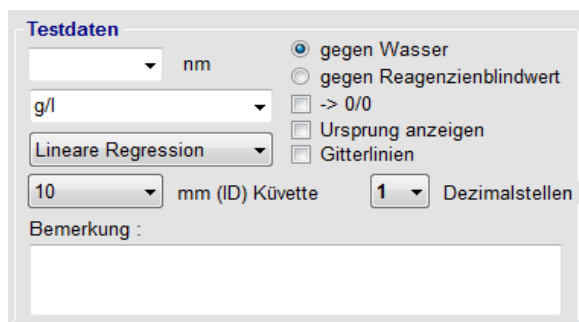


Abb. 10: Rahmen Testdaten

In der vierten Liste müssen Sie den Küvetten-Typ angeben, der von Ihrer Methode verwendet werden soll. Setzen Sie später eine andere Küvette ein, als hier angegeben, erhalten Sie eine Fehlermeldung von der **NANOCOLOR® Spektrometer Software** bzw. vom Photometer bei Messungen, die mit dem Photometer ohne Software durchgeführt werden.

In der rechten Hälfte des Rahmens müssen Sie angeben, ob Ihre Methode gegen Wasser oder gegen einen Reagenzienblindwert gemessen wird.



Wenn Sie Extinktionen messen, verlangt das Photometer eine NULL-Lösung. Stellen Sie die Art der von Ihnen verwendeten NULL-Lösung über die Optionsschalter **gegen Wasser** und **gegen Blindwert** ein. Ist die Option **gegen Blindwert** gewählt, geht das Programm davon aus, dass alle Regressionskurven durch Null laufen müssen. Soll die Funktion auch bei einer Messung gegen Wasser durch NULL gezwungen werden, aktivieren Sie die Funktion **→ 0/0**.

Klicken Sie nun in das erste (obere) Feld der Spalte **Konz.** und geben Sie die eingestellte Konzentration der ersten Küvette ein, siehe Abbildung 11.

	Nr.	Ext.	Konz.	J/N
	1		12,5	☒
	2			☒
	3			☒
	4			☒
	5			☒
	6			☒
	7			☒
	8			☒
	9			☒
	10			☒

Abb. 11 : Angabe der Konzentration Küvette 1

Klicken Sie nun in das zweite Feld der Spalte **Konz.** oder drücken Sie die Taste **[↓]** oder **[ENTER]** auf Ihrer PC-Tastatur und geben Sie die eingestellte Konzentration der zweiten Küvette ein, siehe Abbildung 12.

	Nr.	Ext.	Konz.	J/N
	1		12,5	☒
	2		15	☒
	3			☒
	4			☒
	5			☒
	6			☒
	7			☒
	8			☒
	9			☒
	10			☒

Abb. 12 : Angabe der Konzentration Küvette 2

Klicken Sie nun in das dritte Feld der Spalte **Konz.** oder drücken Sie die Taste **[↓]** oder **[ENTER]** auf Ihrer PC-Tastatur. Die weiteren Felder werden automatisch mit äquidistanten Werten gefüllt, wie in Abbildung 13 gezeigt.

	Nr.	Ext.	Konz.	J/N
	1		12,5	☒
	2		15	☒
	3		17,5	☒
	4		20	☒
	5		22,5	☒
	6		25	☒
	7		27,5	☒
	8		30	☒
	9		32,5	☒
	10		35	☒

Abb. 13: Automatisch gefüllte Spalte

Sollten Sie mit nicht-äquidistanten Konzentrationsschritten arbeiten, überschreiben Sie einfach den Wert im dritten Feld, die weiteren Werte werden dann automatisch

gelöscht. Mit dem Schalter  können Sie die ganze Tabelle löschen.

Klicken Sie nun im Rahmen **Berechnen** auf den Schalter . Das Photometer erwartet nun eine NULL-Lösung, siehe Abbildung 14.

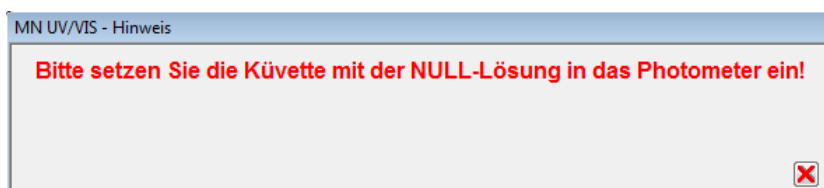


Abb. 14: Meldung NULL-Küvette einsetzen

Stecken Sie die Küvette mit der NULL-Lösung in das Photometer. Wenn sich 3 Minuten nach dem Anzeigen von Abbildung 14 noch keine Küvette im Photometer befindet, wird die Messung abgebrochen.

Nach der NULL-Messung fordert das Photometer Sie auf, die NULL-Küvette zu entnehmen, siehe Abbildung 15.



Abb. 15: Meldung NULL-Küvette entnehmen

Ziehen Sie die NULL-Küvette aus dem Photometer. Wenn sich 3 Minuten nach Anzeige von Abbildung 15 noch eine Küvette im Photometer befindet, wird die Messung abgebrochen.

Das Photometer fordert Sie nun auf, die erste Mess-Küvette einzusetzen, siehe Abbildung 16.

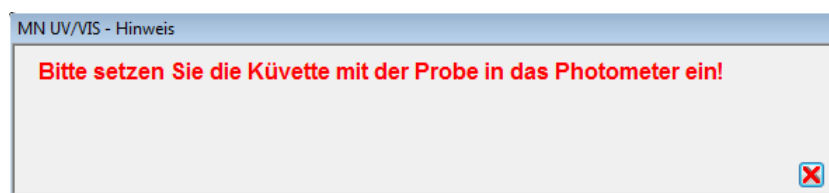


Abb. 16: Meldung Probe Küvette 1 einsetzen

Stecken Sie die Küvette mit der **ersten** Probe in das Photometer. Wenn sich 3 Minuten nach Anzeige von Abbildung 16 noch keine Küvette im Photometer befindet, wird die Messung abgebrochen. Lassen Sie dem Photometer ein bis zwei Sekunden Zeit, um die Küvette zu messen. **Warten Sie**, bis die gemessene Extinktion in der Tabelle angezeigt wird, siehe Abbildung 17.

	Nr.	Ext.	Konz.	J/N
▶	1	0,059	12,5	☒
	2		15	☒
	3		17,5	☒
	4		20	☒
	5		22,5	☒
	6		25	☒
	7		27,5	☒
	8		30	☒
	9		32,5	☒
	10		35	☒

Abb. 17: Übernahme des ersten Messwertes

Setzen Sie nun nacheinander alle Küvetten in der richtigen Reihenfolge in das Photometer ein. Nachdem Sie die letzte Küvette aus dem Photometer gezogen haben, werden alle statistischen Parameter berechnet und wie Abbildung 18 zeigt graphisch dargestellt.

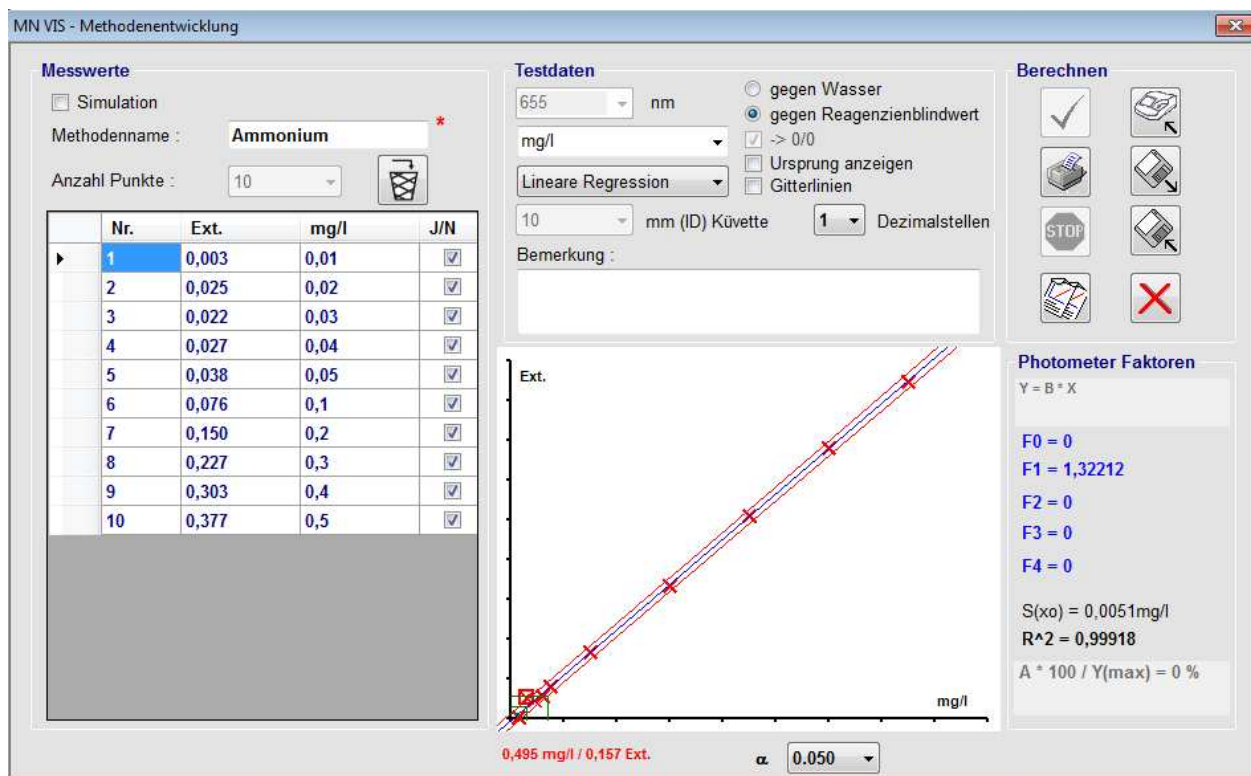


Abb. 18: Photometerfaktoren und graphische Darstellung

Bei linearen und quadratischen Funktionen wird Ihnen der Vertrauensbereich der statistischen Berechnung als rote Hyperbeln angezeigt. Zusätzlich werden Ihnen die Nachweisgrenze, die Erfassungsgrenze und die Bestimmungsgrenze als grüne Markierungen angezeigt. Die Werte werden mit dem Messprotokoll ausgedruckt. Statistische Ausreißer werden als rote Quadrate (links unten in der Grafik) angezeigt.

Bitte lesen Sie das Kapitel 8.9, Seite 105, im Anhang zum Thema „Ausreißereliminierung und Mehrfachmessung“.

3.2.2 Regressionstyp ändern und Protokoll drucken

Über den Schalter  können Sie ein Messprotokoll Ihrer Kalibrierung ausdrucken. Wenn Sie die Messung zwischendurch abbrechen möchten, klicken Sie

auf den Schalter . Sollten Sie anhand der Grafik feststellen, dass Sie eine falsche Regression gewählt haben, können Sie einfach aus der Liste eine andere

Regressionsart wählen. Die Parameter werden automatisch sofort umgerechnet, wie Abbildung 19 zeigt.

Sie können die Messpunkte der Kalibrierung auch in einer Datei speichern, z. B. wenn ein Ausdruck gerade nicht möglich ist. Klicken Sie dafür einfach auf den



Schalter und geben Sie in dem Auswahlfenster einen geeigneten Dateinamen an. Um eine gespeicherte Messung wieder zu laden, klicken Sie auf den Schalter

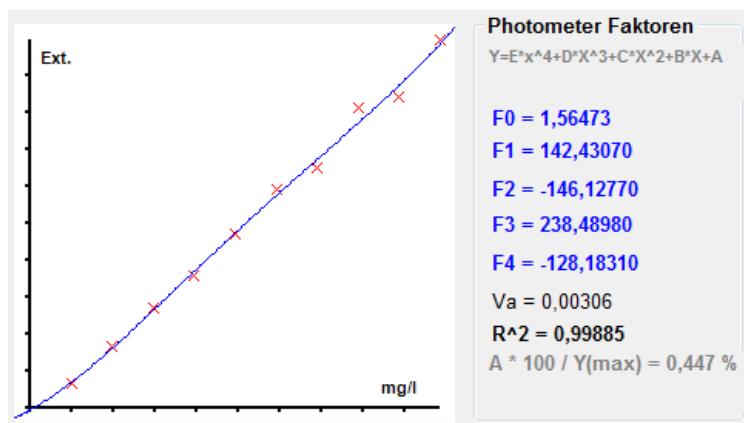


Abb. 19: Umschaltung auf kubische Regression



Bei den Faktoren F0 bis F4 handelt es sich um die Photometer-Faktoren, nicht um die Parameter der Ausgleichsfunktion! Die Parameter A0 bis A4 der Ausgleichsfunktion finden sie im Ausdruck des Messprotokolls.

3.2.3 Sondermethode im Photometer speichern

Wenn Sie die berechnete Methode in Ihrem Photometer speichern möchten, klicken



Sie einfach auf den Schalter. Die Software öffnet das „Methode speichern“ Fenster, welches Sie in Abbildung 20 sehen. Dort müssen Sie einige Parameter festlegen, die das Photometer zur Berechnung und Messung benötigt.

Über den Menübefehl **Grafik/In Zwischenablage kopieren** lässt sich die Grafik bei Bedarf einfach in die Windows-Zwischenablage kopieren und in anderen Anwendungen nutzen.

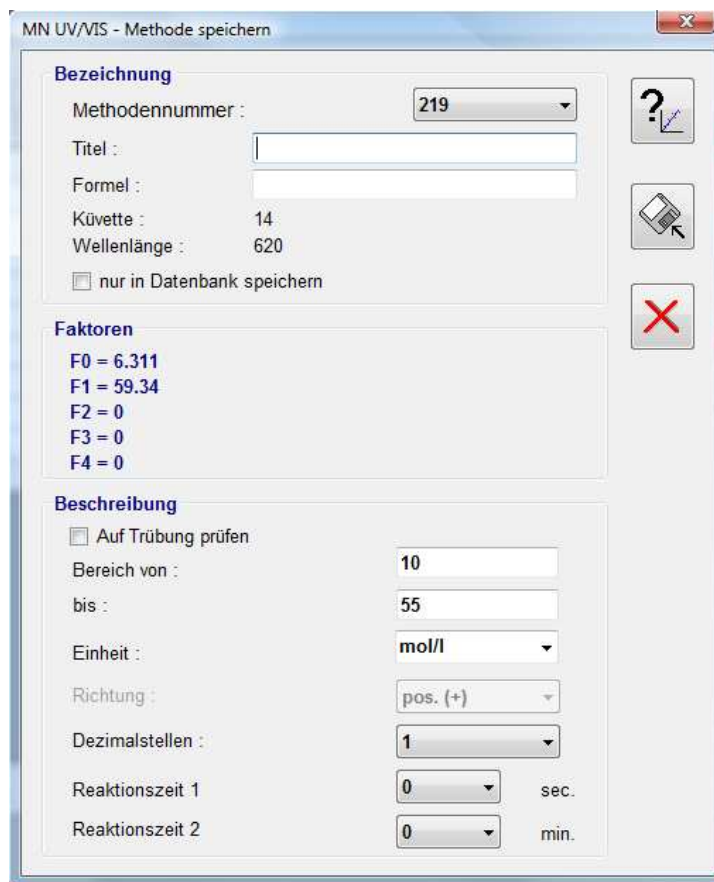


Abb. 20: Fenster „Methode speichern“

Wählen Sie aus der Liste **Methodennummer** die Nummer aus, unter der Sie die Sondermethode im **NANOCOLOR[®] UV/VIS** aufrufen möchten. Das Photometer kann 100 Sondermethoden speichern. Dafür sind die Methodennummern 200 bis 299 reserviert.



Lesen Sie bitte auch das Kapitel Sondermethodenverwaltung im zweiten Teil des Handbuches, Kapitel 5!

Geben Sie einen Namen oder Titel in das Feld **Titel** ein. Dafür stehen Ihnen 12 Zeichen zur Verfügung. Dieser Titel wird im Photometer angezeigt.

In das Feld **Formel** können Sie eine nähere Beschreibung des gemessenen Parameters angeben, z.B. NH₄ oder NH₄-N usw. Dafür stehen 10 Zeichen zur Verfügung. Soll Ihre neue Methode nicht im Photometer, sondern nur in der PC-Datenbank gespeichert werden, dann aktivieren Sie den Schalter **nur in Datenbank speichern**.



In die Felder **Bereich von** und **bis** können Sie den Messbereich Ihres Testes angeben, z.B. von 10 bis 150. Die Felder werden automatisch mit dem ersten und letzten Wert der Messtabelle aus Seite 20 gefüllt. Geben Sie hier **keine** Einheit an. Das Feld **Einheit** wird mit dem Wert gesetzt, den Sie im Methodenfenster angegeben haben. Sie können aber bis zu 10 beliebige Zeichen angeben.

Der Schalter **Richtung** hat in dieser Version keine Bedeutung mehr.

Wählen Sie die Anzahl an Dezimalstellen, die das Photometer darstellen soll, in der Liste **Dezimalstellen**. Sie können hier Werte zwischen 0 und 3 einstellen.

Benötigt Ihre Sondermethode eine Reaktionszeit, geben Sie die Zeitspanne in den Listen **Reaktionszeit 1** in Sekunden (0 bis 59) und **Reaktionszeit 2** in Minuten an. Benötigen Sie keine Reaktionszeit, geben Sie bitte eine Null (0) ein.



Bitte lesen Sie die Bedienungsanleitung Ihres Photometers, um nähere Information über die Methodenparameter zu erfahren.

Ist die Methodennummer bereits vergeben, lässt sich die Methode nicht speichern!



Mit dem Schalter  können Sie prüfen, ob die Methodennummer, die Sie der Sondermethode zuweisen möchten, bereits im Photometer verwendet wird. Wenn Sie auf den Schalter klicken, wird bei freier Methodennummer der Text des Feldes **Methodennummer** in grüner Farbe dargestellt, siehe Abbildung 21. Ist die Methodennummer bereits vergeben, wird der Text des Feldes **Methodennummer** rot eingefärbt.

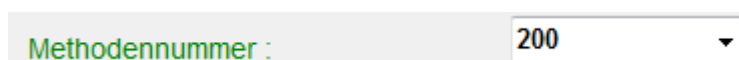


Abb. 21: Methodennummer 200 ist noch frei

Über den Menübefehl **Grafik/In Zwischenablage kopieren** lässt sich die Grafik einfach in die Windows-Zwischenablage kopieren und in anderen Anwendungen nutzen.

3.2.4 Simulationsrechnung

Die unter 3.2.1. vorgestellte Methode erlaubt nur, Messdaten aus dem Photometer für die Berechnung einer Sondermethode zu verwenden. Die im linken Bereich des Fensters angezeigte Tabelle ist schreibgeschützt, Daten können nicht manuell eingegeben werden.

Um eine Berechnung zu simulieren oder vorhandene Messwerte für eine Berechnung zu verwenden, schalten Sie die Option **Simulation** ein.

Die Tabelle kann nun frei beschrieben werden. Die Berechnung wird automatisch durchgeführt, sobald die Maus den Tabellenbereich verlässt.



Aus dem Simulationsmodus kann keine Methode in das Photometer übertragen werden.

3.3 Kinetik

Um eine Kinetik bei fester Wellenlänge zu erstellen, wählen Sie die Menüfunktion **Messen/Kinetik**. Das Photometer befindet sich im PC-Modus. Abbildung 22 zeigt das Fenster, in dem Sie die Grunddaten der Kinetik festlegen.

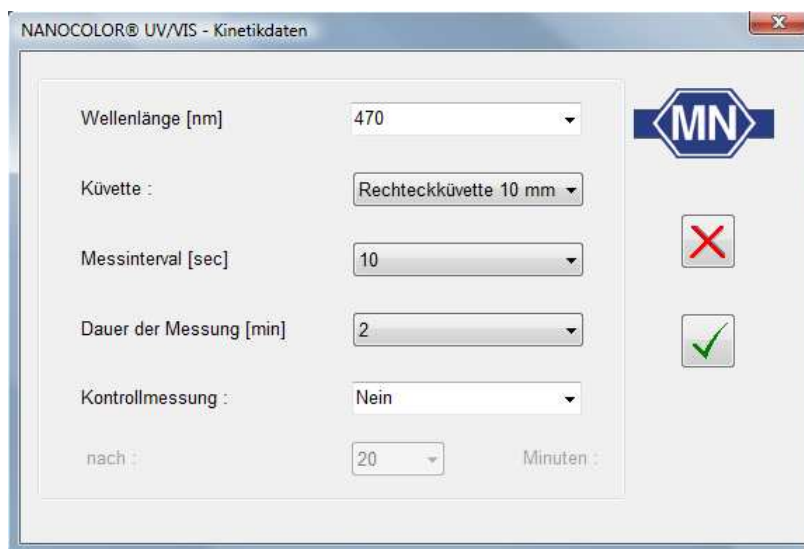


Abb. 22 : Kinetik Grundeinstellungen

Stellen Sie in der Liste **Wellenlänge [nm]** die benötigte Wellenlänge ein. Sollte der von Ihnen benötigte Wert nicht in der Liste enthalten sein, können Sie ihn direkt eintippen. Aus der nächsten Liste wählen Sie die benötigte Küvettengröße aus. In der Liste **Messintervall [sec]** legen Sie fest, nach wie vielen Sekunden eine neue Messung ausgelöst werden soll. Die Liste **Dauer der Messung [min]** gibt an, wie viele Minuten lang die Kinetik gemessen werden soll. In obigem Beispiel werden also zwei Minuten lang alle 10 Sekunden eine Messung ausgelöst. Damit werden 12+1 Messpunkte gespeichert. Klicken Sie auf den Schalter mit dem roten „X“, um die Aktion abzubrechen, klicken Sie auf den Schalter mit dem grünen Häkchen, um die Kinetikmessung zu starten.

Wenn die Liste **Kontrollmessung** auf „Ja“ geschaltet ist, führt die Software eine abschließende Messung nach der letzten Kinetikmessung durch. Die Wartezeit in Minuten, nach der die Kontrollmessung durchgeführt wird, kann in der Liste **nach** eingestellt werden.

Die Software öffnet nun die Kinetik-Fortschrittsanzeige wie in Abbildung 23 gezeigt.

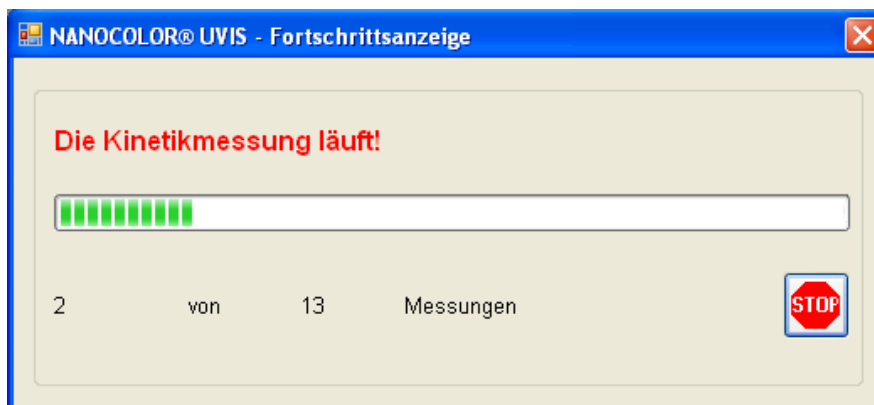


Abb. 23 : Kinetik Fortschrittsanzeige

Nach der letzten Messung öffnet die Software das Kinetik-Fenster. Eine Beschreibung der Kinetik-Funktionen finden Sie in Kapitel **4.3.1.8**.

3.4 Bioanalytik Funktionen



Eine alternative automatisierte Methode für mehrere Proben finden Sie im Anhang in Kapitel 8.10.

Die Bioanalytik Funktionen vereinfachen die Bestimmung von RNA-, DNA- und Proteinkonzentrationen. Klicken Sie auf den Menübefehl **Messen/Bioanalytik**. Das Photometer befindet sich im PC-Modus. Die Methode bestimmt die Konzentration nach der Formel „C = Extinktion x Faktor“. Gebräuchliche Faktoren sind vordefiniert und werden in Abhängigkeit der Einstellung der Liste **Probe** im Feld **Faktor** angezeigt, können aber durch eigene Faktoren ersetzt werden (siehe Abbildung 24).

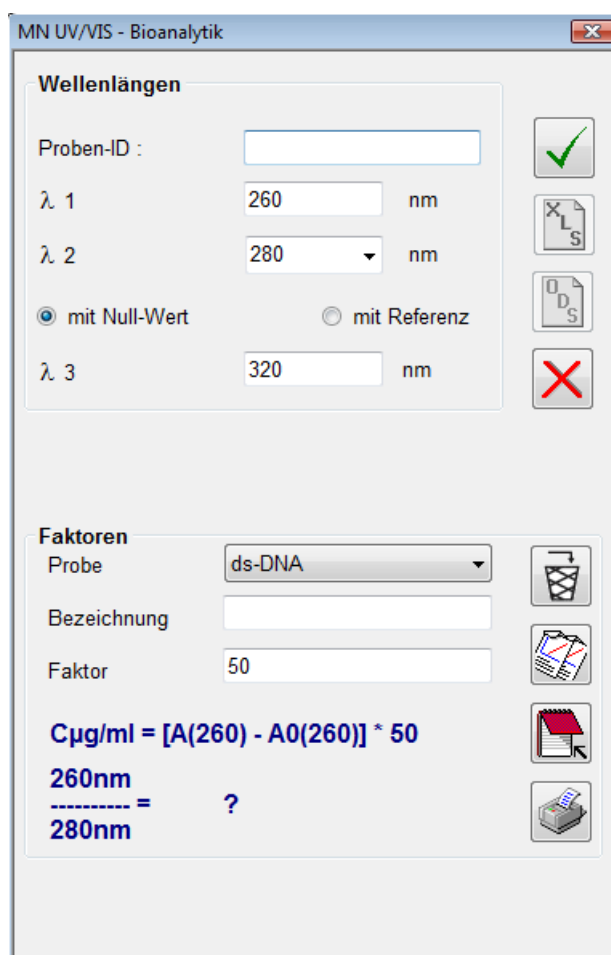


Abb. 24 : Bioanalytik Funktionen

Die Wellenlängen werden automatisch durch die Wahl einer Probe aus der Liste **Probe** gesetzt. Weichen Ihre Wellenlängen von den Vorgaben ab, geben Sie in das Textfeld **WL 1** die Messwellenlänge Ihrer Bestimmung ein. Sollte die gewünschte Wellenlänge nicht in der Liste enthalten sein, können Sie den Wert in die Liste



eintippen. Die Wellenlänge 2, Feld **WL 2** wird für die Reinheitsprüfung verwendet. Wählen Sie eine Wellenlänge aus oder tippen Sie die benötigte Wellenlänge ein.

Es stehen zwei unterschiedliche Messmethoden zur Verfügung. Die Methoden können über die Optionsschalter **mit Referenz** und **mit NULL-Wert** gewählt werden.

Bei Wahl der Option **mit Nullwert** müssen Sie über eine Küvette mit einer NULL-Lösung (blank sample) verfügen. Die Extinktion wird korrekt über die Werte I / I_0 bei der Wellenlänge **WL 1** gemessen.

Steht keine NULL-Lösung zur Verfügung, kann alternativ die Methode **mit Referenz** gewählt werden. Dabei wird davon ausgegangen, dass z. B. DNA und RNA bei 340 nm keinerlei Absorption zeigen und das NULL-Niveau durch die Absorption bei 340 nm bestimmt werden kann. Diese Referenz-Wellenlänge wird über das Feld **WL3** bestimmt und kann geändert werden.

Haben Sie alle Parameter eingestellt, klicken Sie auf den Schalter  und das Photometer startet die Messung. Das Ergebnis wird in den Textzeilen unterhalb des

Feldes **Faktor** angezeigt. Das Messprotokoll können Sie über den Schalter  in

die Zwischenablage kopieren und über einen Klick auf die Schaltfläche  ausdrucken. Wenn Sie ein Messprotokoll als TXT-Datei speichern möchten, klicken

Sie auf den Schalter . Es öffnet sich ein Dateiauswahlfenster, in dem Sie den Dateinamen und den Speicherort festlegen können.

Mit den Schaltern  und  können Sie die Ergebnisse der Messungen direkt in eine Excel oder OpenOffice Tabelle schreiben.

Der letzte Schalter  löscht alle Eingaben auf in diesem Fenster.

Literaturangaben zu allen vordefinierten Bio-Testen finden Sie im Anhang unter Kapitel 7.5.



Für biologische Messungen werden 10 mm Quarz-Küvetten benötigt!

3.5 Photometrische Basisfunktionen

Die photometrischen Basisfunktionen Extinktion, Transmission, Faktor und spektraler Absorptionskoeffizient (SAK-Wert) finden Sie unter dem Menüpunkt **Messen/Basisfunktionen**. Wenn Sie diesen Menüpunkt wählen, öffnet sich das Basisfunktionen-Fenster, siehe Abbildung 25:

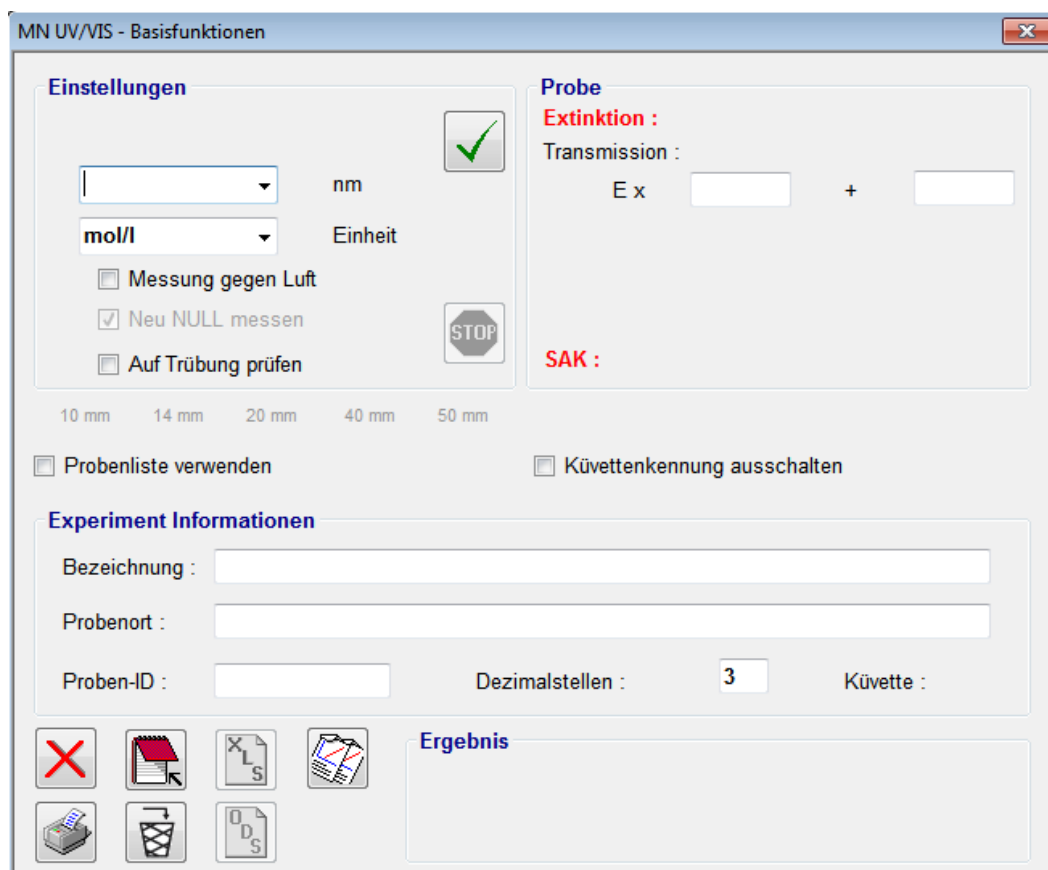


Abb. 25 : Fenster Basisfunktionen

Wenn Sie eine normale Extinktionsmessung durchführen möchten, geben Sie in die oberste Liste **nm** des Rahmens **Einstellungen** die Wellenlänge an, die gemessen werden soll. Wählen Sie in der zweiten Liste darunter die Einheit Ihrer Messung aus. Wenn Sie ein Messprotokoll erstellen oder drucken möchten, müssen Sie die Textfelder im Rahmen **Experiment Informationen** ausfüllen. Möchten Sie eine Faktor-Messung durchführen, also die Extinktion mit einem Faktor multiplizieren, dann geben Sie den Faktor in das Feld **E *** im Rahmen **Probe** ein. Ein eventuelles additives Glied können Sie in das zweite Feld **+** eingeben. Sie können den Faktor aber auch erst nach der Messung eingeben oder ändern. Klicken Sie auf den



Schalter um die Messung zu starten. Wenn die Option **Messung gegen Luft** nicht aktiv ist, werden Sie aufgefordert, eine NULL-Küvette einzusetzen. Nach der NULL-Messung fordert Sie die Software auf, Ihre Probe

einzusetzen. Nach dem Sie die Küvette wieder aus dem Photometer gezogen haben, werden die Messwerte angezeigt, siehe Abbildung 26.

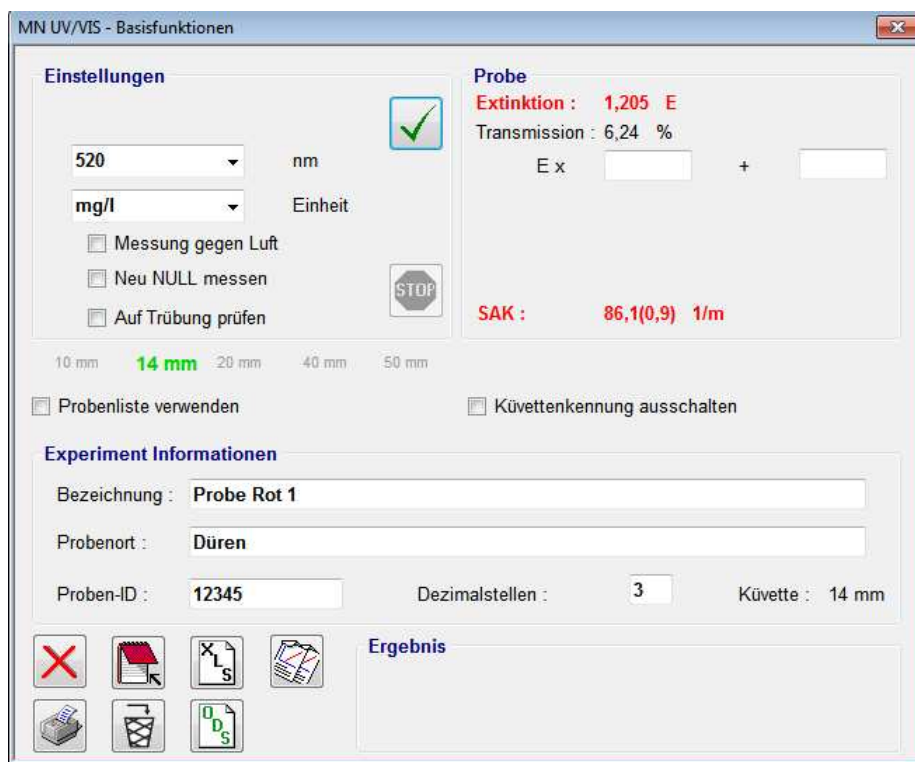


Abb. 26 : Fenster Standardmethoden mit Messdaten

Extinktion, Transmission und der spektrale Absorptionskoeffizient werden nebeneinander angezeigt

Haben Sie die Funktion **auf Trübung prüfen** aktiviert, wird vor der eigentlichen Messung eine nephelometrische Trübungsmessung durchgeführt. Sollte der Messwert größer als eine einstellbare Warnschwelle sein, zeigt die Software eine Warnmeldung an (verfügbar ab Photometer-Firmware 2.1). Die Warnschwelle können Sie im Einstellungsmenü, siehe Kapitel 7.3.1) Ihren Bedürfnissen anpassen.

Wenn Sie eine Probenliste angelegt haben, siehe Kapitel 7.2, können Sie durch Aktivierung des Schalters **Probenliste verwenden** die Messung der Probenliste durchführen.

Wenn Sie den Schalter **Küvettenkennung ausschalten** aktivieren, ignoriert die Software die Küvettenerkennung des Photometers. Dies kann erforderlich werden, wenn Sie mit Einmalküvetten arbeiten, die ausgehöhlte Seiten aufweisen und die Schalter der Küvettenkennung im Photometer nicht auslösen. Ist die Funktion **Küvettenkennung ausschalten** aktiv, müssen Sie jedes Einsetzen und Ziehen mit einem Mausklick bestätigen! Bei ausgeschalteter Küvettenkennung müssen Sie vor

der Messung durch doppelklicken auf die verwendete Küvettengröße unterhalb des Rahmens **Einstellungen** der Software die korrekte Größe mitteilen.

Wenn Sie einen Faktor angeben, wird das Ergebnis wie in Abbildung 27 gezeigt dargestellt. Die Zahl der angezeigten Dezimalstellen können Sie über das Eingabefeld **Dezimalstellen :** beeinflussen.



Mit dem Schalter können Sie ein Messprotokoll im Text-Format auf Ihrem PC speichern. Wenn Sie ein Protokoll drucken möchten, klicken Sie auf den Schalter



Eine Kopie des Messprotokolls können Sie mit dem Schalter in die Zwischenablage kopieren.



Mit den Schaltern können Sie die Ergebnisse der Messungen direkt in eine Excel oder OpenOffice Tabelle schreiben.



Der letzte Schalter löscht alle Ihre Eingaben.



Abb. 27 : Messung mit Faktor

3.6 Sondermethoden

Unter diesem Menüpunkt stehen Ihnen die gleichen Funktionen wie unter den photometrischen Basisfunktionen, Kapitel 3.5, zur Verfügung. Im Unterschied zu den Basisfunktionen bieten Ihnen die Sondermethoden auch polynomische Berechnungen bis zum 4. Grad an.

Haben Sie bereits Sondermethoden nach Kapitel 3.2 oder Kapitel 5 erstellt, werden die Methoden in einer Auswahlliste im oberen Bereich des Rahmens **Einstellungen** angezeigt, siehe Abbildung 28. Wenn Sie eine Methode aus dieser Liste auswählen, werden alle folgenden Felder mit den gespeicherten Werten gefüllt.



Abb. 28 : Auswahl gespeicherter Sondermethoden

3.7 Multiwellenlängenmessung, Schalter



Die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** ermöglicht die Durchführung von Multiwellen-längen Messungen. Dabei werden mehrere (bis zu 6) Wellenlängen nacheinander angefahren (– das kann durchaus die gleiche Wellenlänge sein, auch die Reihenfolge spielt keine Rolle –) und die Extinktionen oder Transmissionen bestimmt. Die Messwerte können mit individuellen Faktoren versehen werden und mit verschiedenen mathematischen Formeln verrechnet werden. Abbildung 29 zeigt das Fenster der Multiwellenlängenmessung.

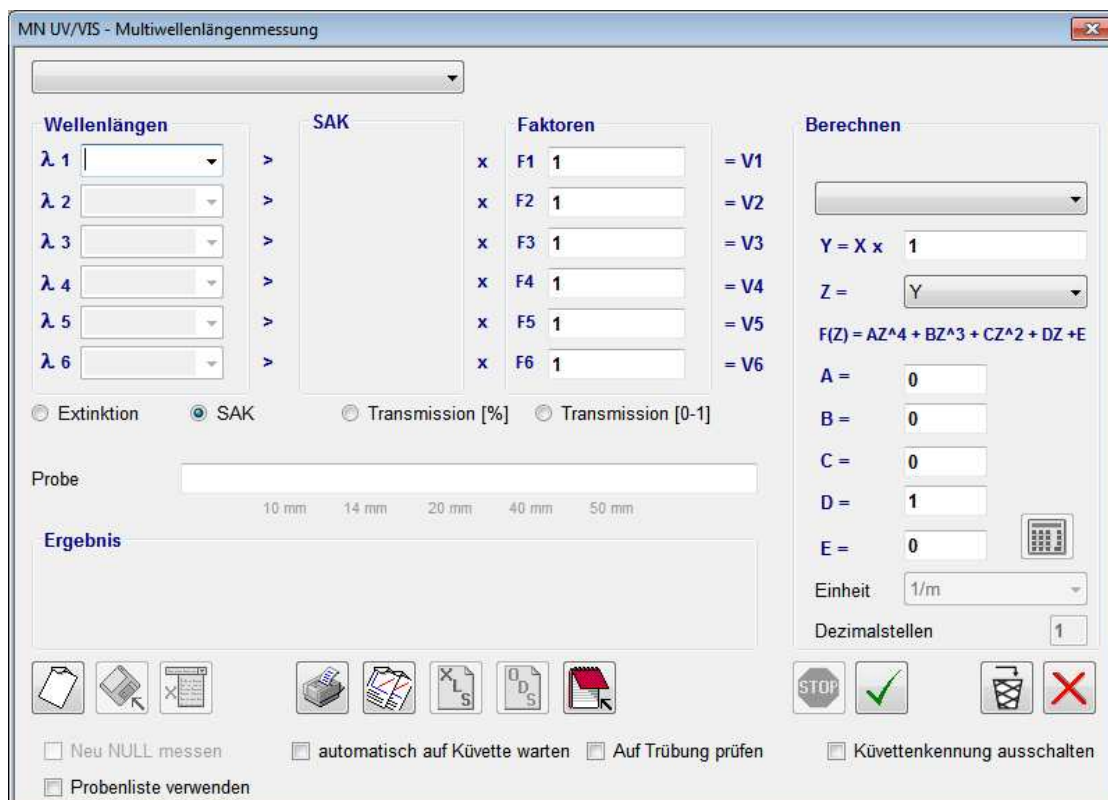


Abb. 29 : Multiwellenlängen-Fenster

Im linken oberen Bereich des Fensters sehen Sie den Rahmen **Wellenlängen**. Er enthält 6 Auswahllisten $\lambda 1$ bis $\lambda 6$ mit möglichen Wellenlängen. Ist die von Ihnen benötigte Wellenlänge nicht in den Listen enthalten, können Sie die Wellenlänge auch direkt in das Textfeld einer Liste eingeben. Achten Sie darauf dass alle Wellenlängen, die Sie nicht benötigen, eine „0“ anzeigen.

Der zweite Rahmen **Extinktion** (je nach Einstellung) ist in der Abbildung 29 leer. Dort werden nach einer Messung die Messwerte angezeigt. Im dritten Rahmen **Faktoren** können Sie für jede Wellenlänge einen individuellen Faktor vergeben, mit dem der Messwert multipliziert wird. Unterhalb der drei Rahmen sehen Sie die Optionsschalter **Extinktion**, **SAK**, **Transmission [%]** und **Transmission [0-1]**. Damit legen Sie fest, ob mit Extinktionen, Absorptionskoeffizienten oder Transmissionen gerechnet werden soll. Dabei bedeutet [%] die Transmission von 0 bis 100% und [0-1] die Transmission als Bruch von 0 bis 1.

Auf der rechten Seite des Fensters finden Sie den Rahmen **Berechnen**. Dort legen Sie fest, wie die einzelnen Messwerte miteinander verrechnet werden. In das Textfeld **Probe** mittig im unteren Fensterbereich geben Sie bitte eine Probenbezeichnung ein.

Im folgenden Beispiel wird eine Messung mit vier Wellenlängen durchgeführt, siehe Abbildung 30.



Abb. 30 : Einstellen von 4 Wellenlängen

Stellen Sie zunächst die benötigten Wellenlängen ein. Sie können bis zu 6 Wellenlängen vorwählen. Wellenlängen, die Sie für die Auswertung nicht benötigen, müssen auf „0“ gestellt werden. Das Pfeil-Symbol „>“ weist auf die entsprechende Extinktion, die aber noch nicht gemessen wurde. Sollen die Messwerte vor der eigentlichen Berechnung noch mit einem Faktor multipliziert werden, füllen Sie die entsprechenden Textfelder im Rahmen **Faktoren** aus, siehe Abbildung 31.



Abb. 31 : Vergabe individueller Faktoren

Wenn für eine Extinktion kein Faktor benötigt wird, muss in dem Feld eine „1“ eingestellt sein. Das Produkt aus Extinktion 1 und Faktor 1 (F1) wird V1 genannt. Stellen Sie nun in der obersten Liste des Rahmens **Berechnen** die Formel ein, die auf die vier Werte V1 bis V4 angewendet werden soll, siehe Abbildung 32. Der Inhalt dieser Liste ist von der Anzahl verwendeter Wellenlängen abhängig.



Sollten Sie eine dringend benötigte Formel nicht in der Liste finden, wenden Sie sich bitte an MACHEREY-NAGEL.

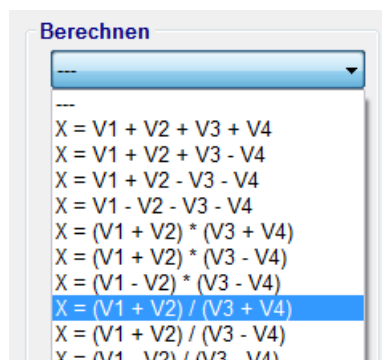


Abbildung 32 : Auswahl der Formel

Im Beispiel wird $X = (V1 + V2) / (V3 + V4)$ gewählt. Unterhalb der Formelauswahl haben Sie noch die Möglichkeit, den Berechneten Wert „X“ mit einem Faktor zu multiplizieren und auf das Ergebnis eine mathematische Operation anzuwenden, siehe Abbildung 33.

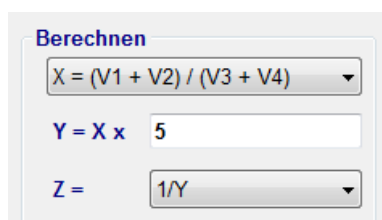


Abb. 33 : Gesamtfaktor und mathematische Operation

Im Beispiel wird das Ergebnis der Formel aus Abbildung 31 noch mit dem Faktor „2“ multipliziert (Wert „Y“) und aus dem Ergebnis der reziproke Wert berechnet (Wert „Z“).

Weiterhin ist es möglich, den so berechneten Wert noch polynomisch bis zum 4. Grad auszuwerten, siehe Abbildung 34.

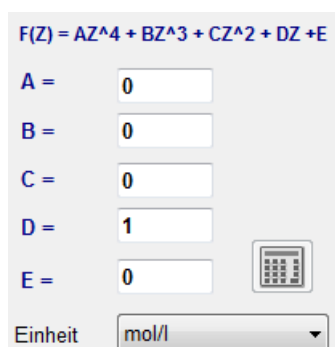


Abb. 34 : Polynomische Auswertung

Dabei wird aus dem Wert „Z“ die Funktion

$$F(z) = A \times Z^4 + B \times Z^3 + C \times Z^2 + D \times Z + E$$

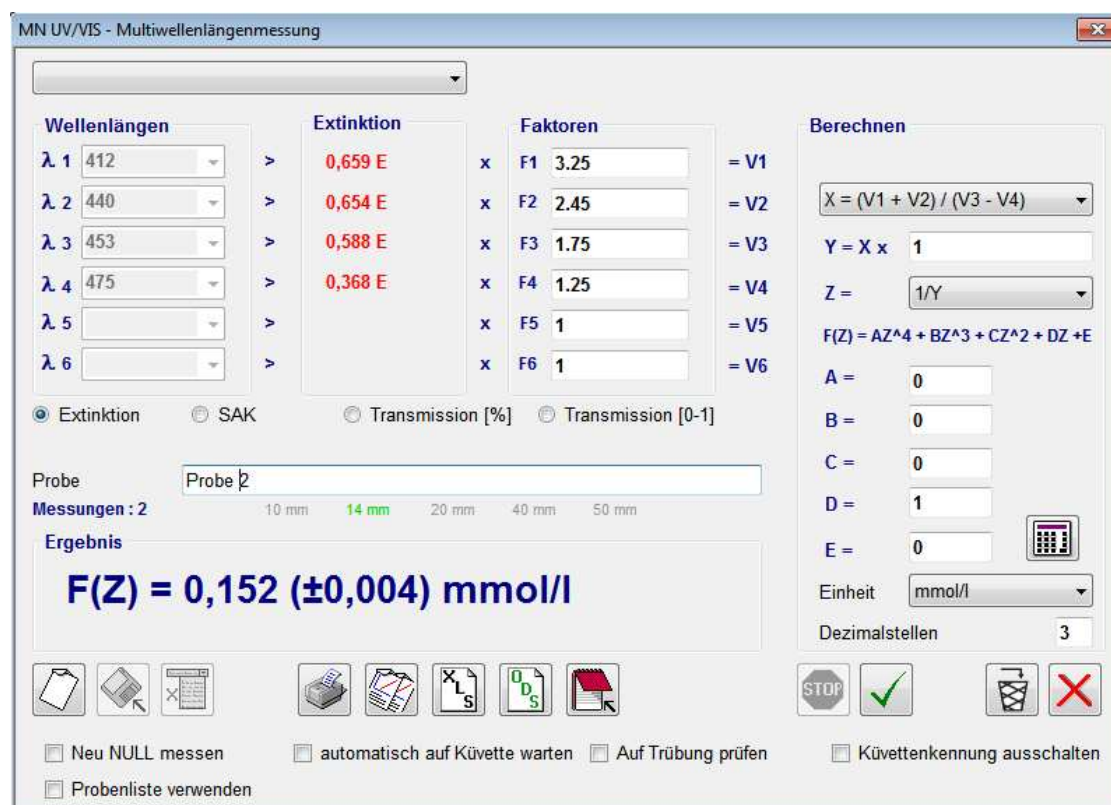
berechnet. **Ohne polynomische Auswertung müssen die Faktoren A bis C und E die Werte „0“ anzeigen und der Faktor D den Wert „1“.**

Unterhalb der Polynomfelder können Sie in der Liste Einheit eine Einheit wählen, die mit in das Messprotokoll aufgenommen wird.

Haben Sie alle Einstellungen vorgenommen, können Sie die Messung durch einen



Klick auf den Schalter unten links starten. Die Software fordert Sie auf, eine NULL-Küvette in das Photometer zu stecken. Nach Messung der NULL-Werte werden Sie aufgefordert, die Küvette zu entfernen und die Probenküvette in das Photometer zu stecken. Nach dem die Probe gemessen wurde, werden Sie wieder aufgefordert, die Küvette zu entfernen. Danach werden die Messwerte angezeigt, wie Abbildung 35 zeigt.



MN UV/VIS - Multiwellenlängenmessung

Wellenlängen: $\lambda 1$ 412, $\lambda 2$ 440, $\lambda 3$ 453, $\lambda 4$ 475, $\lambda 5$, $\lambda 6$

Extinktion: 0,659 E, 0,654 E, 0,588 E, 0,368 E

Faktoren: F1 3.25, F2 2.45, F3 1.75, F4 1.25, F5 1, F6 1

Berechnen: $X = (V1 + V2) / (V3 - V4)$, $Y = X \times 1$, $Z = 1/Y$, $F(Z) = AZ^4 + BZ^3 + CZ^2 + DZ + E$

Probe: Probe 2

Messungen: 2

Ergebnis: **F(Z) = 0,152 (±0,004) mmol/l**

Einheit: mmol/l

Dezimalstellen: 3

Buttons: STOP, Green Checkmark, Trash, Red X

Checkboxes: ☐ Neu NULL messen, ☐ automatisch auf Küvette warten, ☐ Auf Trübung prüfen, ☐ Küvettenkennung ausschalten, ☐ Probenliste verwenden

Abb. 35 : Ergebnis der Messung

Die Extinktionen werden angezeigt, das Ergebnis inkl. Fehler berechnet und unten rechts angezeigt. Zusätzlich wird ein ausführliches Messprotokoll erstellt. Dieses



Protokoll können Sie mit dem Schalter in die Zwischenablage kopieren oder mit



dem Schalter ausdrucken. Nach einer Messung ist auch der Schalter rechts im Rahmen Berechnungen aktiv. Er ermöglicht das erneute Berechnen (nicht Messen) des Ergebnisses. Sie können also z.B. Änderungen an den



Faktoren/Formeln durchführen und die Berechnung mit den gemessenen Werten erneut durchführen.

Nach einer Messung können Sie sofort eine zweite Probe messen, ohne eine zweite NULL-Kalibrierung durchzuführen. Müssen oder wollen Sie eine erneute NULL-Messung durchführen, müssen Sie vor der zweiten Messung den Optionsschalter **Neu NULL messen** am unteren linken Rand des Fensters aktivieren. Die Küvettengröße Ihrer NULL-Messung wird in **grüner** Schrift unter dem Textfeld für die Probenbezeichnung angezeigt.

Neben dem Schalter **Neu NULL messen** sehen Sie die Funktionen **automatisch auf Küvette warten** und **auf Trübung prüfen**. Haben Sie die erste Funktion **automatisch auf Küvette warten** aktiviert, können Sie nach der Messung einer Extinktion die Küvette aus dem Photometer nehmen. Die Multiwellenlängenmessung wird automatisch weitergeführt, wenn Sie die Küvette wieder einsetzen. Sie können so Messungen realisieren, bei denen zwischen den einzelnen Messungen z. B. Reagenzien zu der Probe gegeben werden müssen.

Haben Sie die Funktion **auf Trübung prüfen** aktiviert, wird vor der eigentlichen Messung eine nephelometrische Trübungsmessung durchgeführt. Sollte der Messwert größer als eine einstellbare Warnschwelle sein, zeigt die Software eine Warnmeldung an (verfügbar ab Photometer-Firmware 2.1). Die Warnschwelle können Sie im Einstellungenmenü, siehe Kapitel 7.3.1, Ihren Bedürfnissen anpassen.

Wenn Sie die ausgeführte Methode in Ihrem Computer speichern möchten, klicken



Sie auf den Schalter. Am rechten oberen Rand des Fensters wird eine Textbox eingeblendet. Geben Sie dort den Namen an, unter dem Ihre Methode gespeichert



werden soll. Klicken Sie dann auf den Schalter und Ihre Methode wird gespeichert. Um gespeicherte Methoden aufzurufen, wählen Sie den Namen Ihrer Methode aus der Auswahlliste links oben im Multiwellenlängen-Fenster.



Haben Sie eine gespeicherte Methode gewählt, ist der Schalter aktiv. Damit können Sie eine gespeicherte Methode löschen, siehe Abbildung 36.

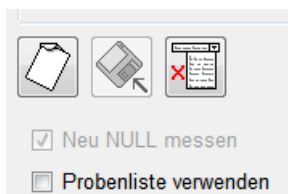


Abb. 36 : Löschen gespeicherte Multiwellenlängenmessungen



3.8

Farbmessung, Schalter



Seit der Version V 3.0 der **NANOCOLOR® Spektrometer Software** bietet MACHEREY-NAGEL Farbmessungen an. Für die Farbmessung liegt ein eigenes Handbuch vor. Bitte lesen Sie die „**Ergänzung I : Farbmessung**“ zum Handbuch der Software.

3.9

Brauereianalytik

Seit der Version V 3.0 der **NANOCOLOR® Spektrometer Software** bietet MACHEREY-NAGEL die Möglichkeit an, alle photometrischen Tests nach MEBAK durchzuführen. Für die Tests der Brauereianalytik liegt ein eigenes Handbuch vor. Bitte lesen Sie die „**Ergänzung II : Brauereianalytik**“ zum Handbuch der Software.

3.10

Enzymatische Tests

Seit der Version V 3.0 der **NANOCOLOR® Spektrometer Software** bietet MACHEREY-NAGEL die Durchführung enzymatischer Tests an. Für die Durchführung von Enzym-Tests liegt ein eigenes Handbuch vor. Bitte lesen Sie die „**Ergänzung III : enzymatische Tests**“ zum Handbuch der Software.

3.11

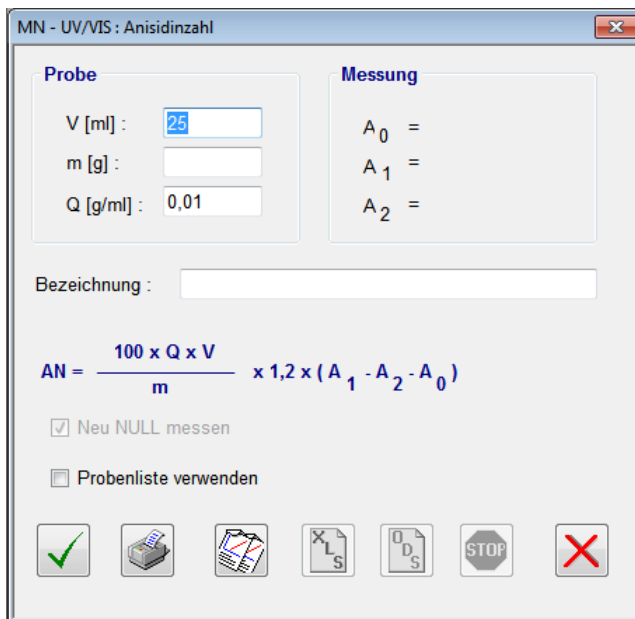
Anisidin-Zahl

Seit der Version 3.0.8 der **NANOCOLOR® Spektrometer Software** bietet MACHEREY-NAGEL die Messung der Anisidin-Zahl an. Die Anisidin-Zahl stellt ein Maß für den Gehalt an α,β -ungesättigten Aldehyden (2-Alkenale) in tierischen und pflanzlichen Fetten und Ölen dar. Sie wird nach DGF C VI 6e (05) bestimmt.

Geben Sie in das Textfeld **V [ml]** das Volumen, in dem die Fettprobe gelöst wurde an. Standardmäßig ist hier 25 ml voreingestellt. Geben Sie in das Textfeld **m [g]** die Einwaage an Fett an (in der Regel zwischen 0,4 und 4 g). In das Textfeld **Q [g/ml]** wird die Anisidinmenge in der Probelösung angegeben. Standardmäßig ist hier 0.01 g/ml eingestellt.

Geben Sie in das Textfeld **Bezeichnung** die Bezeichnung/Probennummer Ihrer Probe ein. Alternativ können Sie eine Probeliste nach Kapitel XX, Seite yy, erstellen und die Option **Probenliste verwenden** aktivieren.

Abbildung 37 zeigt das Anisidin-Fenster.



MN - UV/VIS: Anisidinzahl

Probe

V [ml] : 25

m [g] :

Q [g/ml] : 0,01

Messung

A₀ =

A₁ =

A₂ =

Bezeichnung :

$$AN = \frac{100 \times Q \times V}{m} \times 1,2 \times (A_1 - A_2 - A_0)$$

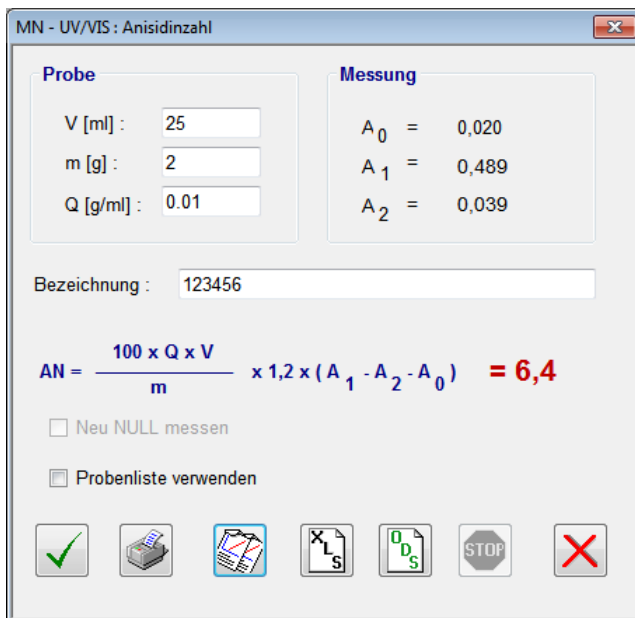
☒ Neu NULL messen

☐ Probenliste verwenden

OK, Printer, Data, Help, STOP, X icons

Abb. 37 : Das Anisidi-Fenster

Klicken Sie nun auf den Schalter  und starten Sie die Messung. Die Extinktionen der 3 Messlösungen werden oben rechts angezeigt, die Anisidinzahl in der Mitte des Fensters am rechten Rand, siehe Abbildung 38.



MN - UV/VIS: Anisidinzahl

Probe

V [ml] : 25

m [g] : 2

Q [g/ml] : 0.01

Messung

A₀ = 0,020

A₁ = 0,489

A₂ = 0,039

Bezeichnung : 123456

$$AN = \frac{100 \times Q \times V}{m} \times 1,2 \times (A_1 - A_2 - A_0) = 6,4$$

☐ Neu NULL messen

☐ Probenliste verwenden

OK, Printer, Data, Help, STOP, X icons

Abb. 38 : Durchgeführte Anisidinzahl-Messung

Das Messprotokoll können Sie mit dem Schalter  in die Zwischenablage kopieren oder mit dem Schalter  ausdrucken. Mit den Schaltern  und  können Sie die Ergebnisse der Messungen direkt in eine Excel oder OpenOffice Tabelle schreiben.

3.12 Von USB-Stick importieren, Schalter

Die **NANOCOLOR® Spektrometer** bieten Ihnen die Möglichkeit, den Speicher des Photometers auf einen USB-Stick zu kopieren. Das Photometer schreibt die Daten auf den Stick in das Verzeichnis *UVIS\MEMORY* bzw. *VIS\MEMORY* mit dem Dateinamen *tagesdatum.TXT*. Diese Daten können mit der Funktion **Von USB-Stick importieren** in die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** importiert werden. Es öffnet sich ein Datei-Auswahlfenster, in dem Sie die erforderliche TXT-Datei auswählen.

3.13 Original-Dateien

Die strengen Regeln der GLP und 21 CFR Part 11 schreiben vor, dass Messdaten eines Gerätes, die per PC-Software auf einem Computer gespeichert werden sollen, in einer Form gespeichert werden müssen, die jegliche Manipulation, unbeabsichtigt oder nicht, möglichst verhindert. Gleichzeitig muss die Software in der Lage sein, Manipulationen an Messdaten selbsttätig zu erkennen. Daher schreibt die MACHEREY-NAGEL **NANOCOLOR® Spektrometer Software** alle Daten eines Exports von Testdaten in eine geschützte, binär codierte Datei, die Original-Datei. Die Original-Dateien können ohne geeignete Software weder gelesen noch editiert werden, ohne sie zu beschädigen (siehe Kapitel 2). Eine Original-Datei wird auch angelegt, wenn Sie die exportierten Daten **nicht** weiter in einem der angebotenen Formate abspeichern. Standardmäßig wird zur Speicherung das Verzeichnis

c:\Programme\MACHEREY-NAGEL\uvvis\originals

verwendet. Über das Einstellungen-Fenster kann aber ein anderer Pfad für den Speicherort der Original-Dateien angegeben werden, so dass die Original-Dateien beispielsweise auf einem externen Server gesichert werden können.



Um Funktionen zu verwenden, die mit Original-Dateien arbeiten, müssen Sie über Administrator-Rechte verfügen.

3.13.1 Original-Dateien lesen

Die Vorschrift 21 CFR Part 11 schreibt vor, dass Originaldateien jederzeit von berechtigtem Personal oder Prüfern eingesehen werden können. Wenn Sie wissen möchten, was in den Original-Dateien enthalten ist, klicken Sie auf den Menübefehl **Messen/Original anzeigen**. Es öffnet sich ein Datei-Auswahlfenster, siehe Abbildung 39.

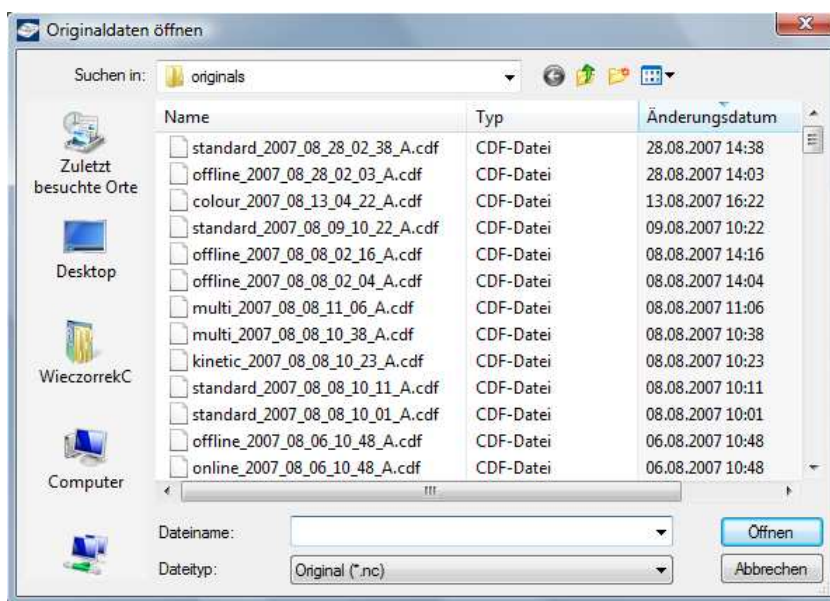


Abb. 39: Auswahl der Original-Datei

Wechseln Sie in das Verzeichnis, in dem die Original-Dateien gespeichert werden. Standardmäßig werden die Original-Dateien im Verzeichnis

c:\Programme\MACHEREY-NAGEL\uvvis\originals

gespeichert. Wie Sie sehen, wird der Dateiname automatisch gebildet und besteht aus *typ_jahr_monat_tag_stunden_minuten_Buchstabe.cdf*. Der Buchstabe, in der Regel ein „A“, stellt einen Zähler dar für den Fall, dass innerhalb einer Minute mehr als ein Vorgang stattfindet. Als Typ kann *online, offline, standard, multi, bio, brewery, devicetest, encymatic* oder *kinetic* angezeigt werden, je nach Art der vorgenommenen Messung.

Wählen Sie eine Datei aus und klicken Sie auf den Schalter **Öffnen**. Es öffnet sich ein Fenster, das den Inhalt der Original-Datei anzeigt, siehe Abbildung 40.

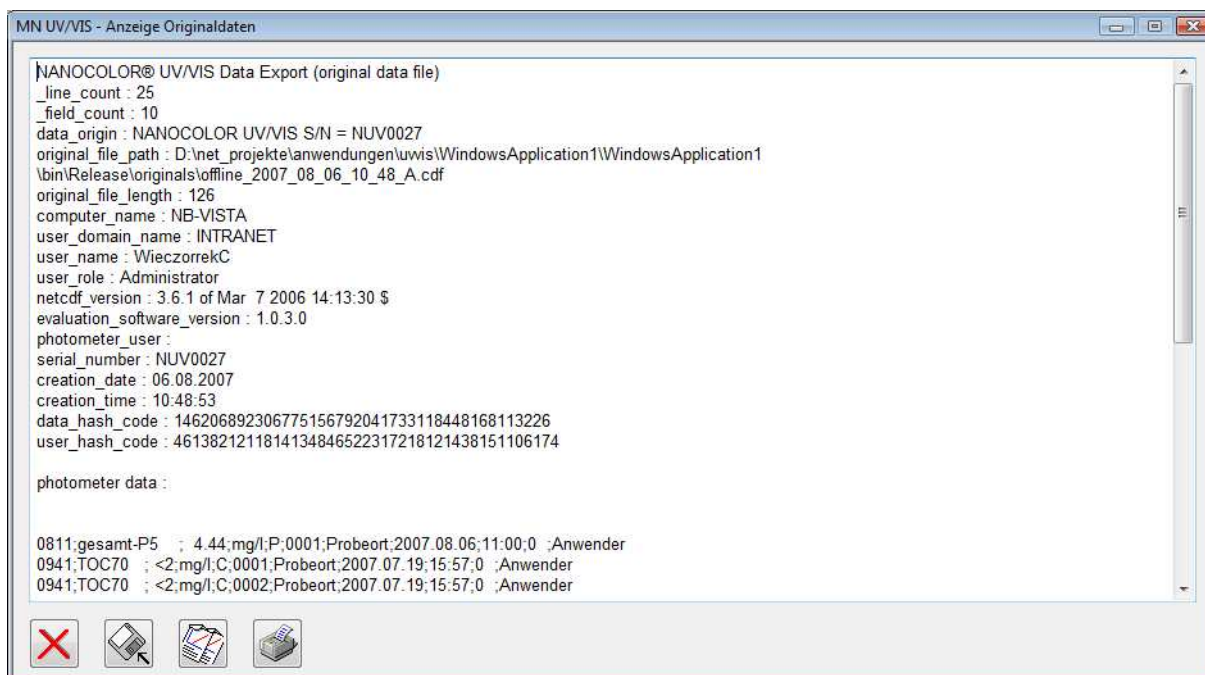


Abb. 40 : Original-Datei anzeigen

Sie können einen Ausdruck der Originaldatei erstellen, in dem Sie auf den Schalter



klicken. Mit dem Schalter



kopieren Sie das Textfenster in die Zwischenablage. Der Schalter mit dem roten X schließt das Fenster.

3.13.2 Aus Original wiederherstellen



Sollten Ihnen exportierte Messdaten verloren gegangen sein, können Sie aus den Original-Dateien wieder Excel-Tabellen bzw. alle angebotenen Export-Formate herstellen. Standardmäßig werden die Original-Dateien im Verzeichnis

c:\Programme\MACHEREY-NAGEL\uvvis\originals

gespeichert. Klicken Sie auf den Menübefehl **Messen/Aus Original wiederherstellen**. Es öffnet sich das Datei-Auswahlfenster aus Abbildung 37. Wählen Sie die zu wiederherstellende Original-Datei und klicken Sie auf den Schalter **Öffnen**. Wenn die Datei unbeschädigt ist, wird das Tabellen-Fenster aus Abbildung 3 geöffnet und mit den Messdaten gefüllt. Sie können nun die Daten der Original-Datei nach Excel, XML, OpenOffice oder in das Text-Format exportieren.



Sie können nur die Original-Typen *offline* und *online* in Tabellen umwandeln!

3.14 Autosampler, Schalter



Seit der Version V 3.0 der **NANOCOLOR® Spektrometer Software** bietet MACHEREY-NAGEL die Messung mit dem **NANOCOLOR® Autosampler AS 53** an. Für die Messung mit dem Autosampler liegt ein eigenes Handbuch vor. Bitte lesen Sie die „**Ergänzung IV : Autosampler AS 53**“ zum Handbuch der Software.

3.15 IQK Karte 4

Die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** kann IQK-Karten analog dem Formblatt der Arbeitsgruppe DWA-A 704 erstellen. Es besteht sowohl die Möglichkeit, für die manuelle Bearbeitung leere IQK-Karten für **NANOCOLOR®** Tests zu erstellen als auch vollautomatisch eine Karte aus den Messwerten des Photometers zu generieren.

3.15.1 Leere IQK-Karten 4

Um eine leere IQK-Karte zu erstellen, wählen Sie aus der Liste **Test:** den benötigten **NANOCOLOR®** Test aus. Siehe Abbildung 41.

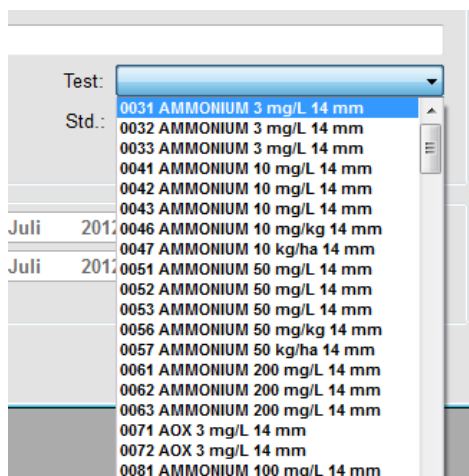


Abb. 41 : Liste mit **NANOCOLOR®** Testen

Wählen Sie anschließend den zu diesem Test passenden Standard aus der Liste **Std.:** aus (wenn vorhanden), siehe Abbildung 42.

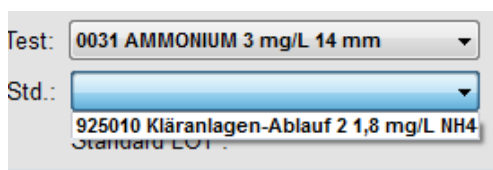


Abb. 42 : Liste mit **NANOCOLOR®** Standards

Drucken Sie nun die IQK-Karte 4 über den Schalter  aus oder wählen Sie die

Druckvorschau über den Schalter .

Die Karte sieht wie in Abbildung 43 gezeigt aus.

NANOCOLOR® ^{UV} / _{VIS} Spektrometer - IQK Karte 4 - Messung von Standards		Kenngröße :
Abwasseranlage / Firma :		mg/L NH4-N
Betriebsmethode :		
Messbereich :	2,2 mg/L NH4-N	
1,6 - 2 mg/L NH4-N		
Standard Bez. :	2 mg/L NH4-N	
NANOCOLOR 925010 Kläranlagen-Abw. 2 1,6 mg/L NH4-N		
Sollwert :	1,8 mg/L NH4-N	
1,8 mg/L NH4-N		
Kontrollgrenzen :	1,6 mg/L NH4-N	
1,60 - 2,00 mg/L NH4-N		
Photometer :	1,4 mg/L NH4-N	
Messwerte :		
mg/L NH4-N		
Datum :		
Test LOT :		
Standard LOT :		
Anwender :		
Status :		
T Probe ist trüb. C außerhalb Vertrauensbereich 20 außerhalb des 20%-80% Bereichs R Außerhalb des Messbereichs S außerhalb 2 sigma		
Betriebsverantwortlicher : _____		
MACHEREY-NAGEL GmbH & Co. KG Neumann-Neander-Str. 6-8 D-52355 Düren Germany VAL-NS-WECZOR@WecromKG 03 57 11 Seite 1 / 1 nach DWA - A 704		

Abb. 43 : Ansicht einer leeren IQK-Karte 4

3.15.2 IQK-Karten 4 aus Standardmessungen

Seit der Geräte-Version 3.0 des **NANOCOLOR® ^{UV}/_{VIS}** Photometers haben Sie die Möglichkeit, die im Rahmen der internen Qualitätskontrolle nach Arbeitsblatt DWA-A 704 vorgeschriebenen Standardmessungen direkt im Photometer mit allen erforderlichen Angaben zu dokumentieren. Wie Sie Ihre betrieblichen Festlegungen zu den Standardmessungen im Photometer einstellen, entnehmen Sie bitte der Anleitung Ihres Photometers. Die Arbeitsgruppe DWA-AG IG-4.3 empfiehlt, personenbezogen nach jeder 10 Messung eines Parameters, mindestens aber 1 x pro Monat, eine Standardmessung durchzuführen.

Werden Standardmessungen durchgeführt, kann die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** aus den Messdaten automatisch eine IQK-Karte 4 erstellen. Dazu werden bei jedem (offline) Datenexport die Daten der Standardmessungen in einer speziellen

Tabelle gespeichert. Aus dieser Tabelle können Sie, für jeden registrierten Anwender, Testspezifische IQK-Karten 4 auf Mausklick erstellen.

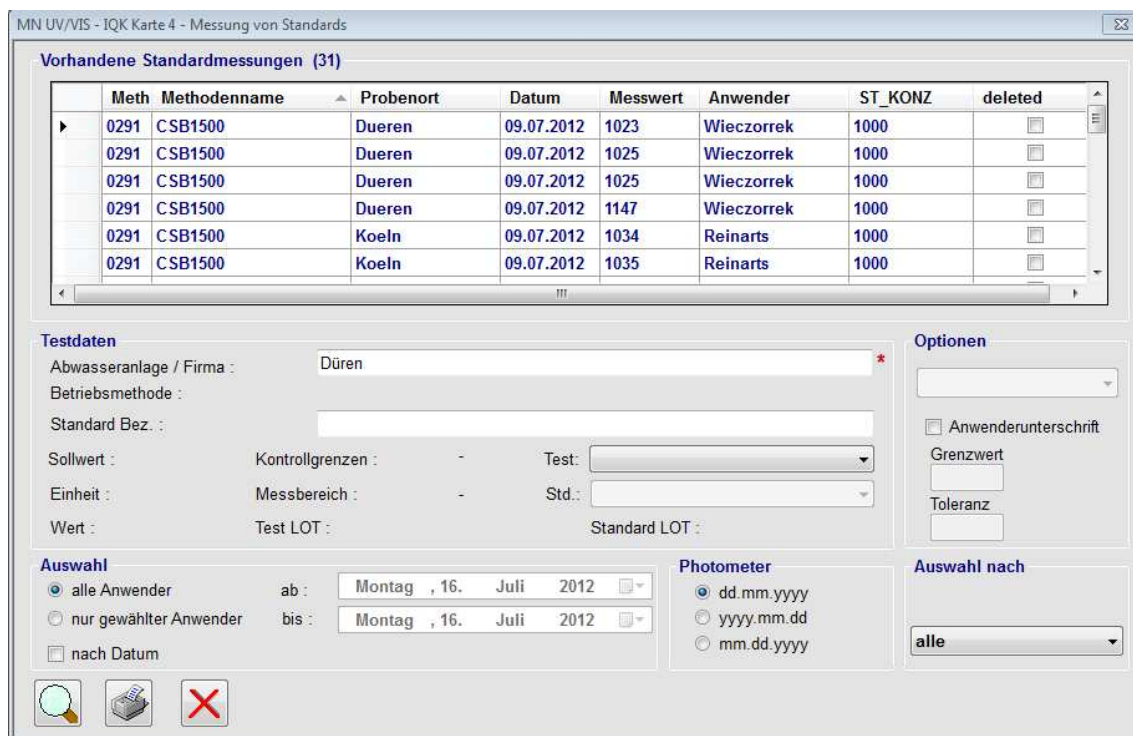


Voraussetzung für die Erstellung einer IQK-Karte 4 ist, das im Photometer die IQK-Funktion aktiviert ist und von allen Anwendern ausreichend Standard-Messungen durchgeführt wurden!

Um eine IQK-Karte 4 zu erstellen, muss jeder Anwender mit seinem Namen im Photometer registriert sein und Standard-Messungen für alle erforderlichen Parameter durchführen. Diese Standardmessungen müssen im Photometer als Standardmessung markiert werden (siehe Photometer-Handbuch) und mit folgenden Daten versehen werden: LOT des Standards, LOT des verwendeten Testes, Sollwert des Standards und die erlaubte Abweichung. Bei einem Datenexport vom Photometer in die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** werden diese Daten mit übertragen und von der IQK-Funktion ausgewertet.

Wie sie bereits in Kapitel 3.1.1 **Auslesen des Photometerspeichers**, Seite 8, gesehen haben, können einige Messungen in der Tabelle rot markiert angezeigt werden. Bei diesen Messungen lag das Messergebnis außerhalb des erlaubten Vertrauensbereichs des verwendeten Standards.

Wenn Sie auf die Menüfunktion **Messen/IQK-Karte 4** klicken, öffnet sich das IQK-Fenster, siehe Abbildung 44.



MN UV/VIS - IQK Karte 4 - Messung von Standards

Vorhandene Standardmessungen (31)

	Meth	Methodenname	Probenort	Datum	Messwert	Anwender	ST_KONZ	deleted
▶	0291	CSB1500	Dueren	09.07.2012	1023	Wieczorrek	1000	☐
	0291	CSB1500	Dueren	09.07.2012	1025	Wieczorrek	1000	☐
	0291	CSB1500	Dueren	09.07.2012	1025	Wieczorrek	1000	☐
	0291	CSB1500	Dueren	09.07.2012	1147	Wieczorrek	1000	☐
	0291	CSB1500	Koeln	09.07.2012	1034	Reinarts	1000	☐
	0291	CSB1500	Koeln	09.07.2012	1035	Reinarts	1000	☐

Testdaten

Abwasseranlage / Firma : Düren *

Betriebsmethode :

Standard Bez. :

Sollwert : Kontrollgrenzen : - Test:

Einheit : Messbereich : - Std.:

Wert : Test LOT : Standard LOT :

Auswahl

☒ alle Anwender ab : Montag , 16. Juli 2012

☐ nur gewählter Anwender bis : Montag , 16. Juli 2012

☐ nach Datum

Photometer

☒ dd.mm.yyyy

☐ yyyy.mm.dd

☐ mm.dd.yyyy

Optionen

☐ Anwenderunterschrift

Grenzwert

Toleranz

Auswahl nach

alle

Abb. 44 : IQK-Fenster



In der Tabelle am oberen Rand werden alle Standard-Messungen, die in der Datenbank der Software gespeichert sind, angezeigt. Achtung, wenn Sie noch keinen Datenexport durchgeführt haben, oder keine Standard-Messungen durchgeführt haben, ist die Tabelle leer!

Durch Doppelklicken auf die Kopfzeile der Tabelle können Sie die Einträge sortieren. Wählen Sie einen Eintrag durch Anklicken aus. Alternativ können Sie aus der Auswahlliste **Anwender** am unteren Fensterrand einen Anwender auswählen. In der Tabelle werden dann nur noch Messungen dieses Anwenders angezeigt und der erste Eintrag automatisch ausgewählt. Wie Abbildung 44 zeigt, werden die Daten der gewählten Messung im Rahmen **Testdaten** angezeigt.

Füllen Sie die Textfelder **Abwasseranlage** und **Standard-Bez.** aus. Im Rahmen **Auswahl** links unten können Sie auswählen, ob die IQK-Karte 4 für alle Anwender, die den gewählten Standard gemessen haben gelten soll oder nur für einen Anwender. Haben Sie **nur gewählter Anwender** aktiviert, müssen Sie aus der Liste **Anwender** den Namen des Anwenders auswählen. Über die Option **nach Datum** können Sie mit Hilfe der zwei Datumsfelder **ab:** und **bis:** die Messungen einschränken.

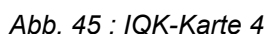


Der Schalter  erstellt die IQK-Karte 4 in der Windows-Druckvorschau, mit dem



Druckerschalter  können Sie die Karte direkt ausdrucken. Abbildung 45 zeigt eine IQK-Karte 4.

Liegen mehr als 25 Standard-Messungen vor, werden mehrere Seiten gedruckt.



47 / 144

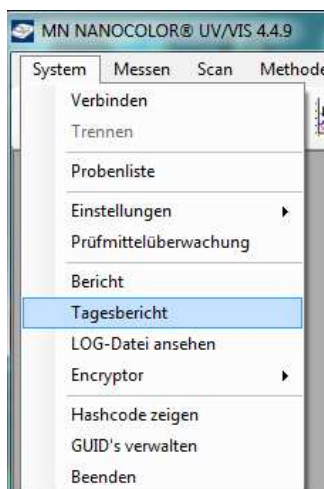
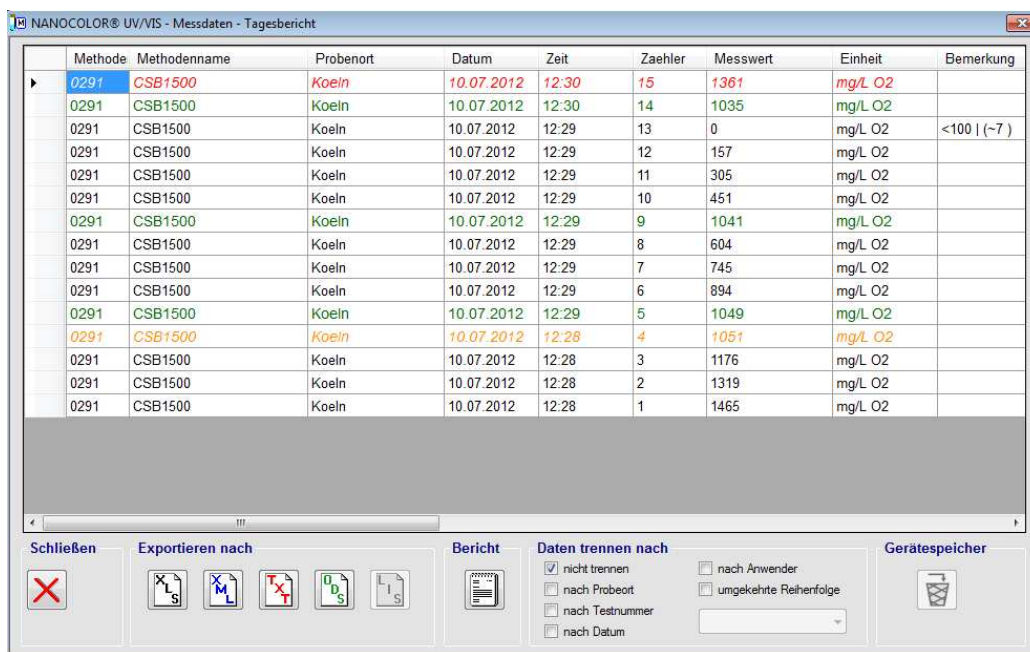


Abb. 46 : Menübefehl Tagesbericht

Die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** öffnet das Online-Fenster und stellt alle Messungen des aktuellen Tages dar, siehe Abbildung 47. Durch Doppelklicken auf die Spaltenüberschriften kann die Tabelle beliebig sortiert werden.



Methode	Methodenname	Probenort	Datum	Zeit	Zaehler	Messwert	Einheit	Bemerkung
0291	CSB1500	Koeln	10.07.2012	12:30	15	1361	mg/L O2	
0291	CSB1500	Koeln	10.07.2012	12:30	14	1035	mg/L O2	
0291	CSB1500	Koeln	10.07.2012	12:29	13	0	mg/L O2	<100 (~7)
0291	CSB1500	Koeln	10.07.2012	12:29	12	157	mg/L O2	
0291	CSB1500	Koeln	10.07.2012	12:29	11	305	mg/L O2	
0291	CSB1500	Koeln	10.07.2012	12:29	10	451	mg/L O2	
0291	CSB1500	Koeln	10.07.2012	12:29	9	1041	mg/L O2	
0291	CSB1500	Koeln	10.07.2012	12:29	8	604	mg/L O2	
0291	CSB1500	Koeln	10.07.2012	12:29	7	745	mg/L O2	
0291	CSB1500	Koeln	10.07.2012	12:29	6	894	mg/L O2	
0291	CSB1500	Koeln	10.07.2012	12:29	5	1049	mg/L O2	
0291	CSB1500	Koeln	10.07.2012	12:28	4	1051	mg/L O2	
0291	CSB1500	Koeln	10.07.2012	12:28	3	1176	mg/L O2	
0291	CSB1500	Koeln	10.07.2012	12:28	2	1319	mg/L O2	
0291	CSB1500	Koeln	10.07.2012	12:28	1	1465	mg/L O2	

Abb. 47 : Tagesbericht, alle Messungen des aktuellen Tages

Soll ein Bericht über einen bereits vergangenen Tag erstellt werden, halten Sie während des Klickens auf den Menübefehl **Tagesbericht** die [STRG]-Taste gedrückt. Die Software öffnet eine Kalenderfunktion, in der der gewünschte Tag ausgewählt werden kann, siehe Abbildung 48.

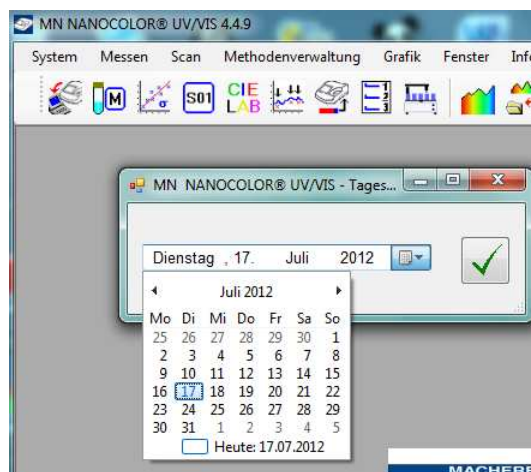


Abb. 48 : Kalender zur Auswahl des Berichtsdatums

Klicken Sie nun auf den Berichts-Schalter  lässt sich der Tagesbericht ausdrucken. Das Ergebnis sieht wie in Abbildung 49 gezeigt aus.



MACHEREY-NAGEL



Filtration · Rapid Tests · Water Analysis · Chromatography · Bioanalysis
 Filtration · Schnellteste · Wasseranalytik · Chromatographie · Bioanalytik

Prüfbericht

17.07.2012

NANOCOLOR® ^{UV}/_{VIS}

Datum : 10.07.2012

Seriennummer : NVIS0121

Legende : T Probe ist trüb, R Außerhalb des Messbereichs, 20 außerhalb des 20%-80% Bereichs

Nr.	Kenngroße	Probenort	Anwender	Messwert	Bemerkung	Status
0291	CSB1500	Koeln	Reinarts	1361 mg/L O2		T20
0291	CSB1500	Koeln	Reinarts	1035 mg/L O2		ok
0291	CSB1500	Koeln	Reinarts	0 mg/L O2	<100 (~7)	R
0291	CSB1500	Koeln	Reinarts	157 mg/L O2		20
0291	CSB1500	Koeln	Reinarts	305 mg/L O2		20
0291	CSB1500	Koeln	Reinarts	451 mg/L O2		ok
0291	CSB1500	Koeln	Reinarts	1041 mg/L O2		ok
0291	CSB1500	Koeln	Reinarts	604 mg/L O2		ok
0291	CSB1500	Koeln	Reinarts	745 mg/L O2		ok
0291	CSB1500	Koeln	Reinarts	894 mg/L O2		ok
0291	CSB1500	Koeln	Reinarts	1049 mg/L O2		ok
0291	CSB1500	Koeln	Reinarts	1051 mg/L O2		T
0291	CSB1500	Koeln	Reinarts	1176 mg/L O2		ok
0291	CSB1500	Koeln	Reinarts	1319 mg/L O2		20
0291	CSB1500	Koeln	Reinarts	1465 mg/L O2		20

MACHEREY-NAGEL GmbH & Co. KG Neumann-Neander-Str. 6-8 · D-52355 Düren · Germany

Tel.: +49 (0) 2421 969 0 · Fax: +49 (0) 2421 969 199 · info@mn-net.com

Software V 4.4 9 9993

VAL-NB-WIECZOR4(Wieczorek)07-41:38

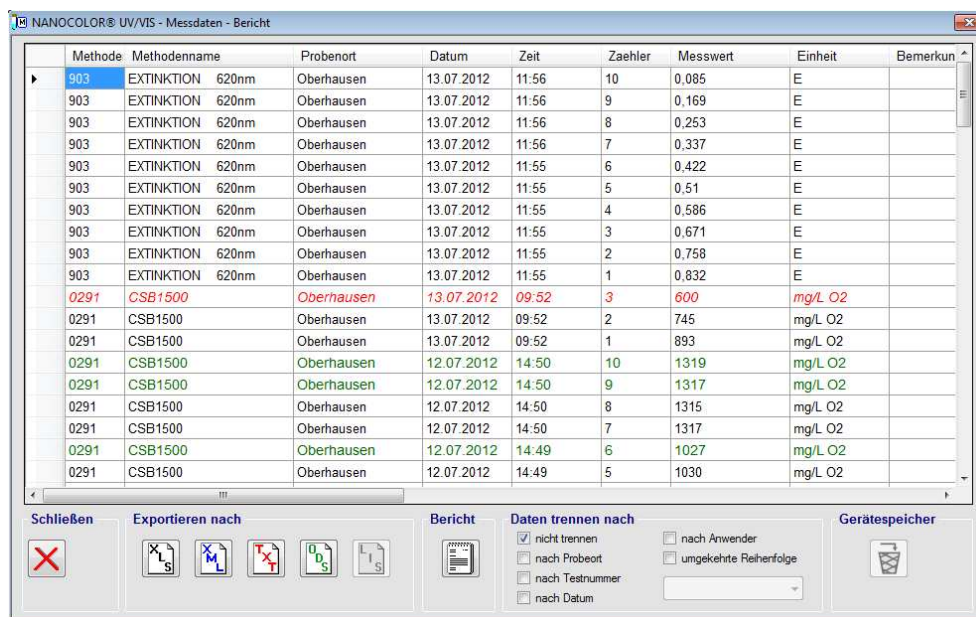
www.mn-net.com

Seite 1 / 1

Abb. 49 : Tagesbericht

3.16.2 Bericht mit Ganglinie

Wählen Sie aus dem System-Menü den Menübefehl **Bericht**. Die Software öffnet das Online-Fenster und zeigt alle Messungen an, die mit dem verwendeten System durchgeführt wurden, siehe Abbildung 50.

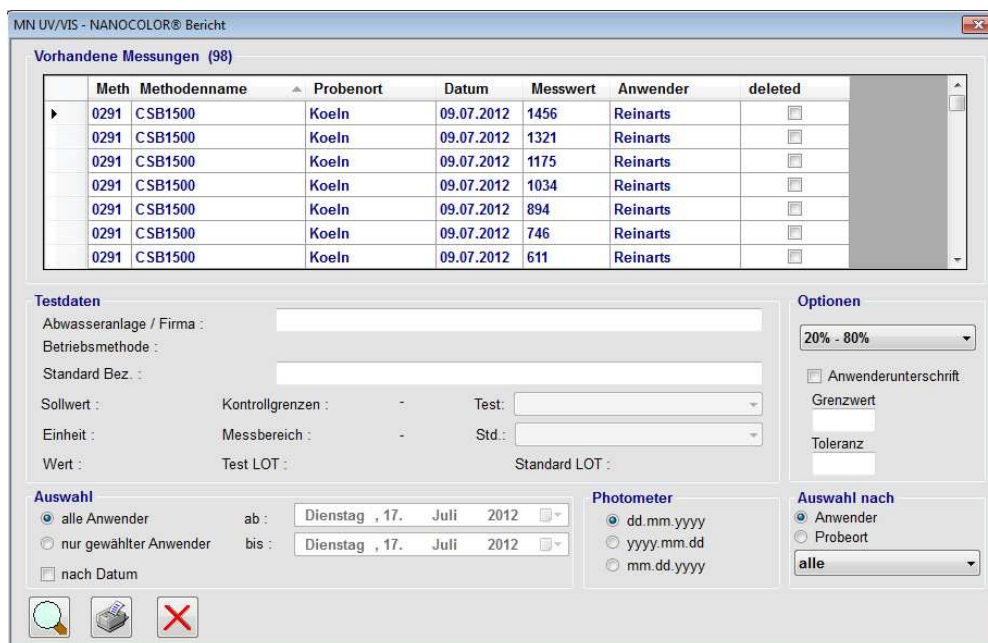


Methode	Methodenname	Probenort	Datum	Zeit	Zaehler	Messwert	Einheit	Bemerkun
903	EXTINKTION	620nm	Oberhausen	13.07.2012	11:56	10	0,085	E
903	EXTINKTION	620nm	Oberhausen	13.07.2012	11:56	9	0,169	E
903	EXTINKTION	620nm	Oberhausen	13.07.2012	11:56	8	0,253	E
903	EXTINKTION	620nm	Oberhausen	13.07.2012	11:56	7	0,337	E
903	EXTINKTION	620nm	Oberhausen	13.07.2012	11:55	6	0,422	E
903	EXTINKTION	620nm	Oberhausen	13.07.2012	11:55	5	0,51	E
903	EXTINKTION	620nm	Oberhausen	13.07.2012	11:55	4	0,586	E
903	EXTINKTION	620nm	Oberhausen	13.07.2012	11:55	3	0,671	E
903	EXTINKTION	620nm	Oberhausen	13.07.2012	11:55	2	0,758	E
903	EXTINKTION	620nm	Oberhausen	13.07.2012	11:55	1	0,832	E
0291	CSB1500	Oberhausen	13.07.2012	09:52	3	600	mg/L O2	
0291	CSB1500	Oberhausen	13.07.2012	09:52	2	745	mg/L O2	
0291	CSB1500	Oberhausen	13.07.2012	09:52	1	893	mg/L O2	
0291	CSB1500	Oberhausen	12.07.2012	14:50	10	1319	mg/L O2	
0291	CSB1500	Oberhausen	12.07.2012	14:50	9	1317	mg/L O2	
0291	CSB1500	Oberhausen	12.07.2012	14:50	8	1315	mg/L O2	
0291	CSB1500	Oberhausen	12.07.2012	14:50	7	1317	mg/L O2	
0291	CSB1500	Oberhausen	12.07.2012	14:49	6	1027	mg/L O2	
0291	CSB1500	Oberhausen	12.07.2012	14:49	5	1030	mg/L O2	

Abb. 50 : Alle Messungen aus der NANOCOLOR®-Datenbank



Klicken Sie nun auf den Berichts-Schalter. Die Software öffnet das IQK-Fenster, siehe Abbildung 51.



Vorhandene Messungen (98)

Meth	Methodenname	Probenort	Datum	Messwert	Anwender	deleted
0291	CSB1500	Koeln	09.07.2012	1456	Reinarts	☐
0291	CSB1500	Koeln	09.07.2012	1321	Reinarts	☐
0291	CSB1500	Koeln	09.07.2012	1175	Reinarts	☐
0291	CSB1500	Koeln	09.07.2012	1034	Reinarts	☐
0291	CSB1500	Koeln	09.07.2012	894	Reinarts	☐
0291	CSB1500	Koeln	09.07.2012	746	Reinarts	☐
0291	CSB1500	Koeln	09.07.2012	611	Reinarts	☐

Testdaten

Abwasseranlage / Firma :
Betriebsmethode :
Standard Bez. :
Sollwert : Kontrollgrenzen : - Test: -
Einheit : Messbereich : - Std. : -
Wert : Test LOT : Standard LOT :

Auswahl

☒ alle Anwender ab : Dienstag , 17. Juli 2012
☐ nur gewählter Anwender bis : Dienstag , 17. Juli 2012
☐ nach Datum

Photometer

☒ dd.mm.yyyy
☐ yyyy.mm.dd
☐ mm.dd.yyyy

Optionen

20% - 80%
☐ Anwenderunterschrift
Grenzwert
Toleranz

Auswahl nach

☒ Anwender
☐ Probeort
alle

Abb. 51 : IQK-Fenster mit Messdaten



Im Gegensatz zur IQK-Funktion (siehe Kapitel 3.15.2) werden hier keine Standard-Messungen angezeigt, sonder nur normale Messungen!

Wie in Kapitel 3.15.2 beschrieben, wählen Sie den Test, für den ein Bericht erstellt werden soll, aus der Tabelle im oberen Bereich des Fensters durch Anklicken einer Zeile aus. Über die Funktionen im Rahmen **Auswahl nach** können Sie die Messungen auf bestimmte Probeorte oder Anwender beschränken. Die Liste in diesem Rahmen wird mit den korrespondierenden Daten aus der Datenbank gefüllt, entsprechend der Einstellung der Funktionen **Anwender** bzw. **Probeort**. Wie in Kapitel 3.15.2 bei der IQK-Karte 4 beschrieben können Sie auch hier den Bericht auf ein Bestimmtes Datum bzw. Zeitintervall über die Funktionen im Rahmen **Auswahl** beschränken.

Der Bericht läßt sich weiter über die Funktionen im Rahmen **Optionen** anpassen. Mit der Liste im oberen Bereich des Rahmens lassen sich drei unterschiedliche Auswertungsmethoden einstellen, siehe Abbildung 52:

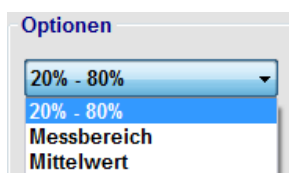


Abb. 52 : Auswertungsmethoden der Berichtsfunktion

20% - 80 %

Bei dieser Auswertung werden alle Messungen als fehlerhaft in **roter** Farbe markiert, die kleiner als 20% des unteren Messbereichs bzw. größer als 80% des oberen Messbereichs sind. In **orange** werden Messungen markiert, bei denen eine Trübung gemessen wurde (soweit die Funktion im Photometer eingeschaltet war).

Messbereich

Bei dieser Auswertung werden alle Messungen als fehlerhaft in **roter** Farbe markiert, die kleiner als der untere Messbereich bzw. größer als der obere Messbereich sind. In **orange** werden Messungen markiert, bei denen eine Trübung gemessen wurde (soweit die Funktion im Photometer eingeschaltet war).

Mittelwert

Bei dieser Auswertung werden alle Messungen als fehlerhaft in **roter** Farbe markiert, die kleiner als der Mittelwert aller selektierter Messungen minus die doppelte Standardabweichung sind bzw. größer als der Mittelwert plus die doppelte Standardabweichung sind. In **orange** werden Messungen markiert, bei denen eine Trübung gemessen wurde (soweit die Funktion im Photometer eingeschaltet war).

Die Auswertung nach **Messbereich** erlaubt weiterhin, über die Textfelder **Grenzwert** und **Toleranz** eigene Grenzen zu definieren. Stehen in den Feldern **Grenzwert** und **Toleranz** gültige Werte, werden alle Messungen als fehlerhaft in **roter** Farbe markiert, die kleiner als der Grenzwert minus Toleranz bzw. größer als der Grenzwert plus Toleranz sind.

Abbildung 53 zeigt den fertigen Bericht.



4 Teil 2 : Scan Funktionen

Die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** bietet Ihnen vielfältige Funktionen zum Erstellen, Bearbeiten, Vermessen und Speichern von Wellenlängen-Scans. Das folgende Kapitel 4.1 beschreibt die Arbeitsweise der Software und zeigt die einzelnen Elemente des Scan-Fensters.



Um die Bearbeitungsphilosophie dieser Software zu verstehen, sollten Sie sich Kapitel 4.1 aufmerksam durchlesen!

Die Beschreibung der einzelnen Funktionen erfolgt später in Kapitel 4.2.

4.1 Umgang mit Wellenlängen-Scans

Um das Scan-Fenster zu öffnen, müssen Sie einen Scan erstellen oder einen bereits gespeicherten Scan öffnen. Der **NANOCOLOR® Spektrometer Software** liegen einige Beispieldateien bei. Klicken Sie also auf den Menübefehl **Scan/Scan öffnen**



oder den Schalter

Wählen Sie in dem Dateiauswahlfenster die Datei *example_ph76_scan.nc* aus dem Verzeichnis *example* im Installationsverzeichnis der **NANOCOLOR® Spektrometer Software**. Das Scan-Fenster wird geöffnet und der Scan in **roter Farbe** gezeichnet wie in Abbildung 54 zu sehen ist. Beachten Sie bitte, dass dieser Scan Beschriftungen enthält.



Die Farbe des Aktuellen Scans lässt sich über den Menübefehl **System/Einstellungen** ändern.

Eine Scan-Datei (*.nc) kann mehrere Scans enthalten.

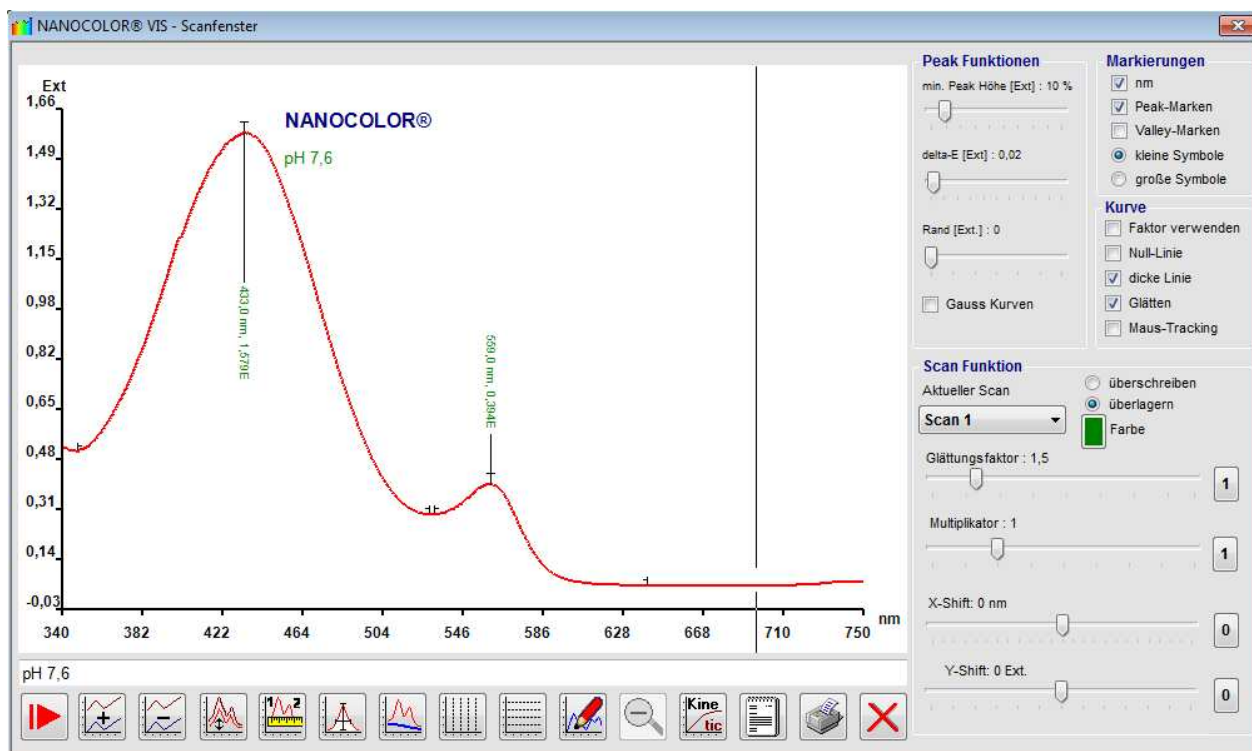


Abb. 54 Anzeige eines Scans

Die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** kann viele Scans gleichzeitig darstellen. Die Anzahl der darstellbaren Scans wird lediglich durch den Speicher Ihres Computers beschränkt. Jeder weitere Scan, den Sie öffnen oder neu erstellen, wird in der gleichen Umgebung verwaltet, wie der obige Beispiel-Scan. Die Art der Darstellung hängt von den Eigenschaften des Scan-Fensters ab. Die Statuszeile im unteren Bereich des Hauptfensters gibt Auskunft darüber, was im Scan-Fenster dargestellt wird (Abbildung 55).

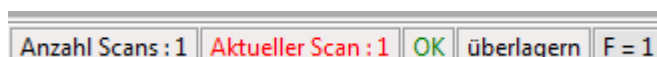


Abb. 55 Statuszeile mit Scan-Informationen

Im ersten Feld lesen Sie „Anzahl Scans : 1“. Die Datei *example_ph76_scan.nc* enthält nur einen Scan. Da es nur einen Scan gibt, ist auch „Aktueller Scan : 1“ gleich 1 gesetzt. Öffnen Sie nun die Datei *example_ph76_2_scan.nc*. Die Software fragt Sie nun, ob der Aktuelle Scan erhalten bleiben oder gelöscht werden soll, siehe Abbildung 56.

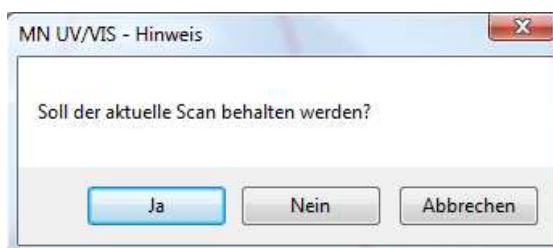


Abb. 56 : Bearbeitungsmodus neuer Scan

Wenn Sie die Frage mit dem Schalter **Ja** beantworten, werden alle Scans aus der Datei example_2.cdf in die gleiche Umgebung geladen wie der Scan aus der ersten Beispieldatei. Wenn Sie die Frage mit **Nein** beantworten, wird der erste Scan geschlossen und die Datei example_2.cdf in eine neue, leere Umgebung geladen.



Handelt es sich bei dem ersten Scan um einen neu erstellten Scan, der noch nicht gespeichert wurde, wird er verworfen, wenn Sie einen weiteren Scan öffnen oder erstellen und mit Nein antworten. Die Daten des ersten Scans gehen dann verloren!

Klicken Sie nun auf den Schalter **Ja**. Ein zweiter Scan wird in das Scan-Fenster gezeichnet. Der erste Scan ist nun in **grüner Farbe** gezeichnet, der zweite in **roter Farbe** (Abbildung 57). Die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** ordnet automatisch jedem geöffneten Scan eine Farbe zu: dem ersten **grün**, dem zweiten **türkis** usw. Der gerade aktive Scan, der sog. „Aktuelle Scan“ wird immer in **roter Farbe** dargestellt, daher ist der zweite Scan im Bild (noch) nicht türkis sondern rot. Jede Aktion, die Sie an einem Scan durchführen, wie z.B. Integrieren, Vermessen, Beschriften usw. bezieht sich **immer nur auf den Aktuellen Scan**. Nach dem Öffnen oder Erstellen eines neuen Scans ist automatisch der jeweils letzte Scan der Aktuelle Scan. Daher werden auch keine Beschriftungen mehr gezeigt, da der zweite Scan keine Beschriftungen enthält.

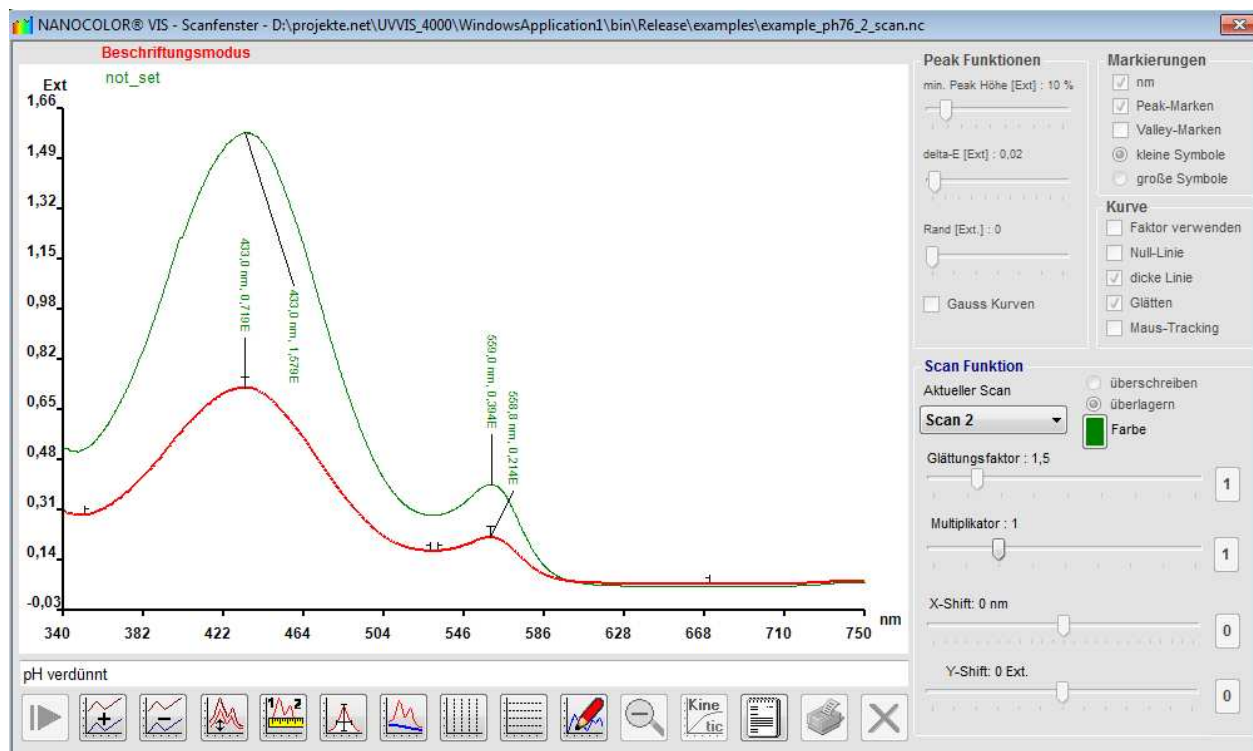


Abb. 57: Ein zweiter Scan wurde geöffnet

Die Statuszeile des Hauptfensters (Abbildung 58) zeigt den neuen Scan an.

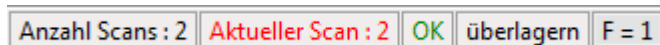


Abb. 58: Information in der Statuszeile

Um den Aktuellen Scan zu ändern, wählen Sie einfach aus der Liste **Aktueller Scan** im Funktionsrahmen **Scan Funktion**, die in Abbildung 59 gezeigt wird, eine andere Nummer aus.

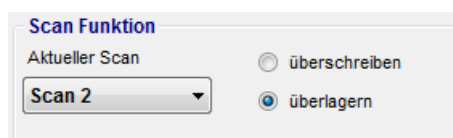


Abb. 59: Auswahlliste Aktueller Scan

Schalten Sie nun diese Liste wieder auf Scan 1. Abbildung 60 zeigt die Änderungen in der Zeichenfläche: der erste Scan ist wieder **rot** (mit Beschriftungen) und der zweite Scan ist jetzt **türkis**.

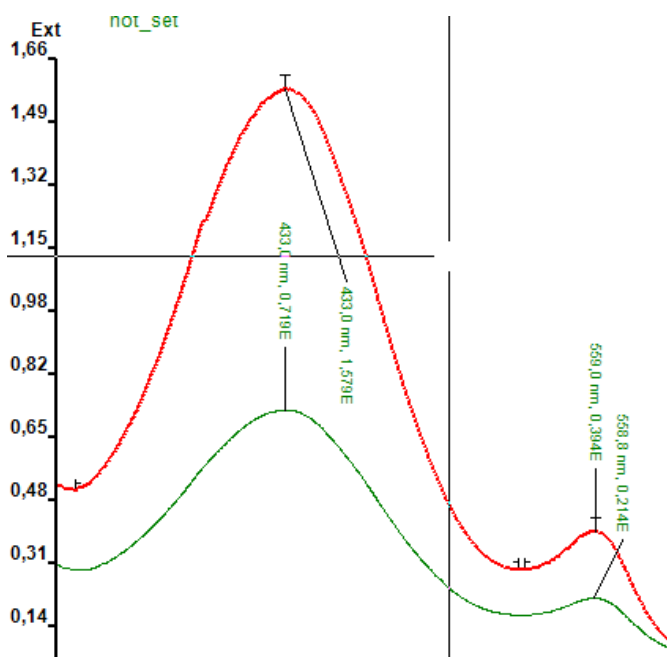


Abb. 60: Geänderter Aktueller Scan (Ausschnitt)

Die Größe des Scans, also der Wellenlängenbereich bei unterschiedlichen Scans, spielt keine Rolle: die Software skaliert die Grafik immer so, dass alle Scans im Bild ohne Verlust dargestellt werden können, solange die Funktion **automatische Skalierung** in den Einstellungen nicht abgeschaltet wurde.

Den Abbildungen 58 und 59 können Sie weiterhin entnehmen, dass sich das Scan-Fenster im Überlagerungsmodus befindet. Das bedeutet, dass alle Scans einer Arbeitsumgebung in die gleiche Grafik gezeichnet werden und sich überlagern. Im Funktionsrahmen **Scan Funktion** (Abbildung 57, Seite 56) sehen Sie die zwei

Optionsschalter **überlagern** und **überschreiben**. Im Überschreibmodus wird immer nur ein Scan in die Grafik gezeichnet. Mit der Liste **Aktueller Scan** im Funktionsrahmen **Scan Funktion**, können Sie dann durch die einzelnen Scans seitenweise blättern.

Sie können beliebige Bereiche eines Scans vergrößern. Ziehen Sie dazu einfach wie in Abbildung 61 einen Rahmen mit der Maus auf.

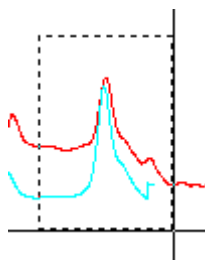


Abb. 61: Zoom-Rahmen mit der Maus ziehen

Wie Abbildung 62 zeigt, werden alle Scans des Arbeitsbereiches vergrößert dargestellt, wenn sich das Fenster im Überlagerungsmodus befindet.

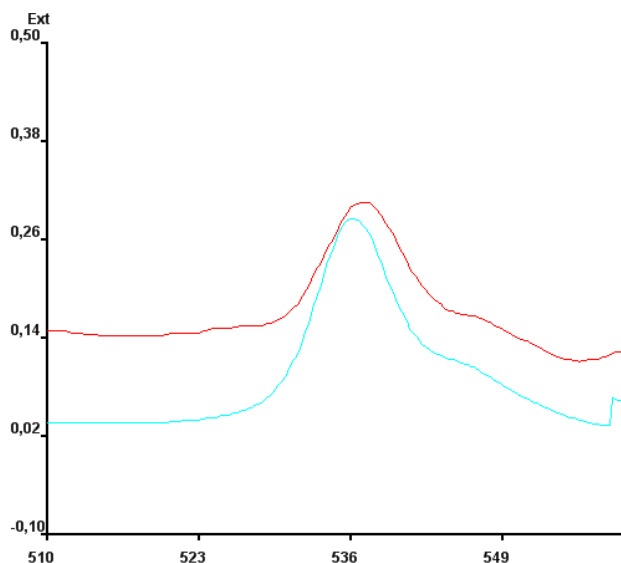


Abb. 62: Vergrößerter Scanausschnitt

Um den Zoom-Modus wieder zu verlassen, klicken Sie einfach auf die Grafik oder auf



den Auszoomen-Schalter. Wenn Sie die Maus über den Scan bewegen, wird die aktuelle Mausposition in Nanometern, Extinktion und Transmission in der Statuszeile des Hauptfensters angezeigt (siehe Abbildung 63).

475.4 nm 0.183 Ext. 65.615 T [%]

Abb. 63 Mauspositions-Informationen in der Statuszeile

Die aktuelle Mausposition wird Ihnen auch in der Grafik bei Verwendung des großen Fadenkreuzes eingeblendet (Abbildung 64), solange diese Funktion in den Einstellungen nicht abgeschaltet ist.

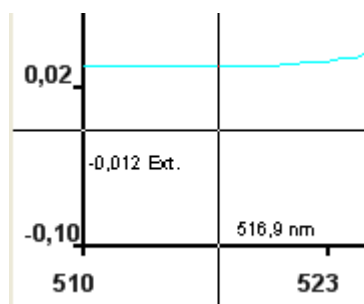


Abb. 64: Mauspositions-Informationen in der Grafik

Im folgenden Kapitel werden die einzelnen Funktionen ausführlich beschrieben.

4.2 Funktionen des Scan- und Grafik-Menüs

Dieses Kapitel beschreibt die Funktionen des Hauptfenster-Menüs und die graphischen Schalter in der Werkzeugleiste am oberen Fensterrand.

4.2.1 Menüfunktion **Scan/Scan ausführen**, Schalter

Der Menübefehl **Scan/Scan ausführen** startet einen Scanvorgang.



Diese Funktion wird nur ausgeführt, wenn ein NANOCOLOR®^{UV/VIS} Photometer an den Computer angeschlossen wurde und eingeschaltet ist!

Die Software öffnet das Experiment-Fenster. Dort können bzw. müssen Sie weitergehende Angaben zu der Probe eingeben, siehe Abbildung 65. Die Daten im Rahmen **Scan Informationen** dienen zur Dokumentation des Scans und werden beim Speichervorgang mit in der Scandatei abgelegt.

Die Felder des Funktionsrahmens **Scan-Bereich** müssen von Ihnen ausgefüllt werden. Geben Sie in die Felder **ab Wellenlänge [nm]** und **bis Wellenlänge [nm]** den Bereich an, der gescannt werden soll. Wenn Sie den Schalter **Messung gegen Luft** aktivieren, wird der Nullabgleich ohne NULL-Küvette durchgeführt. **Müssen Sie eine NULL-Küvette oder einen Blindwert berücksichtigen, darf dieser Haken nicht gesetzt sein.**

Die Optionen des Rahmens **Scan Auflistung** sind nur aktiv, wenn sich bereits ein Scan in der Arbeitsumgebung befindet. Dann können Sie bestimmen, ob der neue Scan der Arbeitsumgebung zugefügt wird oder ob eine neue, leere Arbeitsumgebung erstellt wird, d, h, die alten Scans geschlossen werden.

Die Textfelder **Allgemeiner Titel** und **Proben-ID** oder **Bezeichnung** müssen ausgefüllt werden. Der Allgemeine Titel gilt für alle Scans einer Messreihe, Titel, ID und Bezeichnung nur für den aktuellen (oder ersten) Scan. Pflichtfelder erkennen Sie an einem roten Stern * hinter dem Feld. Stellen Sie im Feld **Küvette** den von Ihnen verwendeten Küvetten-Typ ein.

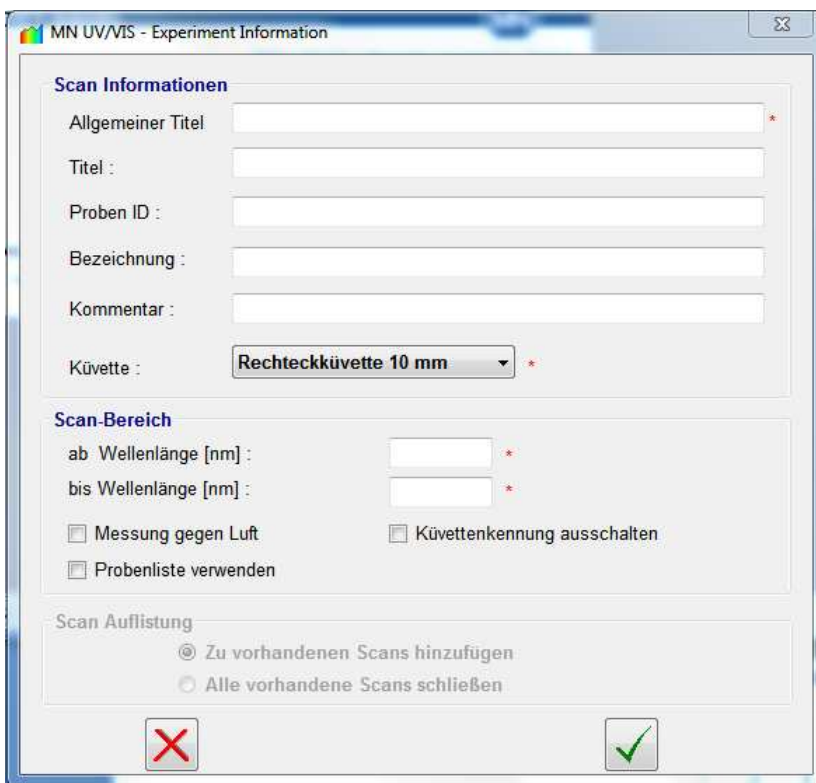


Abb. 65: Experiment-Fenster, Grunddaten des Scans

Der allgemeine Titel und die Bezeichnung werden automatisch als Beschriftung in den Scan eingeblendet.



Der Schalter schließt das Experiment-Fenster, ohne die Messung auszulösen.



Klicken Sie nun auf den Schalter, um die Messung zu starten. Die Software fragt Sie nun nach der NULL-Küvette, siehe Abbildung 66. Setzen Sie die NULL-Küvette in das Photometer ein. Bei Verwendung einer anderen Küvette als im Feld **Küvette** angegeben, erhalten Sie eine Fehlermeldung („Falsche Küvette“). Befindet

sich 2 Minuten nach dem Anzeigen von Abbildung 66 keine Küvette im Photometer, wird die Messung abgebrochen.

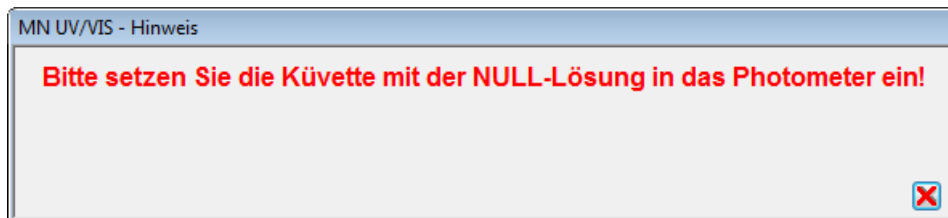


Abb. 66: Meldung NULL-Küvette

Alternativ dazu erhalten Sie bei aktiver Funktion **Messung gegen Luft** eine Meldung, die Sie auffordert, auf das Ende der Luftmessung zu warten.

Nach dem Messen der NULL-Küvette werden Sie von der Software aufgefordert, die Küvette zu entfernen, siehe Abbildung 67.



Abb. 67: Meldung NULL-Küvette entnehmen

Ziehen Sie die NULL-Küvette aus dem Photometer. Befindet sich 2 Minuten nach dem Anzeigen von Abbildung 67 noch eine Küvette im Photometer, wird die Messung abgebrochen. Die Software fragt jetzt nach der Probenküvette (Abbildung 68).

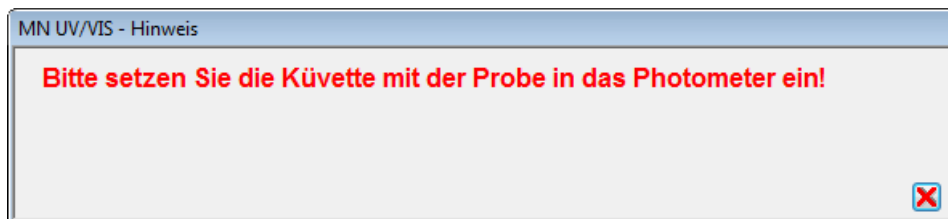


Abb. 68: Meldung Probe einsetzen

Setzen Sie die Küvette mit Ihrer Probe in das Photometer. Befindet sich 2 Minuten nach dem Anzeigen von Abbildung 67 keine Küvette im Photometer, wird die Messung abgebrochen. Während der Datenübertragung wird Ihnen in der Statuszeile der Software die übertragene Datenmenge angezeigt, wie Abbildung 69 zeigt.

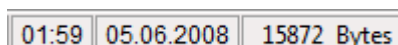


Abb. 69: Übertragene Bytes



Nach der Datenübertragung wird das Scan-Fenster geöffnet und der Scan graphisch dargestellt.

4.2.2 Menüfunktion **Scan/Null messen**

Diese Funktion erlaubt es Ihnen, die Nullwerte eines Scans neu zu bestimmen. Setzen Sie die NULL-Küvette in das Photometer ein und klicken Sie auf den Menübefehl **Scan/Null messen**. Das Photometer fährt den vorher über die Funktion **Scan/Scan ausführen** festgelegten Bereich ab und misst die Nullwerte neu.

Sie können diese Funktion auch verwenden, wenn Sie mehrere Proben im gleichen Wellenlängenbereich vergleichen möchten, aber verschiedene NULL-Lösungen verwenden müssen, siehe auch Kapitel 4.2.3. Diese Funktion ist nur aktiv, wenn bereits ein Scan erstellt wurde.

4.2.3 Menüfunktion **Scan/Neu Messen**, Schalter



Diese Funktion erlaubt es Ihnen, den über die Funktion **Scan/Scan ausführen** festgelegten Scan erneut durchzuführen. Setzen Sie die Küvette in das Photometer ein, die Ihre Probe enthält und klicken Sie auf den Menübefehl **Scan/Neu messen**. Das Photometer startet den Scan erneut.

Sie können auch eine andere Probe einsetzen und im gleichen Wellenlängenbereich scannen, um zwei verschiedene Scans zu vergleichen. Wird für die zweite Probe ein anderer NULL-Abgleich benötigt, lesen Sie bitte Kapitel 4.2.2. Diese Funktion ist nur aktiv, wenn bereits ein Scan erstellt wurde.

4.2.4 Menüfunktion **Scan/Scan öffnen**, Schalter



Der Menübefehl **Scan/Scan öffnen** öffnet einen oder mehrere bereits in einer cdf-Datei gespeicherten Scans wie in Kapitel 4.1 beschrieben. Es öffnet sich ein Dateiauswahlfenster. Wählen Sie die zu öffnende Datei und klicken Sie auf den Schalter **Öffnen**.

4.2.5 Menüfunktion **Scan/Scan speichern**, Schalter



Der Menübefehl **Scan/Scan speichern** speichert **alle Scans der aktuellen Arbeitsumgebung** in einer nc-Datei. Nach dem Klicken auf den Menübefehl öffnet sich ein Dateiauswahlfenster, siehe Abbildung 70.

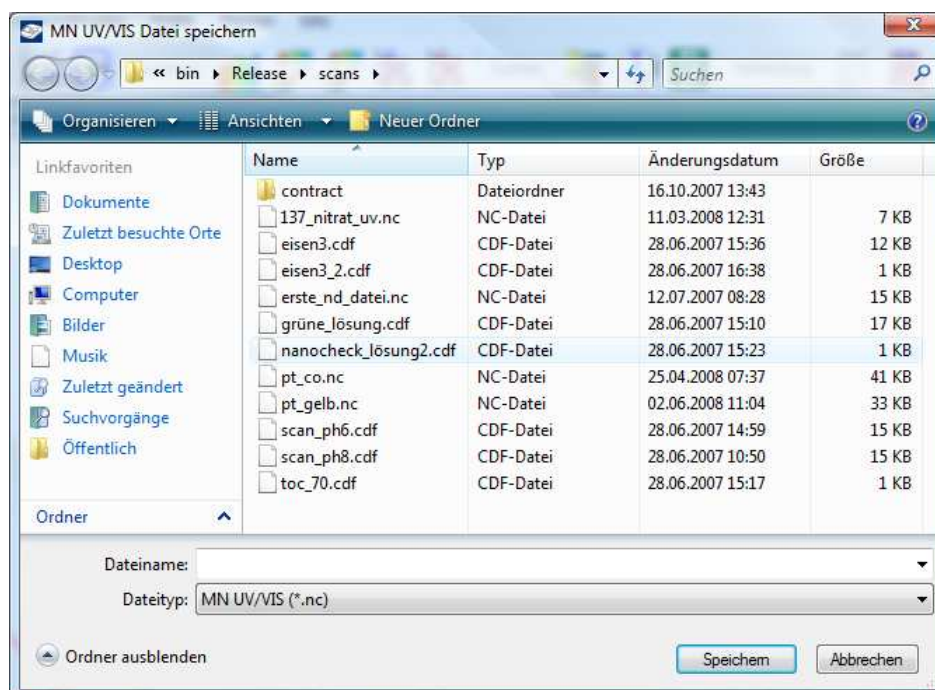


Abb. 70: Scan Speichern, Datei auswählen

Wählen Sie einen gültigen Dateipfad und einen Dateinamen aus. Es ist **nicht** möglich, eine bestehende Datei zu überschreiben. Klicken Sie auf den Schalter **Speichern**. Die Dateiauswahl wird geschlossen und das Experiment-Fenster wird geöffnet, siehe Abbildung 71. Zu jedem Scan müssen Sie hier einen Titel vergeben sowie Probenbezeichnung, Probennummer sowie Angaben zur Firma eintragen. Haben Sie mehrere Scans erstellt, können Sie die weiteren Scans beschriften, in dem Sie die Scan-Nummer aus der Liste **Daten für Scan Nr** ändern.

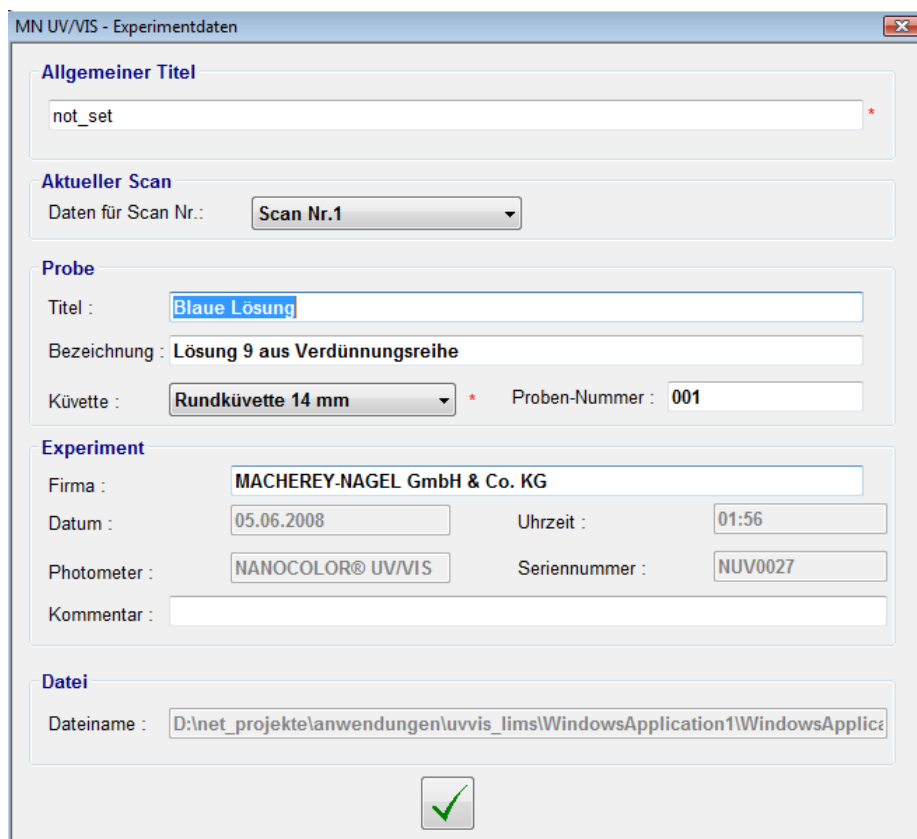


Abb. 71: Speichern der Scans

Die Felder **Titel**, **Bezeichnung**, **Küvette**, **Probennummer** und **Firma** müssen gefüllt werden, wenn die Sicherheitseinstellung **Hoch** gewählt wurde. Pflichtfelder erkennen Sie an einem roten Stern * rechts neben dem Feld.

Weitere Informationen zum verwendeten cdf-Format entnehmen Sie bitte dem Anhang, Kapitel .8.4.

4.2.6 Menüfunktion **Scan/Scan drucken**

Der Menübefehl **Scan/Scan drucken** druckt alle Scans der aktuellen Arbeitsumgebung mit ihren Zusatzinformationen aus.

4.2.7 Menüfunktion **Scan/Scan Methoden**

Um diese Funktion auszuführen, muss ein Photometer **angeschlossen und eingeschaltet** sein. Unter der Menüfunktion **Scan/Scan Methoden** können Sie regelmäßig auftretende Arbeiten als eigenständige Methode speichern. Scan Methoden sind eine Unterrubrik der Photometer-Sondermethoden. Bitte lesen Sie Kapitel 5.

4.2.8 Menüfunktion **Scan/Scan exportieren**

Die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** ermöglicht Ihnen den Export der Scan-Informationen in andere Formate. Wie Abbildung 72 zeigt, können Sie zwischen vier Formaten wählen:

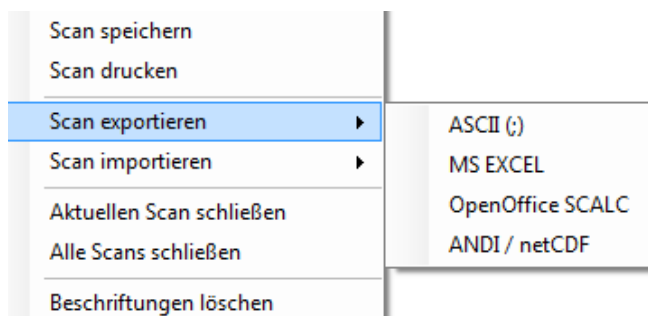


Abb. 72: Export-Formate



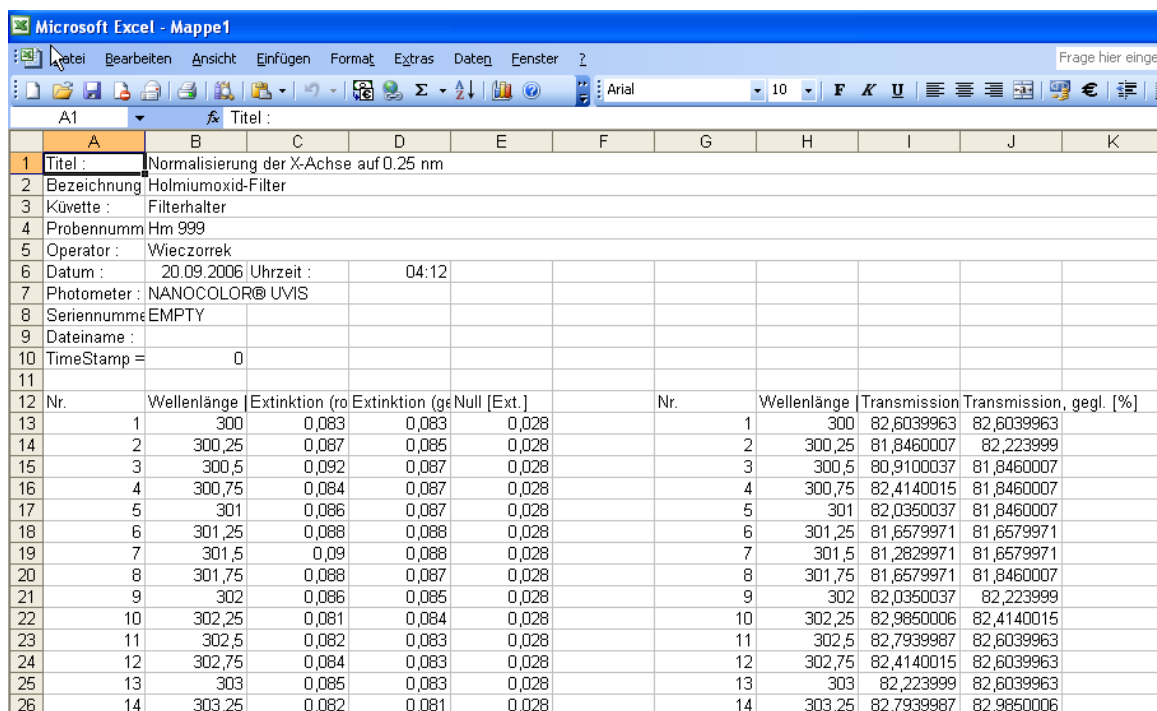
Im Gegensatz zur Funktion **Scan/Speichern** bezieht sich die Export-Funktion nur auf den aktuellen Scan, es wird nur ein Scan übertragen!

4.2.8.1 Menüfunktion **Scan/Scan exportieren/ASCII (;)**

Die Menüfunktion **Scan/Scan exportieren/ASCII (;)** erstellt eine semikolon-formatierte Textdatei (SDF-Format), die alle relevanten Daten des Scans enthält. In den Dateikopf werden die Zusatzinformationen untereinander gestellt. Darauf folgen die Datentabellen. Eine genaue Beschreibung des Formates finden Sie im Anhang unter **Kapitel 8.3**.

4.2.8.2 Menüfunktion **Scan/Scan exportieren/MS EXCEL**

Die Menüfunktion **Scan/Scan exportieren/MS EXCEL** erstellt ein Microsoft EXCEL Arbeitsblatt. Der Tabellenkopf enthält alle Zusatzinformationen wie Anwender, Computernamen, Probenbezeichnung usw. Dann folgen in Tabellenform die Datenfelder Laufende Nummer, Wellenlänge; Extinktion gemessen, Extinktion geglättet, Extinktion der NULL-Linie. Daran schließt sich weiter rechts eine zweite Tabelle mit den Datenfeldern Nummer, Wellenlänge; Transmission gemessen, Transmission geglättet, Transmission der NULL-Linie. Die Transmission wird in % angegeben. Abbildung 73 zeigt ein Beispiel, das mit Hilfe der Datei example_3.cdf erstellt wurde. Das Erstellen sehr umfangreicher EXCEL Tabellen kann einige Zeit in Anspruch nehmen. Bitte achten Sie auf die Fortschrittsanzeige in der Statuszeile des Hauptfensters (siehe Abbildung 74).



Nr.	Wellenlänge	Extinktion (ro	Extinktion (ge Null [Ext.]	Nr.	Wellenlänge	Transmission	Transmission, gegl. [%]
1	300	0,083	0,083	1	300	82,6039963	82,6039963
2	300,25	0,087	0,085	2	300,25	81,8460007	82,223999
3	300,5	0,092	0,087	3	300,5	80,9100037	81,8460007
4	300,75	0,084	0,087	4	300,75	82,4140015	81,8460007
5	301	0,086	0,087	5	301	82,0350037	81,8460007
6	301,25	0,088	0,088	6	301,25	81,6579971	81,6579971
7	301,5	0,09	0,088	7	301,5	81,2829971	81,6579971
8	301,75	0,088	0,087	8	301,75	81,6579971	81,8460007
9	302	0,086	0,085	9	302	82,0350037	82,223999
10	302,25	0,081	0,084	10	302,25	82,9850006	82,4140015
11	302,5	0,082	0,083	11	302,5	82,7939987	82,6039963
12	302,75	0,084	0,083	12	302,75	82,4140015	82,6039963
13	303	0,085	0,083	13	303	82,223999	82,6039963
14	303,25	0,082	0,081	14	303,25	82,7939987	82,9850006

Abb. 73: Export in das EXCEL Format



Abb. 74: Fortschrittsanzeige in der Statuszeile

4.2.8.3 Menüfunktion **Scan/Scan exportieren/OpenOffice SCALC**

Die Menüfunktion **Scan/Scan exportieren/OpenOffice SCALC** arbeitet genau so wie die Funktion **Scan/Scan exportieren/MS EXCEL**, Kapitel 4.2.8.2. Das Arbeitsblatt wird aber in dem OpenOffice Programm SCALC erstellt. Das Erstellen sehr umfangreicher SCALC Tabellen kann einige Zeit in Anspruch nehmen. Bitte achten Sie auf die Fortschrittsanzeige in der Statuszeile des Hauptfensters (siehe Abbildung 74).

4.2.8.4 Menüfunktion **Scan/Scan exportieren/ANDI / netCDF**

Die Menüfunktion **Scans/Scan exportieren/ANDI / netCDF** exportiert den Aktuellen Scan in das ANDI-Format (ANDI = Analytical Data Interchange). Das ANDI-Format ist in den **Normen ASTM E 1947 – 98 (2004)** und **ASTM E 1948 – 98 (2004)** definiert und wird für chromatographische und spektroskopische Daten als plattform-übergreifendes Datenformat eingesetzt. Weitere Informationen entnehmen Sie bitte dem Anhang in **Kapitel 8.4**.

4.2.9 Menüfunktion *Scan/Scan importieren*

Diese Menüfunktion erlaubt Ihnen, UV/VIS-Wellenlängenscans aus anderen Quellen zu importieren. In der gegenwärtigen Version ist nur der Import Scans möglich, die im ANDI – Format oder als SECOMAM Scan Datei vorliegen.

4.2.10 Menüfunktion *Scan/Aktuellen Scan schließen* , Schalter



Die Menüfunktion *Scans/Aktuellen Scan schließen* des Hauptfensters schließt den aktuellen Scan und entfernt ihn aus der Arbeitsumgebung, unabhängig davon, ob das Scan-Fenster sichtbar ist oder nicht. Der jeweils logisch letzte verbliebene Scan wird zum neuen aktuellen Scan. Gespeicherte Scans werden nicht gelöscht. Sollte der Scan noch nicht gespeichert sein, erhalten Sie eine Warnmeldung.

4.2.11 Menüfunktion *Scan/Alle Scans schließen* , Schalter



Die Menüfunktion *Scan/Alle Scans schließen* schließt alle Scans und erstellt eine neue leere Arbeitsumgebung, unabhängig davon, ob das Scan-Fenster sichtbar ist oder nicht. Gespeicherte Scans werden nicht gelöscht. Sollte ein Scan noch nicht gespeichert sein, erhalten Sie eine Warnmeldung.

4.2.12 Menüfunktion *Scan/Beschriftungen löschen*

Die Menüfunktion *Scan/Beschriftungen löschen* löscht alle von Ihnen über die



Funktion erzeugten Labels und Beschriftungen aus dem aktuellen Scan.

4.2.13 Menüfunktion *Scan/Alle Beschriftungen löschen*

Die Menüfunktion *Scan/Alle Beschriftungen löschen* löscht alle von Ihnen über die



Funktion erzeugten Labels und Beschriftungen aus allen Scans der aktuellen Arbeitsumgebung.

4.2.14 Menüfunktion *Scan/NULL-Linie löschen*

Die Menüfunktion *Scan/NULL-Linie löschen* löscht die NULL-Linie des aktuellen Scans, sofern eine NULL-Linie definiert wurde.

4.2.15 Ableitung

Die Menüfunktion **Ableitung** berechnet die erste Ableitung des aktuellen Scans und legt sie als neuen Scan an, siehe Abbildung 75:

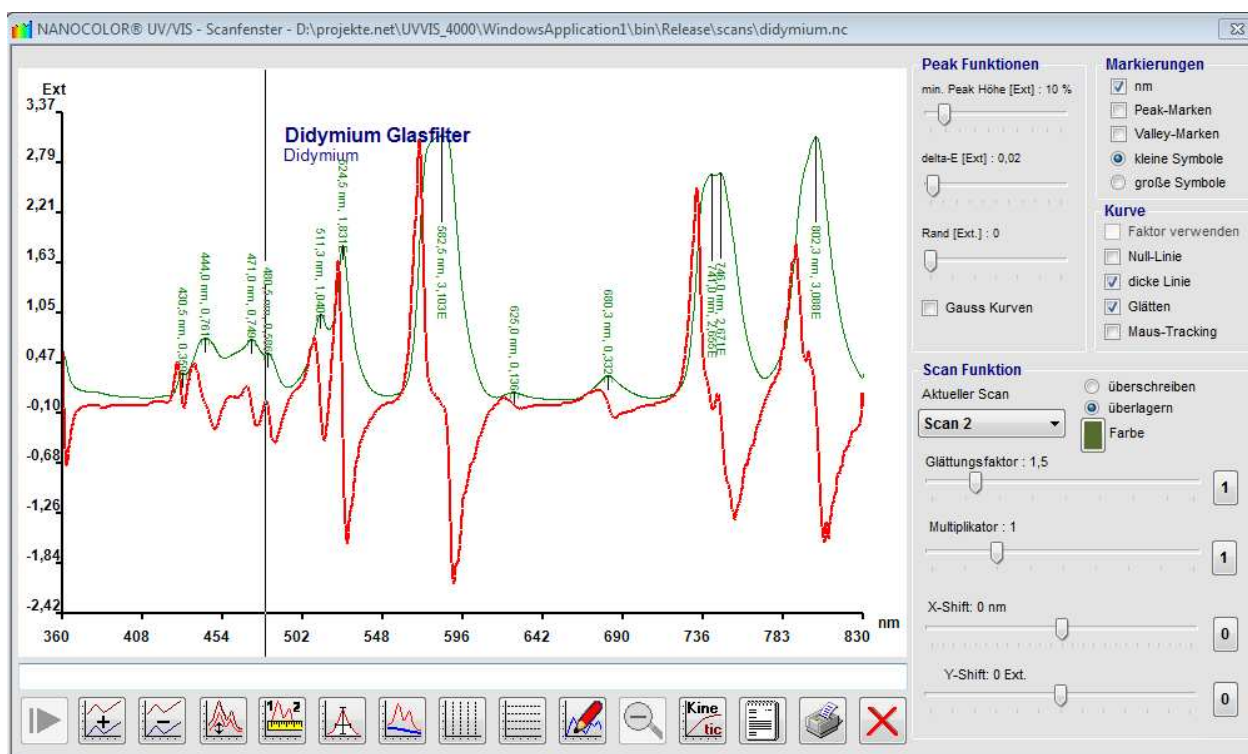


Abb. 75: Erste Ableitung eines Scans

Da die erste Ableitung als aktueller Scan angezeigt wird, kann man durch mehrmalige Anwendung der Menüfunktion **Ableitung** auch Ableitungen höherer Ordnung erstellen.

4.2.16 Menüfunktion **Scan/Bioanalytik Scan**

Der Bioanalytik Scan ist eine einfache und elegante Methode zur automatischen Auswertung mehrerer bioanalytischer Messungen. Diese Funktion wird ausführlich im Anhang in Kapitel 8.10 beschrieben.

4.3 Funktionen des Scan-Fensters

Die Funktionen zum Bearbeiten von Scans verteilen sich auf Schalter am unteren Rand des Scan-Fensters und auf Schieberegler und Optionsschalter in den Rahmen am rechten Rand des Scan-Fensters.

4.3.1 Schalter

Die wichtigsten Funktionen zum Bearbeiten von Scans finden Sie als graphische Schalter am unteren Rand des Scan-Fensters.



4.3.1.1 Scans addieren, Schalter

Die Funktion **Scans addieren** bildet aus zwei oder mehreren Scans einen neuen Scan, in dem die Messwerte addiert werden. Der Schalter ist nicht aktiv, solange nur

ein Scan im Arbeitsbereich vorhanden ist. Weiterhin müssen die Scans einen identischen Scan-Bereich besitzen, also gleiche Start- und End-Wellenlänge. Andernfalls wird die Funktion abgebrochen. Abbildung 76 zeigt den Zeichenbereich des Scan-Fensters mit zwei verschiedenen Scans.

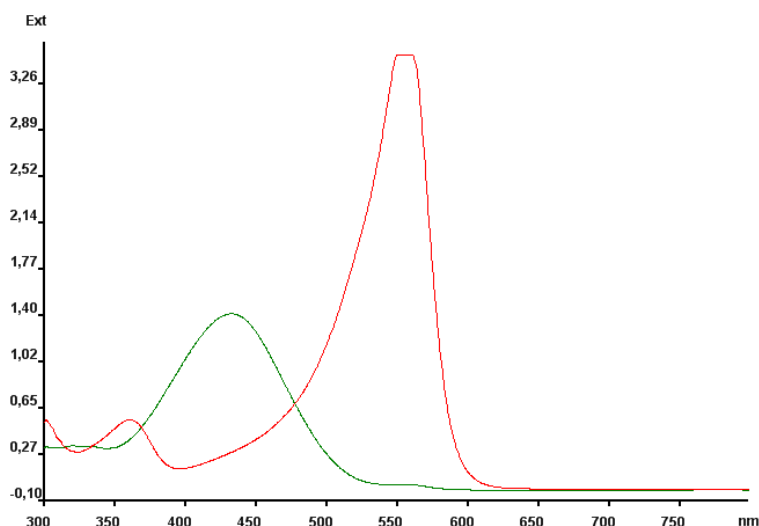


Abb. 76: Zwei unterschiedliche Scans im Zeichenbereich vor der Addition



Durch anklicken des Schalters wird ein dritter Scan durch Addition der Extinktionen berechnet und in der Zeichenfläche dargestellt. Abbildung 77 zeigt den berechneten Scan in **rot**.

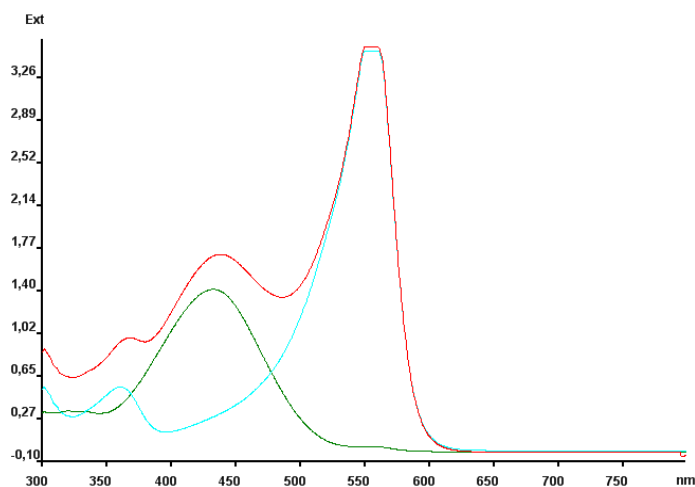


Abb. 77: Addition zweier Scans



4.3.1.2 Scans subtrahieren, Schalter

Die Funktion **Scans subtrahieren** bildet aus zwei Scans einen neuen Scan, in dem die Messwerte des zweiten Scans von denen des Ersten subtrahiert werden. Der Schalter ist nicht aktiv, solange weniger oder mehr als zwei Scans im Arbeitsbereich vorhanden sind. Weiterhin müssen die Scans einen identischen Scan-Bereich besitzen, also gleiche Start- und End-Wellenlänge. Andernfalls wird die Funktion abgebrochen. Abbildung 78 zeigt den Zeichenbereich des Scan-Fensters mit zwei verschiedenen Scans.

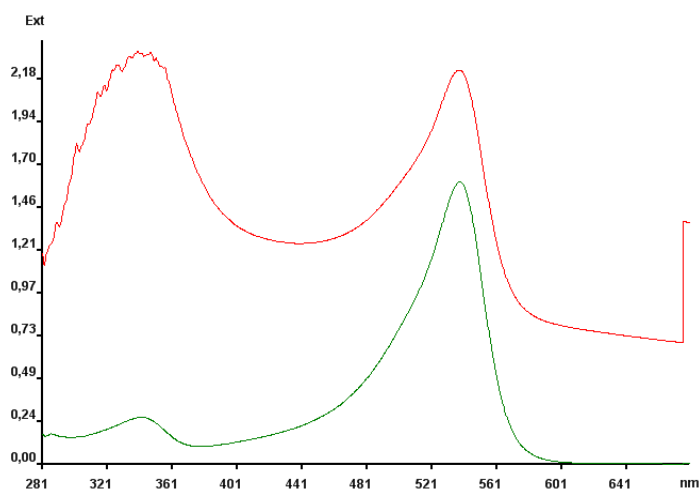


Abb. 78: Zwei unterschiedliche Scans im Zeichenbereich vor der Subtraktion



Durch anklicken des Schalters wird ein dritter Scan durch Subtraktion der Extinktionen berechnet und in der Zeichenfläche dargestellt. Abbildung 79 zeigt den berechneten Scan in **rot**.

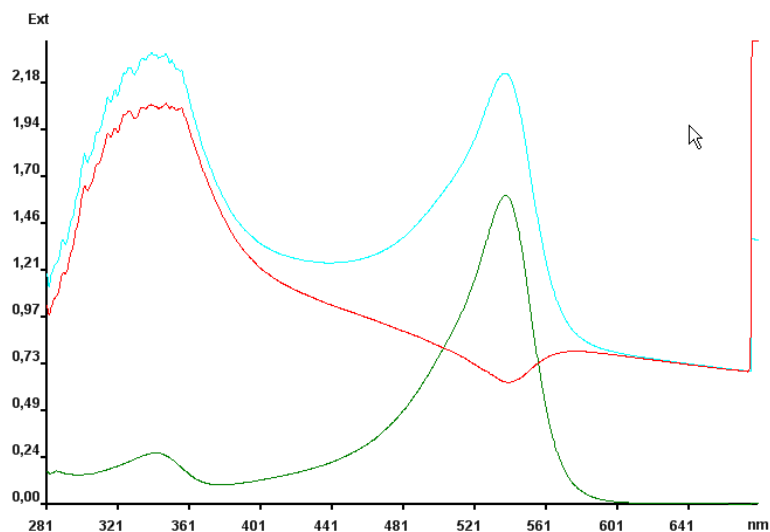


Abb. 79: Subtraktion zweier Scans

4.3.1.2 Bestimmung des Peakfaktors, Schalter



Diese Funktion bestimmt den Faktor des Höhenunterschiedes zweier oder mehrerer positionsgleicher Peaks aus zwei oder mehreren Scans. Der Faktor berechnet sich aus der Extinktion des Aktiven Scans an der gewählten Stelle dividiert durch die Extinktion der anderen Scans. Der Schalter ist nicht aktiv wenn nur ein Scan angezeigt wird. Abbildung 80 zeigt ein Beispiel.

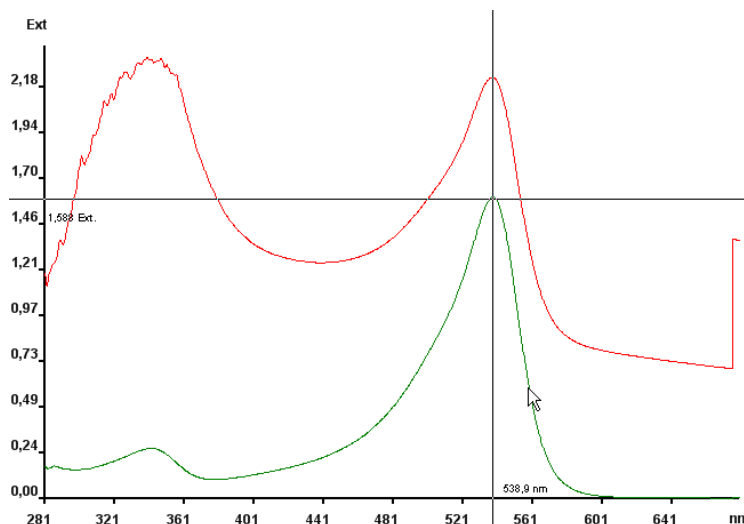


Abb. 80: Peakfaktor, Auswahl des Bezugspunktes



Klicken Sie auf den Schalter . Möchten Sie die Berechnung vorzeitig



abbrechen, klicken Sie bitte ein zweites mal auf den Schalter oder bewegen Sie den Mauszeiger einfach aus der Scan-Grafik heraus. Klicken Sie nun mit der

linken Maustaste innerhalb des Scans auf die Position, an der die Peakhöhe verglichen werden soll, wie in Abbildung 80 gezeigt. Abbildung 81 zeigt das Ergebnis der Operation bei einem Klick auf die Peakspitze bei 530 nm: die Peaks beider Scans werden in gleicher Höhe gezeichnet. Um das unten abgebildete Ergebnis zu erhalten, müssen Sie zunächst den unteren **grünen** Scan aus Abbildung 80 zum aktiven Scan machen.

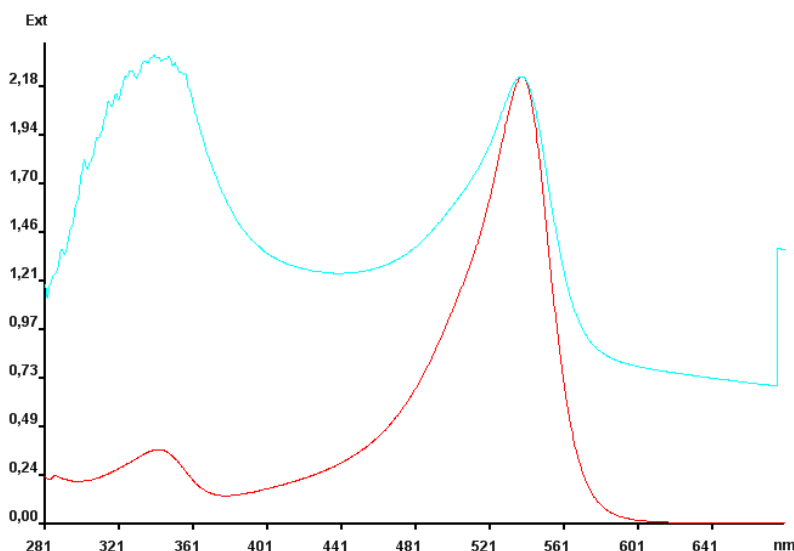


Abb. 81: Bestimmung des Peakfaktors

Der so bestimmte Peakfaktor wird in der Statusleiste des Hauptfensters angezeigt, siehe Abbildung 82. Diese Information gilt immer nur für den aktuellen Scan.

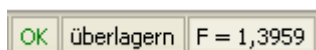


Abb. 82: Anzeige des Peakfaktors

Der Faktor $F = 1,3959$ bedeutet, dass die Extinktionen des in Abbildung 80 unteren (**grün**) Scans mit 1,3959 multipliziert werden müssen, um an der gewählten Position die gleiche Extinktion wie der **rote** Scan aus Abbildung 80 zu zeigen.



4.3.1.3 Scananalyse, Schalter

Ein Klick auf diesen Schalter startet die Analyse des aktuellen Scans. Dabei werden Peaks gesucht und Halbwertsbreiten sowie Integrale bestimmt. Das Ergebnis wird in ein Protokoll geschrieben und kann ausgedruckt werden. Abbildung 83 zeigt die Zeichenfläche nach einer Scan-Analyse, Abbildung 84 das Protokollfenster. Nach

erfolgter Analyse kann das Protokoll-Fenster durch klicken auf den Schalter  oder über die Menüfunktion **Fenster/Protokoll-Fenster öffnen** geöffnet werden. Über

das Einstellungen-Fenster, Menü **System/Einstellungen**, können Sie festlegen, dass sich das Protokoll-Fenster automatisch nach jeder Analyse öffnet.

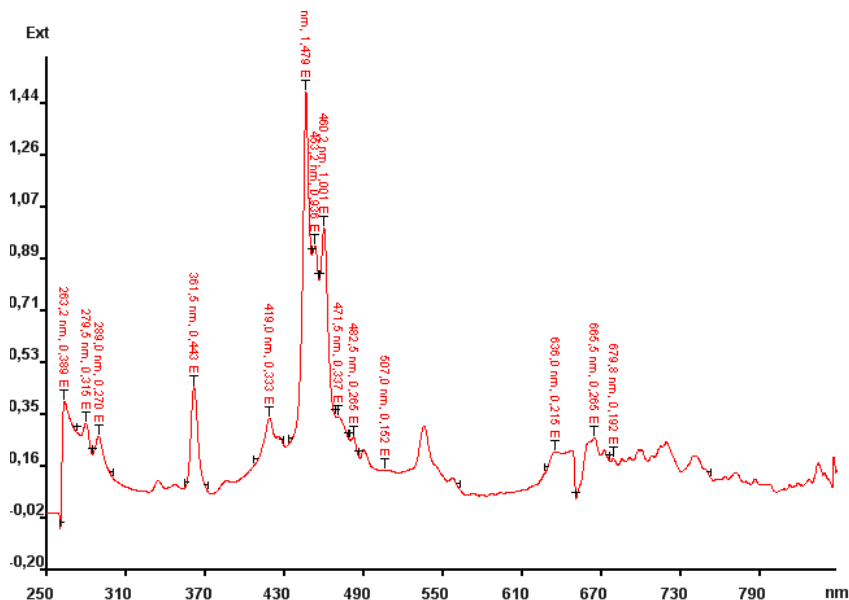


Abb. 83: Scan-Analyse

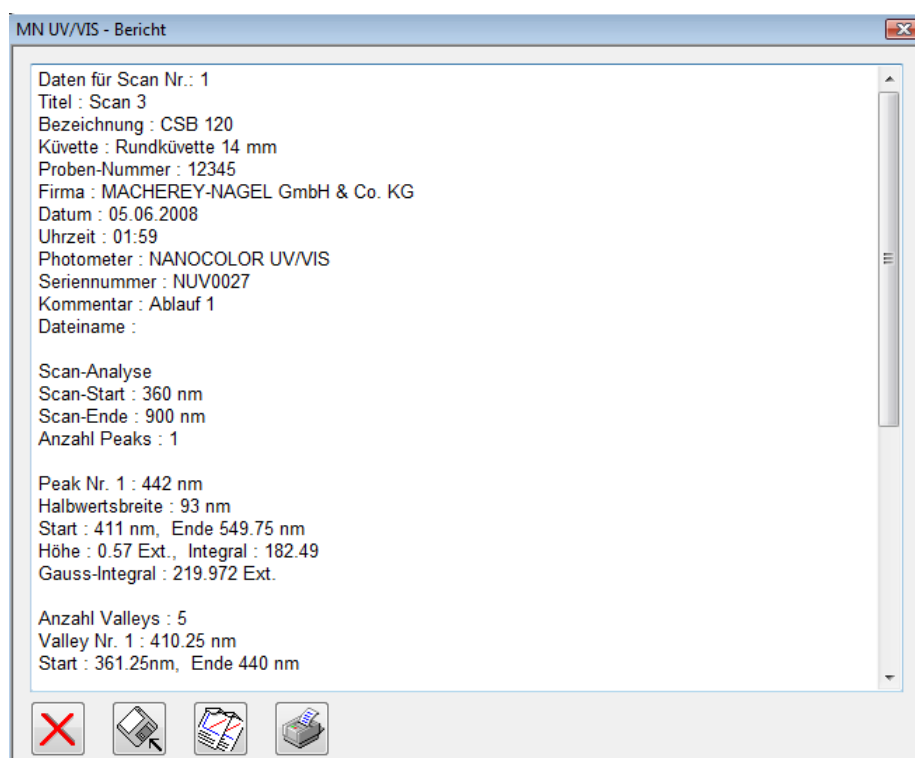


Abb. 84: Protokoll der Scan-Analyse

Sie können den Bericht über den Schalter  als Text-Datei speichern. Über den Schalter  kann der Bericht gedruckt werden, der dritte Schalter  schließt

das Protokoll-Fenster. Mit dem vierten Schalter  kann der Inhalt des Protokoll-Fensters in die Zwischenablage kopiert werden.

4.3.1.3 Integration einzelner Peaks, Schalter



Ein Klick auf den Schalter  setzt die Software in den Einzelpeak-Integrationsmodus. Möchten Sie diesen Modus wieder verlassen, klicken Sie einfach

ein zweites mal auf den Schalter  oder bewegen Sie den Mauszeiger einfach aus der Scan-Grafik heraus. Mit Hilfe dieser Funktion können einzelne Peaks manuell per Maus-Rahmen integriert werden. Ziehen Sie einfach bei gedrückter linker Maustaste einen Rahmen um den zu bestimmenden Peak. Dabei kommt es nicht auf die exakte Peakhöhe an, sondern nur darauf, den Anfangs- und Endpunkt der Integration auf der Wellenlängenachse zu bestimmen. Abbildung 84 zeigt, wie der Rahmen gezogen wird und Abbildung 85 gibt das Ergebnis der Funktion wieder.

Die manuelle Peak-Integration arbeitet auch im Zoom-Modus.

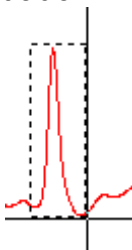


Abb. 84: Integrieren einzelner Peaks per Mausrahmen

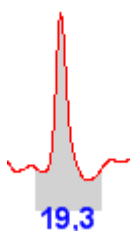


Abb. 85: Darstellung des Integrals

Solange in dem Scan keine NULL-Linie definiert ist, wird bis zu Extinktion = 0 integriert. Beim Anlegen einer manuellen NULL-Linie wird das Integral automatisch korrigiert. Der Wert 19,3 ergibt sich aus der Summation über alle Extinktionswerte die zwischen den gewählten Start- und Endpunkten liegen.

4.3.1.4 Anlegen einer NULL-Linie, Schalter



Ein Klick auf den Schalter  setzt die Software in den NULL-Linien Modus. Soll der Modus wieder verlassen werden, klicken Sie einfach ein zweites mal auf den Schalter oder bewegen Sie den Mauszeiger einfach aus der Scan-Grafik heraus.

Jedem Scan in der aktuellen Arbeitsumgebung kann eine individuelle NULL-Linie zugeordnet werden. In dieser Software werden NULL-Linien aus stückweise definierten Geraden gebildet. Um eine NULL-Linie in den Scan einzufügen, müssen lediglich die Stützpunkte, also die Übergangsstellen zwischen den Geraden-Teilstücken per Mausklick in die Grafik gesetzt werden. Die gesetzten Stützpunkte werden durch kleine Quadrate in der Grafik angezeigt. Der erste und letzte Stützpunkt ist dabei immer Ext. = 0, sie befinden sich am linken und rechten Rand der Grafik.

Nach dem Klicken auf den Schalter  werden die Stützpunkte in das Bild  geklickt. Anschließend wird nochmals auf den Schalter  geklickt und die Linie wird in die Grafik gezeichnet. Abbildung 86 zeigt ein mögliches Ergebnis der Operation.

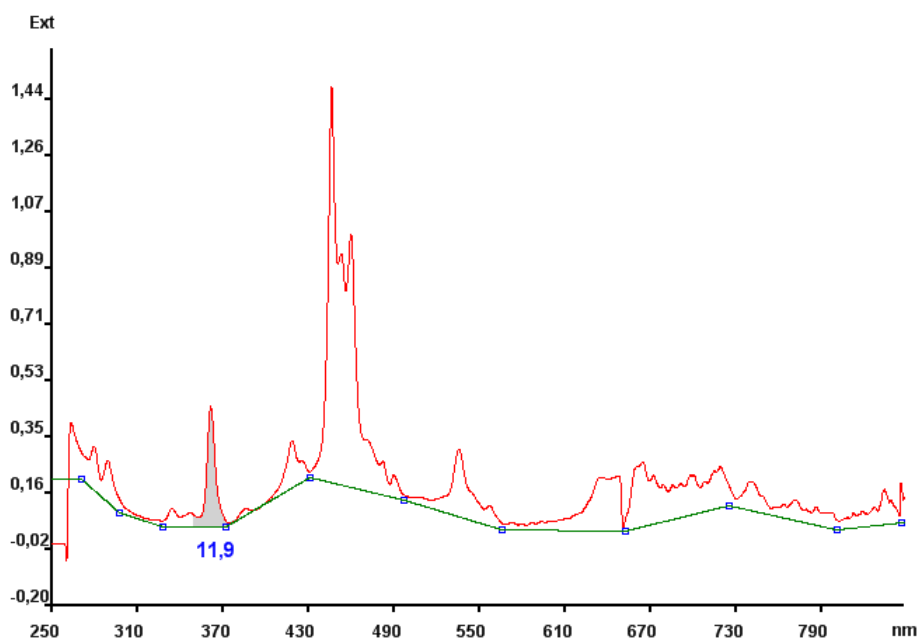


Abb. 86: Anlegen einer NULL-Linie

Ein Vergleich des manuellen Peak-Integrals mit Abbildung 86 zeigt, dass die manuellen Integrale automatisch an NULL-Linien angepasst werden.



4.3.1.5 Gitternetzlinien, Schalter

Die beiden Schalter für die X- und Y-Gitternetze zeichnen entsprechende Hilfslinien in die Grafik ein. Ein Beispiel wird in Abbildung 87 gezeigt.



Abb. 87: Gitternetzlinien



4.3.1.6 Beschriftungen, Schalter

Mit Hilfe dieser Funktion werden Beschriftungen und Überschriften in die Grafik eingefügt. Jeder Scan kann individuell beschriftet werden. Es wird immer die Beschriftung des Aktuellen Scans angezeigt. Nach einem Klick auf den Schalter



wird die Grafik in den Beschriftungsmodus geschaltet. Möchten Sie die Beschriftung vorzeitig abbrechen, klicken Sie bitte ein zweites mal auf den Schalter oder bewegen Sie den Mauszeiger einfach aus der Scan-Grafik heraus. Nun wird mit der **rechten** Maustaste auf die Position innerhalb der Grafik geklickt, an der die Beschriftung stehen soll. Es öffnet sich ein Texteingabefenster, siehe Abbildung 88.

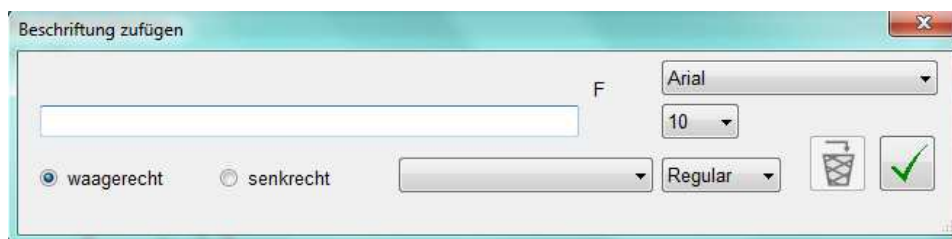


Abb. 88: Beschriftungen eingeben

Ist der Schalter Maus-Tracking aktiv, wird automatisch die Wellenlänge und die Extinktion (bzw. Transmission) als Standardtext eingestellt. Nach einem Klick auf die **OK** Taste wird der Text in die Grafik übernommen. Sollte die Einfügeposition nicht exakt stimmen, können die Texte mit der Maus durch Ziehen verschoben werden (solange die Grafik im Beschriftungsmodus ist). Auch die manuell eingefügten Integrale können so mit der Maus verschoben werden. Nach Eingabe aller Texte wird



der Beschriftungsmodus durch nochmaliges Klicken auf die  Taste wieder verlassen. Es kann jederzeit wieder in den Beschriftungs-Modus gewechselt werden. Durch einen Doppelklick auf einen Beschriftungstext wird ein Korrekturfenster geöffnet, in dem der Text verändert werden kann, siehe Abbildung 89.

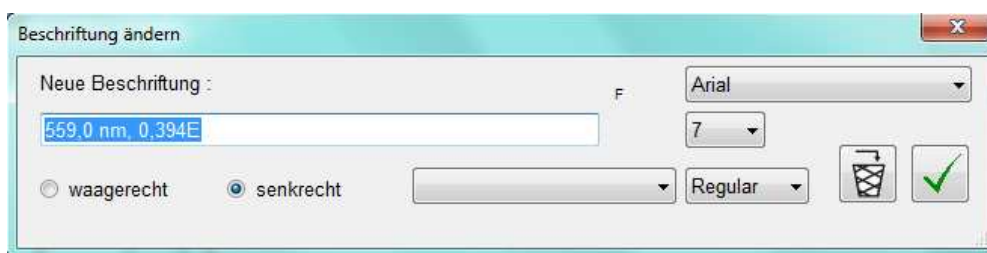


Abb. 89: Beschriftungen ändern

Abbildung 90 zeigt einen Scan mit Beschriftungen.

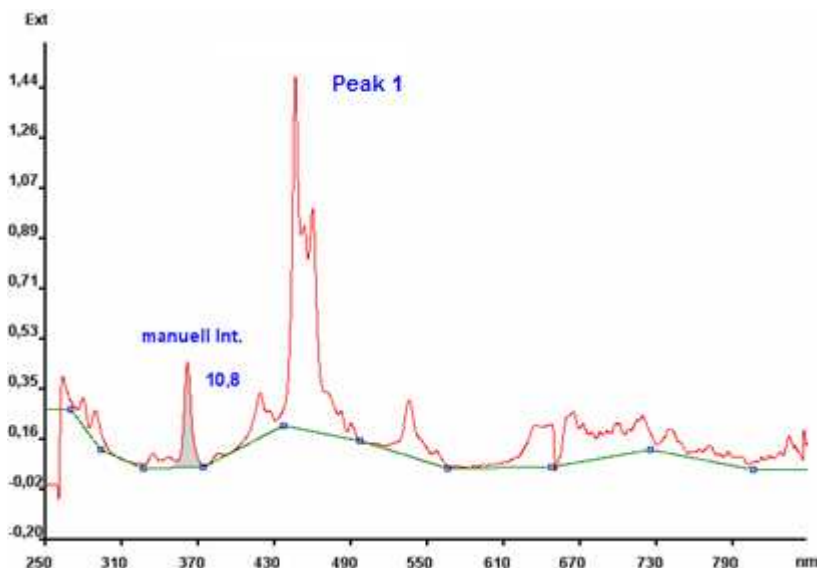


Abb. 90: Scan mit Beschriftungen

Wenn Sie über eine Drei-Knopf-Maus verfügen, können Sie im Beschriftungsmodus einen beliebige Stelle eines Scans durch Klicken mit der MITTLEREN Maustaste markieren. Die Markierung wird automatisch mit der Wellenlänge und Extinktion bzw. Absorption beschriftet. Auch wenn diese Beschriftung verschoben wird, bleibt sie durch eine Linie mit der markierten Stelle verbunden, siehe Abbildung 91:

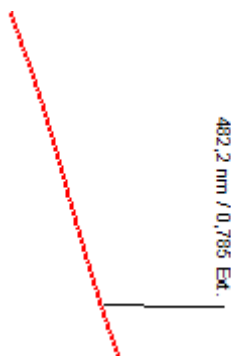


Abb. 91 : Automatische Markierung mit Wellenlänge und Extinktion



4.3.1.7 Auszoomen, Schalter

Befindet sich die Grafik im Zoom-Modus (durch vorheriges Aufziehen eines Mausrahmens) kann der Zoom-Modus durch anklicken der  Taste wieder verlassen werden. Alternativ kann irgendwo in das gezoomte Bild geklickt werden.



4.3.1.8 Scan-Kinetik auswerten, Schalter

Dieser Schalter ist nicht aktiviert, solange weniger als 4 Scans offen sind. Um eine Scan-Kinetik zu erstellen, muss eine entsprechende Scan-Methode unter dem Menüpunkt **Scan/Scan Methoden** angelegt und durchgeführt werden. **Bitte lesen Sie auch Kapitel 5.** Wurde eine Scan-Kinetik durchgeführt, wird im Scan-Fenster eine Grafik wie z. B. Abbildung 92 angezeigt.

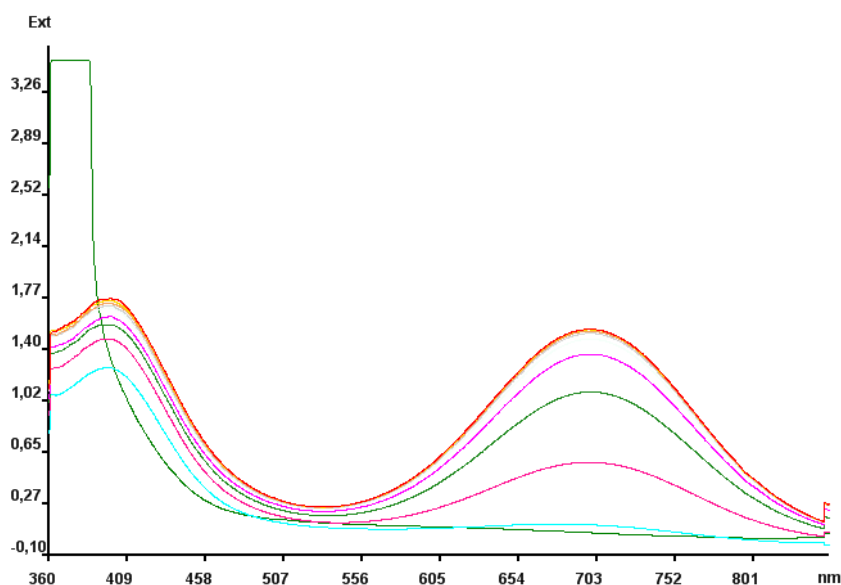


Abb. 92: Scan-Kinetik



Nach dem Klicken auf den Schalter kann durch anklicken mit der linken Maustaste die Position innerhalb der Grafik bestimmt werden, an der eine Kinetik gemessen werden soll. Im Allgemeinen handelt es sich dabei um die Spitze eines Peaks. Nach dem Klick wird der Kinetik-Modus des Scan-Fensters wieder verlassen und das Kinetik Fenster geöffnet, welches in Abbildung 93 zu sehen ist. Soll der Kinetik-Modus verlassen werden, ohne eine Kinetik zu berechnen, kann ein zweites



mal auf den Schalter geklickt werden, solange noch keine Startposition bestimmt wurde.

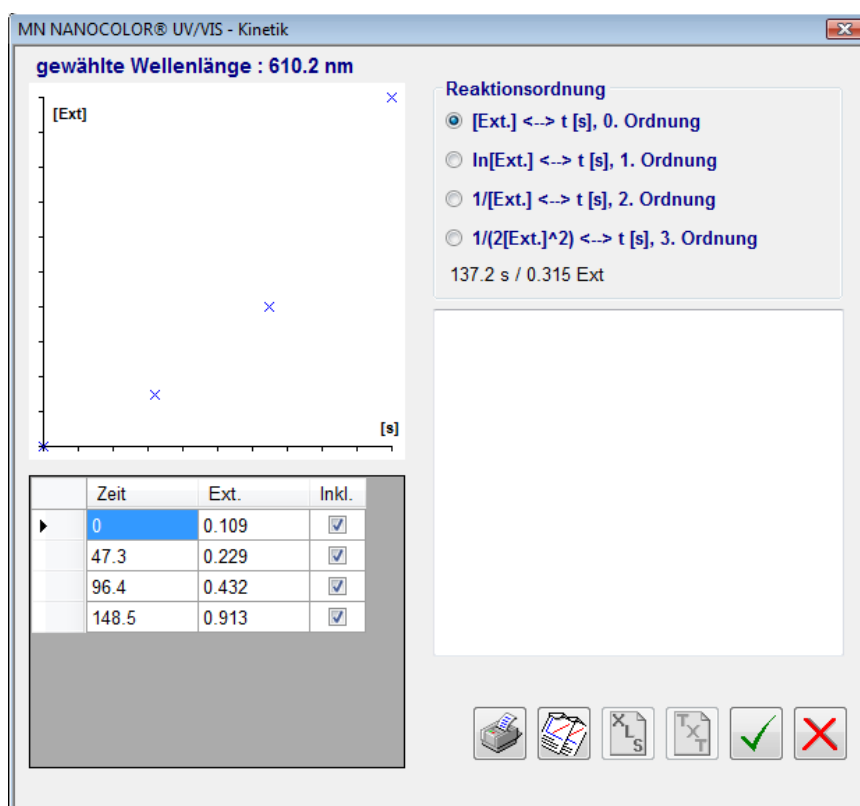


Abb.93: Kinetik-Fenster

Die Grafik im oberen linken Teil des Fensters zeigt die Verteilung der Messpunkte. Die Messwerte können in der darunter liegenden Tabelle abgelesen werden. Sollen einzelne Messpunkte von der Berechnung ausgeschlossen werden, kann das grüne Häkchen in der dritten Tabellenspalte entfernt werden. Alternativ dazu kann durch ziehen eines Mausrahmens in der Grafik die Menge der Punkte bestimmt werden, die berechnet werden sollen, wie in Abbildung 94 und 95 gezeigt wird.

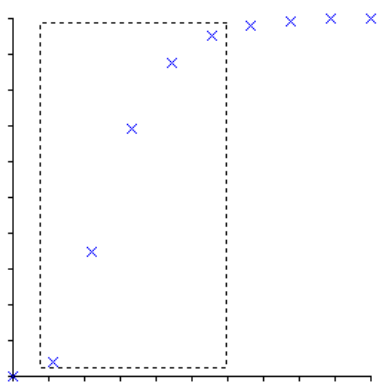


Abb. 94: Markieren der Messpunkte mit der Maus

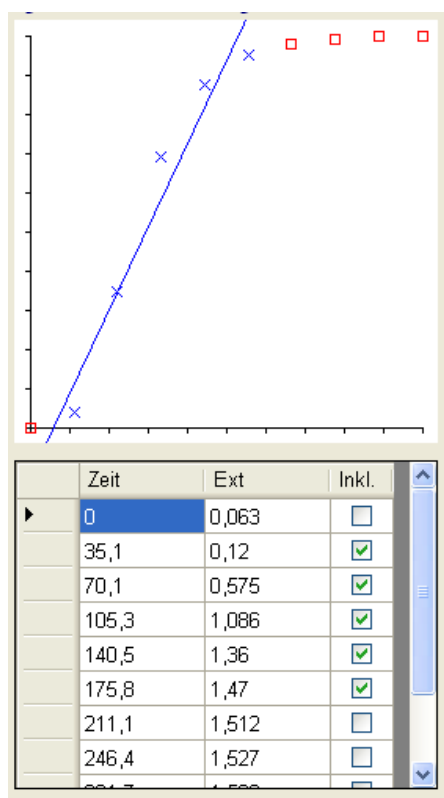


Abb. 95: Nicht markierte Messpunkte werden aus der Tabelle entfernt

Messpunkte, die zur Berechnung markiert sind, werden durch ein blaues Kreuz dargestellt bzw. zeigen ein grünes Häkchen in der Tabelle. Nicht markierte Punkte zeigen kein Häkchen in der Tabelle und werden als rote Quadrate gezeichnet. Nach dem Ziehen mit der Maus wird die Berechnung automatisch gestartet. Wurde die Markierung mit der Maus in der Tabelle vorgenommen, muss noch der Schalter



betätigt werden. Die Art der Auswertung wird im Rahmen **Reaktionsordnung** (Abbildung 96) eingestellt. Ein Klick auf eine der Optionsschalter berechnet die Tabelle neu und zeichnet die Grafik entsprechend nach.

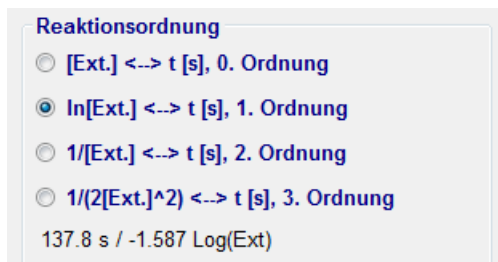


Abb. 96: Funktionsrahmen Reaktionsordnung

Der Schalter  druckt ein Protokoll aus, der dritte Schalter  schließt das Kinetik-Fenster.



Die Funktionen Scan-Kinetik und die einfache Kinetik liefern keine direkte Aussage über die Reaktionsordnung und Geschwindigkeitskonstanten. Für die Zuordnung der Messdaten zu einer der vier Standardauswertungen ist der Anwender verantwortlich!

4.3.1.9 Protokoll-Fenster öffnen, Schalter



Wurde ein Scan mit Hilfe der Funktion Automatische Analyse  analysiert, kann das Protokoll-Fenster jederzeit mit der Funktion  neu geöffnet werden. Innerhalb des Protokoll-Fensters finden Sie den Schalter , mit dem Sie das Messprotokoll drucken können und den Schalter , mit dem der Bericht als Text-Datei gespeichert werden kann.

4.3.1.10 Protokoll drucken, Schalter



Ein berechnetes Protokoll kann jederzeit incl. der Scan-Grafik durch anklicken der Funktion  gedruckt werden. Das Protokoll-Fenster ist dafür nicht notwendig.



4.3.1.11 Scan-Fenster schließen, Schalter

Der Schalter mit dem roten „X“ schließt das Scan-Fenster. Solange die Arbeitsumgebung nicht durch Überschreiben mit neuen oder gespeicherten Scans gelöscht wird, kann das Scan-Fenster jederzeit über die Menüfunktion **Fenster/Scan Fenster öffnen** wieder geöffnet werden. Durch das Schließen des Scan-Fensters gehen die Scans nicht verloren.

4.3.2 Funktionen zur Beeinflussung der Scan-Analyse

Die automatische Analyse eines Scans lässt sich durch viele Faktoren beeinflussen. Die Einstellungen dieser Faktoren lassen sich am rechten Rand des Scan-Fensters verändern. Dieses Kapitel beschreibt die einzelnen Einstellungen nach Funktionsrahmen sortiert.

4.3.2.1 Funktionsrahmen **Peak Funktionen**

Je nach Einstellung dieser Parameter kann es vorkommen, dass bei der automatischen Peaksuche einige Peaks nicht gefunden oder aber zu viele Peaks gemeldet werden. Diese Parameter sollen so lange verändert werden, bis das **Ergebnis der Analyse** zufrieden stellend ist. Abbildung 97 zeigt den Funktionsrahmen **Peak Funktionen**.

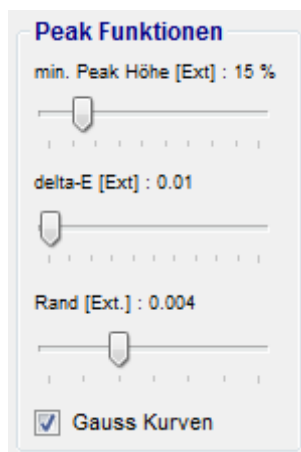


Abb. 97: Funktionsrahmen **Peak Funktionen**

Der erste Schieberegler **min. Peak Höhe [Ext]:** bestimmt den kleinsten Extinktionswert, ab dem ein lokales Maximum als Peak erkannt werden kann. In obigem Beispiel werden generell keine Peaks angezeigt, deren Höhe kleiner als 15 % der Extinktion des höchsten Peaks des Scans sind.

Der Schieberegler **delta-E [Ext]:** beschreibt den Extinktionsunterschied zwischen Peak-Spitze und den Umkehrpunkten der Kurve, unabhängig von der absoluten

Höhe. In obigem Beispiel werden z.B. sog. Schultern an Peakflanken als eigenständige Peaks interpretiert, wenn die Höhe des lokalen Maximums mehr als 0,01 Ext. über der Höhe der Peakflanke liegt.

Der Regler **Rand [Ext.]** beschreibt die Kurvensteigung, an der der Peak beginnt bzw endet. Die Zahl 0,004 beschreibt den Höhenunterschied zwischen zwei Scan-Schritten (etwa 1,2 nm). Mit dieser Einstellung wird direkt die Basis-Breite eines Peaks beeinflusst.

Mit dem Optionsschalter **Gauss Kurven** wird für jeden Peak eine Annäherung durch eine Gauss'sche Glockenkurve berechnet. Um auch asymmetrische Peaks annähern zu können, werden zwei halbe Glockenkurven mit unterschiedlichen Parametern berechnet. Die Glockenkurven werden automatisch in die Grafik gezeichnet.

Jede Änderung eines dieser Regler erzwingt ein Neuzeichnen der Grafik und zeigt damit die Änderungen direkt an.

4.3.2.2 Automatische Scan-Analyse

Bei der automatischen Scan-Analyse werden Maxima und Minima durch kleine schwarze Markierungen und ihren Start- Maximal- und Endpunkten markiert, siehe Abbildung 98. Die Größe dieser Marken kann verändert werden oder die Ausgabe kann vollständig unterdrückt werden. Die dazu nötigen Funktionen befinden sich im Rahmen **Markierungen**, der in Abbildung 98 gezeigt wird.

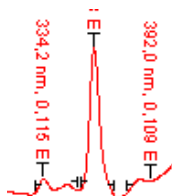


Abb. 98: Peak Marken

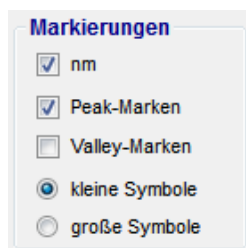


Abb. 99: Funktionsrahmen Markierungen

Ein Häkchen in der Option **nm** erzwingt das Zeichnen der Wellenlänge. Ein Häkchen in der Option **Peak-Marken** erzwingt das Zeichnen der Peak-Markierungen.

Ein Häkchen in der Option **Valley-Marken** erzwingt das Zeichnen der Valley-Markierungen.

Mit den Optionsschaltern **kleine Symbole** und **große Symbole** lässt sich die Größe der Markierungen verändern.

4.3.2.3 Kurvendarstellung

Abbildung 100 zeigt den Rahmen **Kurve**.

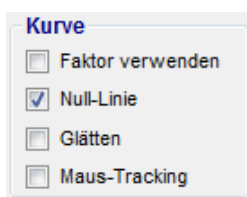


Abb. 100: Funktionsrahmen **Kurve**

Der Schalter **Faktor verwenden** bewirkt, dass die Extinktion der Kurven um einen Skalierungsfaktor vergrößert oder verkleinert wird, wenn diese Faktoren mittels der



Funktion Peakfaktor, Kapitel 4.3.1.2, ermittelt wurden.

Mit dem Schalter **NULL-Linie** kann eine berechnete NULL-Linie unterdrückt werden, d. h. die NULL-Linie wird nicht in die Grafik geschrieben. Ist diese Funktion mit einem Häkchen versehen, wird eine berechnete NULL-Linie auch ausgegeben.

Ob Rohdaten oder geglättete Werte als Grundlage der Scan-Berechnung und -Ausgabe verwendet werden, wird mit der Funktion **Glätten** bestimmt. Ist die Funktion eingeschaltet, werden die Mess-Rohdaten einer mathematischen Glättung unterworfen, wobei die Stärke der Glättung geregelt werden kann (siehe Kapitel 4.3.2.4). Weitere Informationen zur Glättung können dem Anhang in Kapitel 7.6 entnommen werden.

Die Option **Maus-Tracking** bietet eine bequeme Möglichkeit, die Kurven genauer zu untersuchen. Bei eingeschalteter Funktion wird, sobald die Maus auf die Grafik geführt wird, die Bewegungsmöglichkeit der Maus in der Extinktions-Achse/Y-Achse aufgehoben. Die Maus kann dann nur noch über die Nanometer-Achse bewegt werden. Die Position auf der Extinktions-Achse wird automatisch aus den Messwerten der Kurve entnommen, so dass die Maus direkt auf der Kurve läuft. Ist die Maus mit einem Mausrad ausgestattet, bewirkt jede Teildrehung des Mausrades eine Verschiebung der Maus um einen Bildschirmpixel. Sind mehrere Scans auf dem Bildschirm dargestellt, arbeitet diese Funktion mit dem Aktuellen Scan.

4.3.2.4 Funktionsrahmen Scan Funktion

Alle Einstellungen des Funktionsrahmens Scan Funktion (Abbildung 101) beeinflussen nur den Aktuellen Scan. Im linken oberen Bereich befindet sich die Liste Aktueller Scan. Damit wird bei mehreren vorhandenen Scans der Aktuelle Scan festgelegt. Um einen anderen Scan zum Aktuellen Scan zu machen, wählen Sie einfach dessen Nummer aus dieser Liste aus.

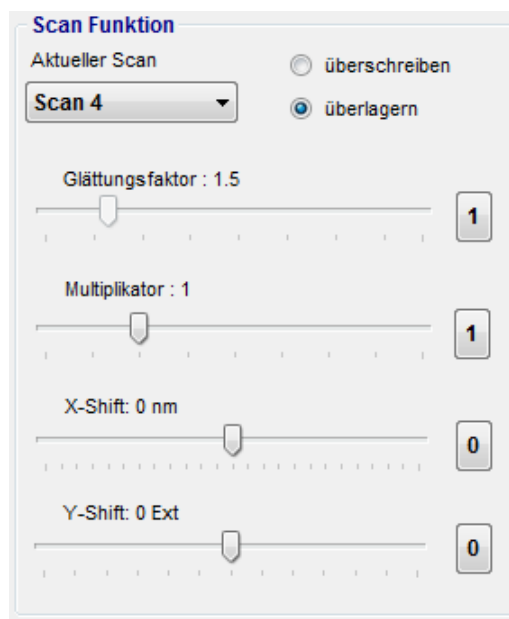


Abb. 101: Funktionsrahmen Scan Funktion

Rechts daneben befinden sich die Optionsschalter überschreiben und überlagern. Ist die Option überlagern aktiv, werden alle Scans in eine Grafik gezeichnet, ist überschreiben aktiviert, wird jeder Scan in eine eigene Grafik gezeichnet.

Mit dem Regler Glättungsfaktor wird die Stärke der Glättung der Messdaten gesteuert. Kleine Zahlen bedeuten eine schwache Glättung, große Zahlen eine starke Glättung. Bis zu einem Faktor von etwa 1.8 treten keine nennenswerten Veränderungen der Messwerte auf. Bei Werten des Glättungsfaktors größer als 2 werden die Daten merklich verändert.

Der Regler Multiplikator erlaubt es, einen für jeden Scan individuellen Faktor einzustellen. Die Messwerte werden vor der graphischen Darstellung mit diesem Faktor multipliziert. Dadurch können auf einfache Weise Vergleiche verschiedener Scans durchgeführt werden. **Die Messdaten werden durch Anwendung dieses Reglers nicht verändert.** Siehe auch Kapitel 4.3.1.2.

Die Regler X-Shift und Y-Shift verschieben den Aktuellen Scan in der Grafik und erleichtern Vergleiche von Scans. **Die Messdaten werden durch Anwendung dieser Regler nicht verändert.**

4.3.3 Scan-Grundeinstellung

Die Scan-Funktionen arbeiten mit einer Reihe von Grundeinstellungen. Diese können Sie über die Menüfunktion **System/Einstellungen/Scan-Einstellungen**, siehe auch

Kapitel 7.3.2, oder über den Schalter  aus der Icon-Leiste, aufrufen, siehe Abbildung 102.

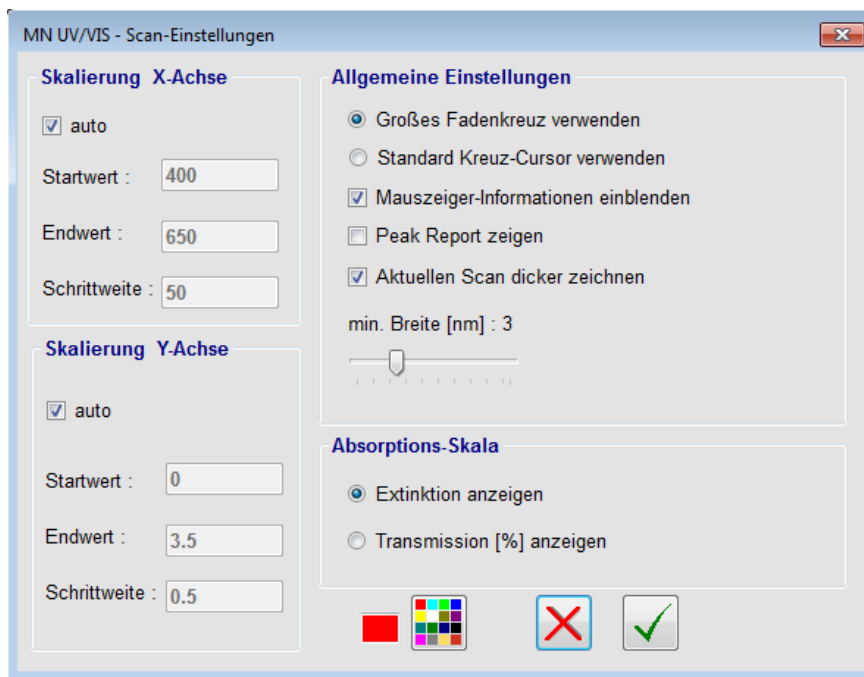


Abb. 102 : Scan-Einstellungen

Über die Scan-Einstellung können Sie die Skalierung der Achsen anpassen und festlegen, ob die Extinktion oder die Transmission angezeigt werden soll. Mit Hilfe



des Schalters können Sie die Farbe des aktuellen Scans verändern.

Mit der Einstellung **min. Breite [nm]** legen Sie die minimale Breite eines Peaks fest: schmalere Peaks werden nicht mehr erkannt. Mit dieser Funktion kann man möglicherweise auftretende Spikes oder Geisterpeaks von der Analyse ausschließen.

Die weiteren Einstellungen sind selbsterklärend.

Alle wichtigen Einstellungen können Sie auch direkt über ein Kontextmenü erreichen, wenn Sie innerhalb der Scan-Grafik mit der rechten Maustaste klicken, siehe auch Abbildung 103:

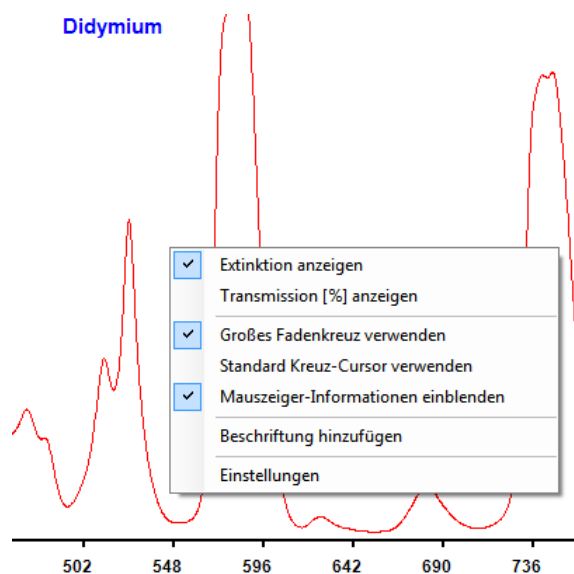


Abb. 103 : Scan-Kontextmenü



5 Photometer Sondermethoden

Sondermethoden sind Messmethoden, die durch den Anwender definiert wurden. Im Photometer **NANOCOLOR®^{UV/vis}** werden 5 verschiedene Sondermethoden unterschieden:

- Scan Methoden
- Scan Kinetiken
- Einzelwellenlängenmessung
- Kinetik
- Multiwellenlängenmessungen

Alle Sondermethoden können unter einer Methodennummer im Photometer gespeichert werden. Die **NANOCOLOR® Spektrometer** können 100 Sondermethoden verwalten. Dafür sind die Methodennummern 200 bis 299 im Photometer reserviert.

Alle Sondermethoden können unter einer Methodennummer in einer Datenbank auf Ihrem PC gespeichert werden. Diese Datenbank kann beliebig viele Sondermethoden verwalten.

Für einen Wellenlängen-Scan werden Startwellenlänge und Endwellenlänge gespeichert.

Bei einer Scan-Kinetik wird ein Scan in definierten Zeitabständen wiederholt ausgeführt. Scan-Kinetiken können nicht im Photometer gespeichert werden.

Einzelwellenlängenmessungen definieren lineare oder polynomische Messmethoden.

Bei Kinetiken werden Einzelwellenlängenmessung in definierten Zeitabständen wiederholt.

Multiwellenlängen-Methoden werten Proben bei mehreren Wellenlängen aus.

Alle Sondermethoden können mit den Menüfunktionen **Sondermethode** oder **Scan/Scan Methoden** verwaltet werden. Abbildung 104 zeigt das Fenster Methodebverwaltung. Die angezeigten Sondermethoden sind nur Beispiele und auf Ihrem PC / Photometer nicht enthalten. Sollten Sie noch keine Verbindung zu Ihrem



Photometer hergestellt haben, klicken Sie bitte auf den Schalte

Das Sondermethoden Fenster zeigt zwei Tabellen. Die linke Tabelle **PC Datenbank** enthält Methoden, die auf Ihrem PC in einer speziellen Datenbank gespeichert wurden. Sie können beliebig viele Sondermethoden am PC erstellen und verwalten. Nach einer frischen Installation der **NANOCOLOR® Spektrometer Software** ist diese Tabelle leer. Die rechte Tabelle **Photometer** zeigt die Sondermethoden an, die bereits im Photometer gespeichert sind. Haben Sie noch keine Sondermethoden im Photometer angelegt, ist diese Tabelle leer.

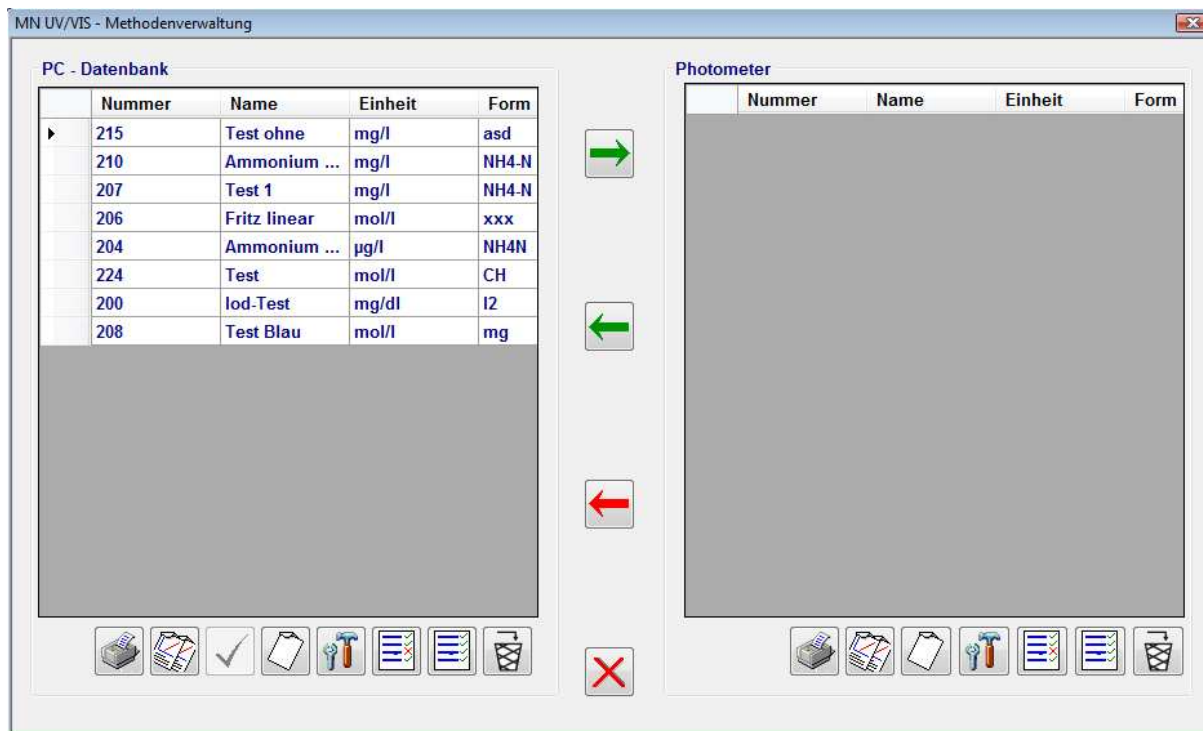


Abb. 104: Fenster Methodenverwaltung

Unterhalb der Tabellen befinden sich die Funktionen zum Bearbeiten der Sondermethoden.

5.1 Funktionen der Tabelle **PC-Datenbank**

Von rechts nach links stehen folgende Methoden zur Verfügung:

Der Schalter  löscht alle Sondermethoden aus der PC Datenbank. Diese Operation lässt sich nicht rückgängig machen! Die Tabelle ist nach dieser Funktion leer. **Sondermethoden, die im Photometer gespeichert sind, werden nicht gelöscht.** X

Mit der Funktion  können Sie alle Methoden der Tabelle auswählen.

Die Funktion  löscht die selektierte Methode aus der PC Datenbank. Ist keine Methode oder mehr als eine Methode selektiert, hat die Funktion keine Auswirkung. **Eine gleichnamige Sondermethode im Photometer wird durch diese Funktion nicht gelöscht.** X

Um eine selektierte Sondermethode zu bearbeiten, klicken Sie auf den Schalter . Das Bearbeiten und Erstellen von Sondermethoden wird in Kapitel 5.4 X

beschrieben. **Änderungen an PC Sondermethoden werden nicht automatisch in das Photometer übertragen.**



Eine neue Sondermethode können Sie in der Datenbank über die Funktion erstellen. Das Bearbeiten und Erstellen von Sondermethoden wird in Kapitel 5.4 beschrieben. **Neu angelegte Methoden werden nicht automatisch in das Photometer übertragen.**

Eine selektierte Sondermethode aus der PC Datenbank kann über den Schalter



am PC ausgeführt werden.



Der Schalter kopiert die Daten der selektierten Methode in die Zwischenablage.



Der Schalter druckt die Daten der gewählten Methode über Ihren Drucker aus.

Durch einen Klick mit der rechten Maustaste auf die Tabelle der PC-Datenbank öffnet sich ein Kontextmenü mit weiteren Funktionen, siehe Abbildung 105:

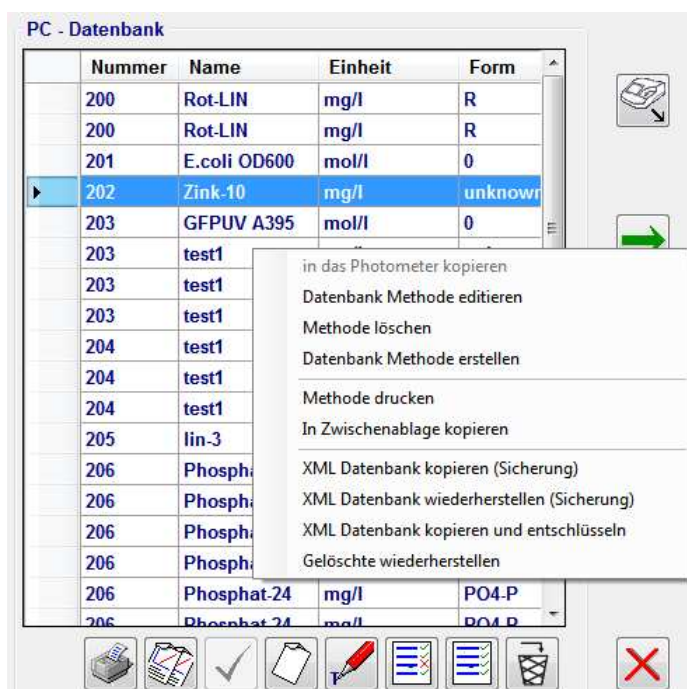


Abb. 105 : PC-Datenbank Kontextmenü

Zusätzlich zu den Funktionen, die Sie über die Schalter aufrufen, stehen Ihnen noch folgende Funktionen zur Verfügung:

Methode drucken druckt die markierte Methode aus.

In Zwischenablage kopieren kopiert die Daten der markierten Methode in die Zwischenablage.

Mit der Funktion **XML Datenbank kopieren (Sicherung)** können Sie eine Sicherungskopie Ihrer Methoden-Datenbank erstellen. Es öffnet sich ein Verzeichnis-Auswahlfenster, in dem Sie den Speicherort Ihrer Sicherungskopie auswählen können.

Wenn Sie eine Sicherungskopie wieder als aktive Datenbank verwenden möchten, verwenden Sie die Funktion **XML Datenbank wiederherstellen (Sicherung)**. Es öffnet sich ein Dateiauswahlfenster, in dem Sie die benötigte Sicherungskopie auswählen.

Mit der Funktion **XML Datenbank kopieren und entschlüsseln** könne Sie eine lesbare Kopie Ihrer Datenbank erstellen. Verwenden Sie diese Funktion, wenn Sie Ihren Datenbestand z. B. in EXCEL ansehen möchten.



Die lesbare Kopie dient nur zu Ihrer Information, lesbare Methodendatenbanken können nicht in die Software zurück geschrieben werden.

Wenn Sie Methoden löschen, werden die Daten nicht aus der Datenbank entfernt, sondern nur als gelöscht markiert. Sie sind damit für den Anwender nicht mehr sichtbar. Sollten Sie eine Methode versehentlich gelöscht haben, können Sie die Löschung mit der Funktion **Gelöschte wiederherstellen** rückgängig machen.



Das wiederherstellen einer einzelnen Methode ist nicht möglich, es werden immer alle Methoden als "nicht gelöscht" markiert.

5.2 Funktionen der Tabelle **Photometer**

Die Funktionen der Photometer-Sondermethoden gelten völlig analog zu den Funktionen der PC-Sondermethoden in Kapitel 5.1. Änderungen, Löschungen und Neuanlagen werden nur im Photometer vorgenommen. Die PC Datenbank wird durch diese Funktionen nicht verändert.



Einen Schalter gibt es in der Tabelle **Photometer** **nicht**. Photometer-Sondermethoden müssen im Photometer gestartet werden und können nicht vom



PC aus gestartet werden. Der Schalter kopiert die Daten der selektierten Methode in die Zwischenablage.



Der Schalter druckt die Daten der gewählten Methode über Ihren Drucker aus.

Auch die Photometer-Tabelle verfügt über ein Kontext-Menü, das Sie über einen Klick mit der rechten Maustaste in die Tabelle erreichen können.

5.3 Methoden zwischen PC und Photometer austauschen

Es stehen Ihnen mehrere Funktionen zur Verfügung, um Methoden zwischen PC und Photometer auszutauschen. Bevor Sie Methoden zwischen PC und Photometer verschieben, machen Sie sich bitte folgendes bewusst:

- jede Sondermethode verfügt über eine Methodennummer
- alle Sondermethodennummern liegen im Bereich 200 bis 299
- **jede Methodennummer kann nur einmal im Photometer existieren**
- im Photometer können **bis zu 100** Sondermethoden gespeichert werden

Zwischen den zwei Tabellen des Sondermethoden-Fensters befinden sich mehrere Schalter.



Der Schalter kopiert alle markierten Sondermethoden aus der PC Datenbank in das Photometer (also aus der linken Tabelle in die rechte Tabelle). Sind keine Sondermethoden gewählt, hat der Schalter keine Funktion. In folgenden Fällen wird eine Methode nicht in das Photometer übertragen: a) es handelt sich um eine Scan-Kinetik und b) die Methodennummer existiert bereits im Photometer. Existierende Methoden werden **nicht** überschrieben. **Diese Funktion löscht keine Daten.**



Den umgekehrten Weg ermöglicht der Schalter. Er kopiert alle markierten Sondermethoden aus der Tabelle Photometer in die PC Datenbank. Methoden werden **auch** kopiert, wenn die Methodennummer in der PC Datenbank bereits existiert. Unter Umständen kann es zu doppelten Einträgen in der PC Datenbank kommen, die manuell korrigiert werden müssen. **Diese Funktion löscht keine Daten.**

Der zweite Weg, Sondermethoden aus dem Photometer in die Datenbank zu



übernehmen, ermöglicht der Schalter. Er kopiert alle markierten Sondermethoden aus der Tabelle Photometer in die PC Datenbank. Methoden werden **auch** kopiert, wenn die Methodennummer in der PC Datenbank bereits existiert. Unter Umständen kann es zu doppelten Einträgen in der PC Datenbank kommen, die manuell korrigiert werden müssen. **Im Unterschied zur vorherigen Funktion werden alle markierten Sondermethoden im Photometer gelöscht!**

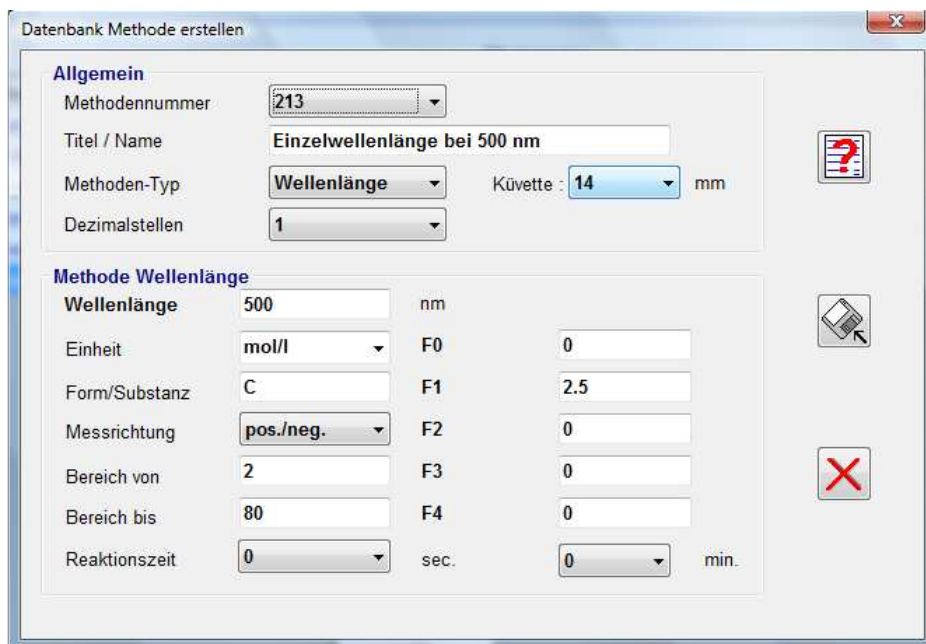
Mit dem Schalter  können Sie das Sondermethoden Fenster schließen.

5.4 Sondermethoden anlegen / editieren

Die Abbildungen 106 bis 110 zeigen das Methoden-Bearbeitungsfenster. Das Aussehen des Bearbeitungsfensters ist abhängig von der eingestellten Sondermethoden-Art.

5.4.1 Einzelwellenlängenmessung

Abbildung 106 zeigt den Methoden-Typ „Wellenlänge“, d. h. eine Einzelwellenlängenmessung.



The screenshot shows a software window titled 'Datenbank Methode erstellen'. It has two main sections: 'Allgemein' and 'Methode Wellenlänge'.
 In the 'Allgemein' section:
 - 'Methodennummer' is a dropdown menu showing '213'.
 - 'Titel / Name' is a text field containing 'Einzelwellenlänge bei 500 nm'.
 - 'Methoden-Typ' is a dropdown menu showing 'Wellenlänge'.
 - 'Küvette' is a dropdown menu showing '14' with 'mm' next to it.
 - 'Dezimalstellen' is a dropdown menu showing '1'.
 In the 'Methode Wellenlänge' section:
 - 'Wellenlänge' is a text field showing '500' with 'nm' next to it.
 - 'Einheit' is a dropdown menu showing 'mol/l'.
 - 'Form/Substanz' is a text field showing 'C'.
 - 'Messrichtung' is a dropdown menu showing 'pos./neg.'.
 - 'Bereich von' is a text field showing '2'.
 - 'Bereich bis' is a text field showing '80'.
 - 'Reaktionszeit' is a dropdown menu showing '0' with 'sec.' next to it.
 To the right of these fields are several input boxes for 'F0' through 'F4', each with a value (0, 2.5, 0, 0, 0).
 On the far right, there are three icons: a question mark in a box, a floppy disk icon, and a red 'X' in a box.

Abb. 106: Sondermethode Einzelwellenlängenmessung erstellen

Im oberen Rahmen werden die allgemeinen Daten der Sondermethode angegeben. Die Methodennummer wählen Sie aus der Liste **Methodennummer** aus. In das Feld **Titel / Name** können Sie max. 12 Zeichen als Beschreibung angeben, die im Photometer angezeigt werden. Die Liste **Methoden-Typ** muss auf „Wellenlänge“ stehen. Stellen Sie alle Parameter entsprechend Ihrer Methode ein. Die Bedeutung der einzelnen Parameter entnehmen Sie bitte dem Photometer Handbuch. Bitte

lesen Sie auch Kapitel 8.8 des Anhangs! Mit dem Schalter  können Sie prüfen, ob die Parameter korrekt gesetzt sind bzw. ob die Methodennummer noch frei ist. Das Ergebnis der Prüfung wird am unteren Rand des Fensters als Text dargestellt.



Fehlerhafte Ergebnisse werden in roter Schrift dargestellt. Mit dem Schalter wird die neue / geänderte Methode gespeichert.

5.4.2 Multiwellenlängenmessung

Abbildung 107 zeigt den Methoden-Typ „Multiwellenlänge“, d. h. eine Multiwellenlängenmessung.

Abb. 107: Sondermethode Multiwellenlängenmessung erstellen

Im oberen Rahmen werden die allgemeinen Daten der Sondermethode angegeben. Die Methodennummer wählen Sie aus der Liste **Methodennummer** aus. In das Feld **Titel / Name** können Sie max. 12 Zeichen als Beschreibung angeben, die im Photometer angezeigt werden. Die Liste **Methoden-Typ** muss auf „Multiwellenlänge“ stehen. Stellen Sie alle Parameter entsprechend Ihrer Methode ein. Die Bedeutung der einzelnen Parameter entnehmen Sie bitte dem Photometer



Handbuch. Mit dem Schalter können Sie prüfen, ob die Parameter korrekt gesetzt sind bzw. ob die Methodennummer noch frei ist. Das Ergebnis der Prüfung wird am unteren Rand des Fensters als Text dargestellt. Fehlerhafte Ergebnisse



werden in roter Schrift dargestellt. Mit dem Schalter wird die neue / geänderte Methode gespeichert.

5.4.3 Kinetik

Abbildung 108 zeigt den Methoden-Typ „Kinetik“, d. h. eine Einzelwellenlängen-Kinetikmessung.



Abb. 108: Sondermethode Kinetik erstellen

Im oberen Rahmen werden die allgemeinen Daten der Sondermethode angegeben. Die Methodennummer wählen Sie aus der Liste **Methodennummer** aus. In das Feld **Titel / Name** können Sie max. 12 Zeichen als Beschreibung angeben, die im Photometer angezeigt werden. Die Liste **Methoden-Typ** muss auf „Kinetik“ stehen.

Im zweiten Rahmen **Kinetik** stellen Sie alle Parameter Ihrer Methode ein. Die Bedeutung der einzelnen Parameter entnehmen Sie bitte dem Photometer

Handbuch. Mit dem Schalter  können Sie prüfen, ob die Parameter korrekt gesetzt sind bzw. ob die Methodennummer noch frei ist. Das Ergebnis der Prüfung wird am unteren Rand des Fensters als Text dargestellt. Fehlerhafte Ergebnisse

werden in roter Schrift dargestellt. Mit dem Schalter  wird die neue / geänderte Methode gespeichert.

5.4.4 Wellenlängen-Scan

Abbildung 109 zeigt den Methoden-Typ „Scan“, d. h. einen Wellenlängen-Scan.

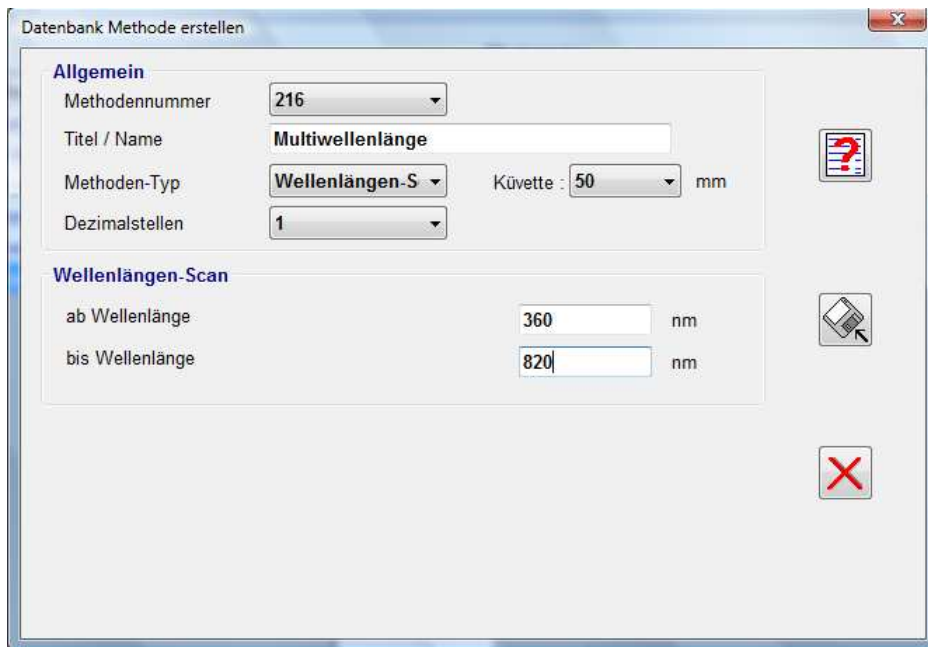


Abb. 109: Sondermethode Wellenlängen-Scan erstellen

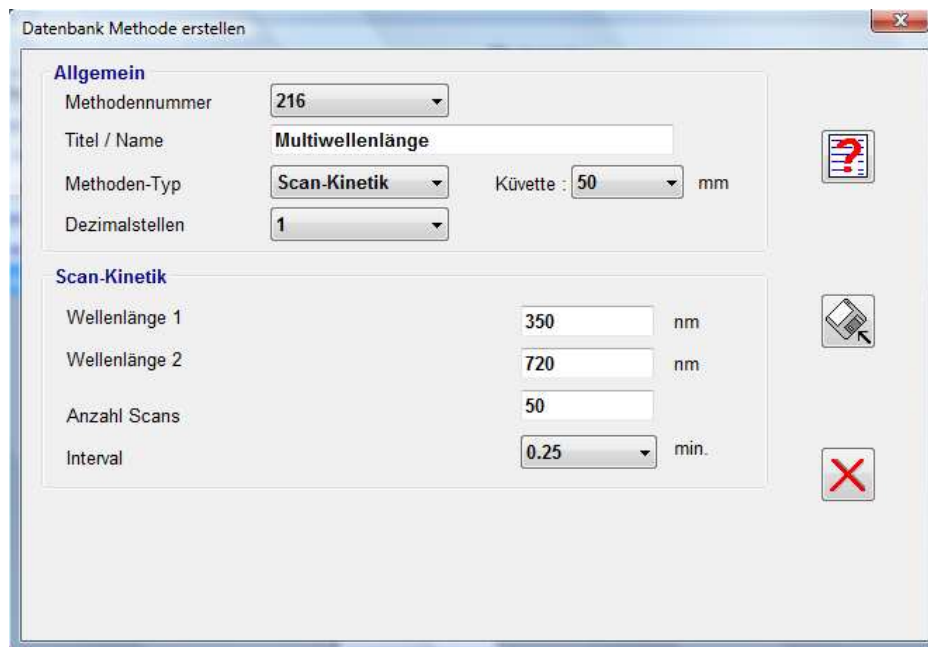
Im oberen Rahmen werden die allgemeinen Daten der Sondermethode angegeben. Die Methodennummer wählen Sie aus der Liste **Methodennummer** aus. In das Feld **Titel / Name** können Sie max. 12 Zeichen als Beschreibung angeben, die im Photometer angezeigt werden. Die Liste **Methoden-Typ** muss auf „Wellenlängen-Scan“ stehen, um Wellenlängen-Scans durchzuführen. Stellen Sie alle Parameter entsprechend Ihrer Methode ein. Die Bedeutung der einzelnen Parameter

entnehmen Sie bitte dem Photometer Handbuch. Mit dem Schalter  können Sie prüfen, ob die Parameter korrekt gesetzt sind bzw. ob die Methodennummer noch frei ist. Das Ergebnis der Prüfung wird am unteren Rand des Fensters als Text dargestellt. Fehlerhafte Ergebnisse werden in roter Schrift dargestellt. Mit dem

Schalter  wird die neue / geänderte Methode gespeichert.

5.4.5 Scan-Kinetik

Abbildung 110 zeigt den Methoden-Typ „Scan-Kinetik“, d. h. einen wiederholten Wellenlängen-Scan.



The screenshot shows a software window titled "Datenbank Methode erstellen". It contains two sections: "Allgemein" and "Scan-Kinetik".

Allgemein section:

- Methodennummer: 216 (dropdown menu)
- Titel / Name: Multiwellenlänge (text field)
- Methoden-Typ: Scan-Kinetik (dropdown menu)
- Küvette: 50 (dropdown menu) mm
- Dezimalstellen: 1 (dropdown menu)

Scan-Kinetik section:

- Wellenlänge 1: 350 nm (text field)
- Wellenlänge 2: 720 nm (text field)
- Anzahl Scans: 50 (text field)
- Interval: 0.25 (dropdown menu) min.

On the right side of the dialog, there are three icons: a question mark in a box, a floppy disk icon, and a red 'X' icon.

Abb. 110: Sondermethode Scan-Kinetik editieren

Im oberen Rahmen werden die allgemeinen Daten der Sondermethode angegeben. Die Methodennummer wählen Sie aus der Liste **Methodennummer** aus. In das Feld **Titel / Name** können Sie max. 12 Zeichen als Beschreibung angeben, die im Photometer angezeigt werden. Die Liste **Methoden-Typ** muss auf „Scan-Kinetik“ stehen, um eine Scan-Kinetik durchzuführen. Stellen Sie alle Parameter entsprechend Ihrer Methode ein.

Geben Sie in die Liste **Küvette** die verwendete Küvettengröße ein. Es stehen die Einstellungen 10 mm, 20 mm (beides Rechteck-Küvetten), 14 mm (Rundküvetten) und 50 mm (Rechteckküvetten).

Geben Sie in das Feld **Wellenlänge 1** die Startwellenlänge des Scans in nm ein. Geben Sie in das Feld **Wellenlänge 2** die Endwellenlänge des Scans in nm ein.

Geben Sie in das Feld **Anzahl Scans** die benötigte Anzahl an Scans ein.

Das Zeitintervall zwischen den Scans stellen Sie bitte in der Liste **Intervall** ein



Bei dem Zeitintervall handelt es sich um die Zeit, die das Computerprogramm wartet. Je nach Größe des Scanbereiches vergrößert sich das wahre Intervall um die Zeit, die zum Scannen benötigt wird!



Mit dem Schalter können Sie prüfen, ob die Parameter korrekt gesetzt sind bzw. ob die Methodennummer noch frei ist. Das Ergebnis der Prüfung wird am unteren Rand des Fensters als Text dargestellt. Fehlerhafte Ergebnisse werden in

roter Schrift dargestellt. Mit dem Schalter  wird die neue / geänderte Methode gespeichert.

6 Grafikoptionen

6.1 Menüfunktion **Grafik/In Zwischenablage kopieren**

Die Menüfunktion **Grafik/In Zwischenablage kopieren** kopiert die Grafik des aktiven Fensters in die Windows® Zwischenablage. Dabei kann es sich um einen Scan, eine Kalibrier-Kurve, eine Kinetik-Kurve oder eine Normfarbkarte handeln.

6.2 Menüfunktion **Grafik/Als Bild speichern**

Diese Funktion erlaubt es Ihnen, die aktuelle Grafik, also einen Scan, eine Kalibrier-Kurve, eine Kinetik-Kurve oder eine Normfarbkarte als Bilddatei zu speichern. Es öffnet sich ein Dateiauswahlfenster, geben Sie dort den Speicherort und Namen an. Sie können die Grafik in den Formaten JPG, GIF, BMP, TIF und WMF speichern. Der Standard-Speicherort für Grafiken und Bilder ist das Unterverzeichnis *graphics* im Installationsordner der Software.

7 Teil 3 : System-Menü und Software Einstellungen

Mit der Version 4.5 der Software wurde die Menüstruktur geändert. Abbildung 111 zeigt die Funktionen des System-Menüs:

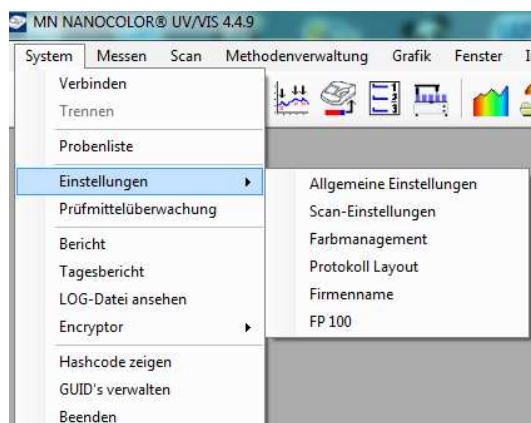


Abb. 111: Menü System

7.1 Verbinden / Trennen

Die Funktion **Verbinden** sucht das angeschlossene Photometer und stellt eine Verbindung her. Alternativ können Sie auch auf den Schalter  klicken.



Je nach verwendeter Funktion der Software sind die Bedienelemente des Photometers über das Photometer-Display nicht nutzbar. Dieser PC-Modus des Photometers wird über das Software Menü **System/Trennen oder durch Ausschalten des Photometers aufgehoben.**

Um die Verbindung zum Photometer zu trennen klicken Sie auf die Funktion **Trennen**. Alternativ können Sie auch auf den Schalter  klicken.

7.2 Probenliste, Schalter

Mit der Funktion **Probenliste** können Sie eine Probenliste erstellen. Viele Funktionen dieser Software, wie z. B. die Farbmessung, Multiwellenlängenmessung, Scans usw. können mit einer Probenliste arbeiten. Abbildung 112 zeigt das Probenlisten-Fenster.

Um eine Probenliste zu erstellen, benötigen Sie für jede Probe eine eindeutige Bezeichnung, ID, oder Probennummer.

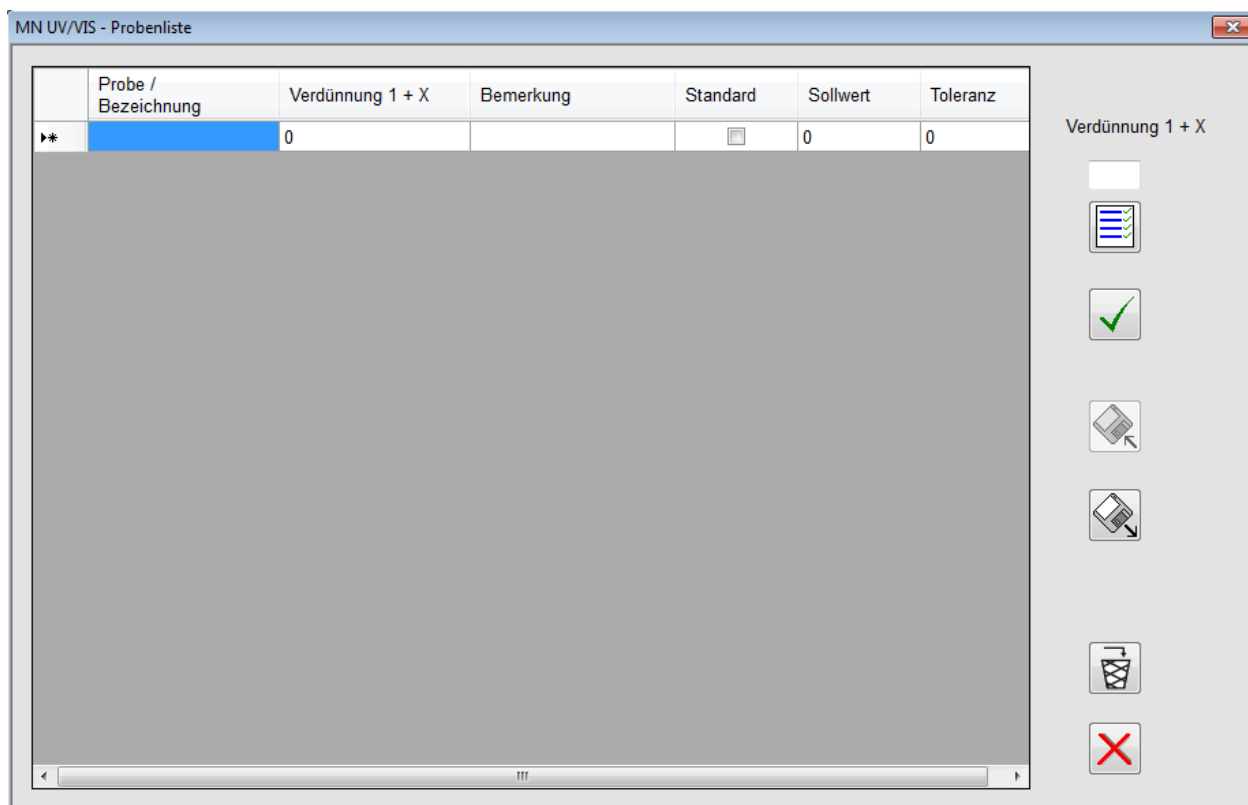


Abb. 112 : Das Probenlisten-Fenster

Die Spalte **Probe / Bezeichnung** ist für die Probennummer oder ID vorgesehen. Wenn Sie einen Strichcode-Leser an Ihren PC angeschlossen haben, lässt sich die Probennummer auch sehr einfach über den Strichcode-Leser einlesen.

Optional können Sie eine Verdünnung in der Spalte **Verdünnung 1 + X** angeben (1 + 1 entspricht 1 zu 2). Bei Extinktions-, SAK- und Transmissionsmessungen und allen Sondermethoden wird der Verdünnungsfaktor automatisch berücksichtigt. Bei Scans und Farbmessungen wird nur im Protokoll vermerkt, dass die Probe verdünnt war. Sollen weitere Informationen einer Probe im Messprotokoll angegeben werden, können Sie diese Informationen in die Spalte **Bemerkungen** eintragen. Abbildung 113 zeigt eine ausgefüllte Probenliste.

Wenn Sie mit dem Autosampler AS 53 arbeiten, können Sie Standards, die automatisch gemessen werden sollen, in der Spalte **Standard** markieren. Ist die Spalte markiert, müssen die Spalten **Sollwert** und **Toleranz** entsprechend gefüllt werden. Wird bei der Abarbeitung der Probenlist von dem Autosampler ein Standard nicht im Sollbereich gefunden, wird die Messung abgebrochen.

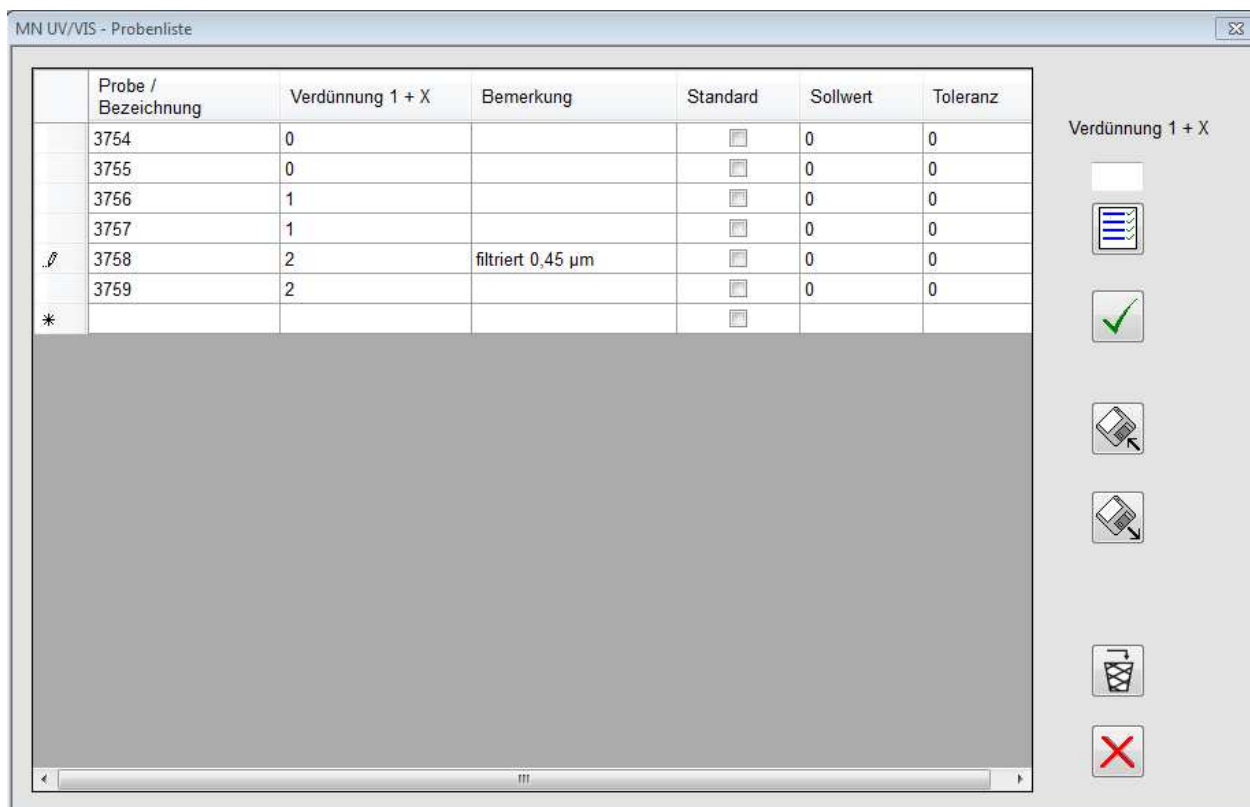


Abb. 113 : ausgefüllte Probenliste

Sind alle Ihre Proben in der gleichen Weise verdünnt worden, können Sie Ihren Verdünnungsfaktor in das Textfeld **Verdünnung 1 + X** eintragen und den Schalter



betätigen. Die Tabellenspalte **Verdünnung 1 + X** wird dann automatisch mit dem Faktor gefüllt.

Wenn Sie die ausgefüllte Probenliste regelmäßig benötigen, können Sie die Liste



über den Schalter speichern. Standardmäßig werden Probenlisten im Verzeichnis *sample_list* im Installationsverzeichnis der Software gespeichert. Über



den Schalter kann eine gespeicherte Probenliste wieder geöffnet werden. Der



Schalter löscht die aktuell angezeigte Liste. Ist Ihre Probenliste vollständig,



können Sie die Liste mit dem Schalter übernehmen. Der Schalter



schließt das Fenster, ohne die Probenliste zu übernehmen.



Probenbezeichnungen / IDs, die bereits gemessen wurden, werden automatisch aus der Probenliste entfernt. Nach der vollständigen Messung einer Probenliste ist die Liste leer.

7.3 Systemeinstellungen

7.3.1 Allgemeine Einstellungen

Die Funktion **System/Einstellungen/Allgemeine Einstellungen** oder der Schalter



öffnet das Einstellungen-Fenster der **NANOCOLOR® Spektrometer Software**. Abbildung 114 zeigt dieses Fenster.



Verschiedenen Funktionen des Einstellungen-Fensters sind gesperrt, wenn Sie nicht über Administrator-Rechte verfügen. Gesperrte Funktionen werden in diesem Handbuch mit dem

Symbol  kenntlich gemacht.

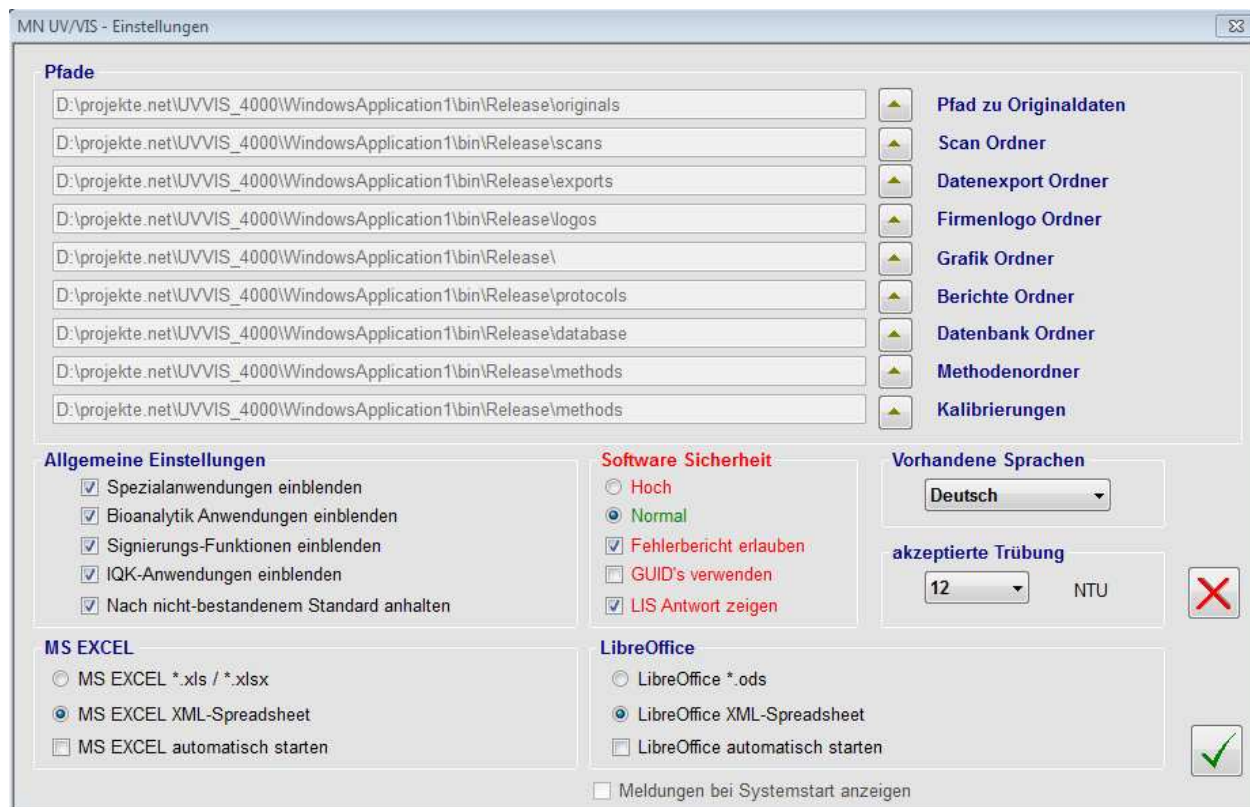


Abb. 114 : Einstellungen-Fenster



Im oberen Teil des Fensters sehen Sie den Rahmen **Pfade**. Dort können Sie einstellen, in welchen Verzeichnissen die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** Daten, Protokolle usw. speichern soll. Standardmäßig sind dafür verschiedene Verzeichnisse unterhalb des Installationsordners vorgesehen. Sie können aber auch eigene Speicherorte auswählen.

Im Rahmen **Allgemeine Einstellungen** können Sie festlegen, welche Funktionen die Software im Menü anzeigen soll: wenn Sie nie Farbmessungen oder Brauereianalytik durchführen, können Sie die entsprechenden Funktionen aus dem Menü ausblenden und das Menü damit übersichtlicher gestalten.

Im Funktionsrahmen **Software Sicherheit** definieren Sie das Sicherheitsniveau der Software (siehe auch Kapitel 2, GLP und FDA 21 CFR Part 11 Konformität). Ist die Einstellung **Hoch** gewählt, verweigert die Software das Öffnen von beschädigten oder manipulierten Dateien. Dazu zählen gespeicherte Scans, Photometerexport-Daten und die Konfigurationsdateien der Software. Weiterhin werden einige Informationsfelder, die Daten eines Scans aufnehmen können, zu Pflichtfeldern, die von Ihnen ausgefüllt werden müssen.

Die Einstellung **Normal** erlaubt das Öffnen beschädigter oder manipulierter Dateien (soweit technisch noch möglich) nach dem Sie eine entsprechende Warnmeldung zur Kenntnis genommen haben. Die Anzahl von Pflichtfeldern beim Erstellen eines Scans ist geringer.

Die dritte Option **Fehlerbericht erlauben** ermöglicht das Senden eines Fehlerberichtes an MACHEREY-NAGEL, sofern eine Internetverbindung besteht. Ist diese Option deaktiviert, kann der Anwender keinen Bericht senden. Die Funktion überträgt die Dateien *error.log*, *sys.log* und *environment.log* (siehe Kapitel 1.2 und 7.5) per e-mail (SMTP) an den Server **mail.mn-net.com**. Wenn die Administration automatischen Informationsaustausch via Internet unterbinden möchte, muss diese Option ausgeschaltet werden.

Darunter sehen Sie den Schalter **GUID's verwenden**. Ist diese Option eingeschaltet, wird für jedes zu druckende Dokument eine GUID berechnet und mit ausgedruckt (siehe 7.7).

Als letzte Option in diesem Rahmen finden Sie **LIS Antwort zeigen**. Ist diese Funktion aktiv, werden Antworten eines Laborinformationssystems angezeigt, sofern eine entsprechende Konfiguration im LIMS-Konfigurator, Kapitel 7.3.6, eingerichtet wurde.

In der rechten Hälfte des Einstellungen-Fensters befindet sich der Funktionsrahmen **Vorhandenen Sprachen**. Wählen Sie die Sprache, die von der Software verwendet werden soll hier aus.

Einige Messfunktionen dieser Software erlauben die Durchführung einer Trübungskontrolle während der Messung. Den Schwellenwert, ab dem eine Warnung



ausgegeben wird, können Sie in dem Rahmen **akzeptierte Trübung** unterhalb der Sprachauswahl in NTU Einheiten angeben.

Links unten befindet sich der Funktionsrahmen **MS EXCEL**. Die darin befindlichen Funktionen steuern, welches EXCEL-Format erstellt werden soll. Die erste Option **MS EXCEL *.xls/*.xlsx** erstellt das EXCEL-XLS oder -XLSX Format (je nach installierter Microsoft® Office Version). Ist auf dem PC kein oder ein zu altes Microsoft® Office installiert, kann diese Option nicht ausgewählt werden.

MS EXCEL XML-Spreadsheet erzeugt eine EXCEL-XML Datei. Diese Funktion ist standardmäßig aktiviert, wenn die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** keine geeignete Microsoft® Office Version findet.

Die Option **MS EXCEL automatisch starten** startet die EXCEL-Anwendung und zeigt die erstellte Tabelle darin an. Ist auf dem PC kein oder ein zu altes Microsoft® Office installiert, kann diese Option nicht ausgewählt werden.

Rechts daneben sehen Sie den Funktionsrahmen **LibreOffice**. Im folgenden Abschnitte werden, wie in Abbildung 114 gezeigt, Optionen für **LIBREOFFICE** gezeigt. Dort kann auch die entsprechende Option für **OPENOFFICE** angezeigt werden. Dies ist abhängig von der installierten Software. Haben Sie kein **OPEN/LIBRE** Produkt installiert, sind diese Funktionen nicht aktiv.

Die darin befindlichen Funktionen steuern, welches **LIBREOFFICE**-Format erstellt werden soll. Die erste Option **LibreOffice *.ods** erstellt das **SCALC**-ODS Format. Ist auf dem PC kein **OPEN/LIBRE**-Produkt installiert, kann diese Option nicht ausgewählt werden.

LibreOffice XML-Spreadsheet erzeugt eine **LIBREOFFICE** -XML Datei. Diese Funktion ist standardmäßig aktiviert, wenn die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** keine geeignete **OPENOFFICE/LIBREOFFICE** Version findet.

Die Option **LibreOffice automatisch starten** startet die **SCALC**-Anwendung und zeigt die erstellte Tabelle darin an. Ist auf dem PC kein oder **OPENOFFICE/LIBREOFFICE** installiert, kann diese Option nicht ausgewählt werden.

Haben Sie Einstellungen geändert, müssen Sie die Daten mit dem Schalter



speichern. Der Schalter  schließt das Einstellungen-Fenster, ohne zu speichern.

7.3.2 Scan-Einstellungen, Schalter

Abbildung 115 zeigt das Scan-Einstellungen Fenster.

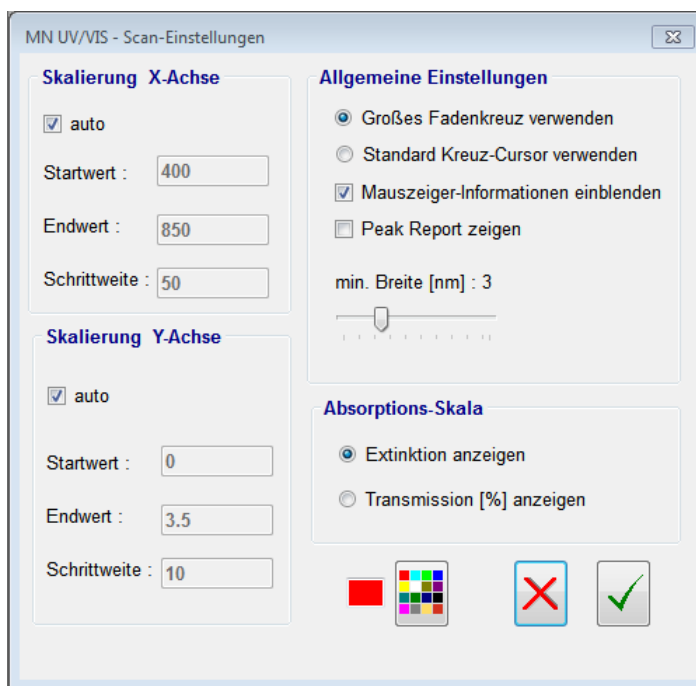


Abb. 115 : Scan-Einstellungen Fenster

Im linken oberen Teil des Fensters sehen Sie die Schalter **automatische Skalierung** für die X-Achse und Y-Achse der Grafik der Scans. Standardmäßig sind beide Schalter aktiviert. Damit wird sichergestellt, dass alle Scans immer optimal in die Zeichenfläche eingepasst werden können. Wenn Sie die Skalierung selber vornehmen möchten, schalten Sie diese Schalter aus. Bei deaktivierter Funktion **automatische Skalierung** werden die Eingabefelder **Startwert**, **Endwert** und **Schrittweite** aktiviert. Geben Sie hier die Werte ein, die für Ihre individuelle Skalierung benötigt werden.

Der Rahmen **Allgemeine Einstellungen**, siehe Abbildung 115, enthält eine Reihe wichtiger Funktionen.

Mit den Optionsschaltern **Großes Fadenkreuz verwenden** und **Standard Kreuz-Cursor verwenden** legen Sie die Gestalt des Mauszeigers auf der Scan-Grafik fest.

Der Schalter **Mauszeiger-Informationen einblenden** legt fest, ob Informationen über die Mausposition innerhalb der Grafik angezeigt werden sollen. Unabhängig von dieser Einstellung werden die Informationen immer in der Statuszeile angezeigt.



Der Regler *min. Breite [nm]* legt fest, ab welcher kleinsten Breite ein lokales Maximum eines Scans als Peak interpretiert werden soll. Finden Sie bei der Analyse immer zu viele kleine Peaks, können Sie hier mit größeren Werten als 1 experimentieren.

Im unteren rechten Teil des Fensters können Sie festlegen, ob die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** Scans im Extinktions-Modus oder im Transmissionsmodus darstellen soll. **Die Einstellung, die Sie am Photometer vorgenommen haben, spielt dabei keine Rolle.**



Darunter finden Sie die Einstellung für die *Farbe des aktuellen Scans*.



Standardmäßig verwendet das Programm die Farbe **Rot**. Mit dem Schalter können Sie die Farbe des Aktuelle Scans ändern.

Haben Sie alle Einstellungen vorgenommen, müssen Sie die Daten mit dem Schalter



speichern. Der Schalter



schließt das Einstellungen-Fenster, ohne zu speichern.

Die wesentlichen Funktionen sind auch über ein Kontext-Menü zu erreichen, siehe Kapitel 4.3.3.

7.3.3 Farbmanagement

Die Einstellungen des Farbmanagements werden für Farbmessungen benötigt und im Handbuch "Anleitung Farbmessung, Ergänzung I zum Softwarehandbuch" erläutert.

7.3.4 Anwenderspezifische Ausdrücke Menübefehl **System/Protokoll Layout**

An vielen Stellen der **NANOCOLOR® Spektrometer Software** können oder müssen Sie nach einer Messung ein gedrucktes Protokoll erstellen. Standardmäßig wird in die Kopfzeile das MACHEREY-NAGEL Logo und die MACHEREY-NAGEL Firmenadresse in die Fußzeile gedruckt. Abbildung 116 zeigt, wie ein Protokoll prinzipiell gestaltet ist. Diese Ansicht wird Ihnen immer im Hintergrund des Hauptfensters der Software angezeigt.



Abb. 116 : Anzeige des Protokolldesigns

Im oberen Bereich sehen Sie die für das Logo verwendete Grafik. Darunter sehen Sie „Protokollsprache : Deutsch“. Damit wird angezeigt, dass die Protokolle in deutscher Sprache erstellt werden. Im unteren Teil des Bildes sehen Sie die Firmenadresse. Es stehen drei Zeilen zur Verfügung, wobei die erste Zeile aus zwei Teilen besteht, die in unterschiedlicher Schrift gesetzt sind.

Unter der Menüfunktion **System/Protokoll Layout** können Sie die Kopf- und Fußzeilen Ihrer Protokolle selber festlegen. Abbildung 117 zeigt Ihnen das Adressen-Einstellfenster. Als Auftragslabor haben Sie die Möglichkeit, Kundenindividuelle Protokolle zu erstellen, da Sie beliebig viele Adressen und Logos abspeichern können.

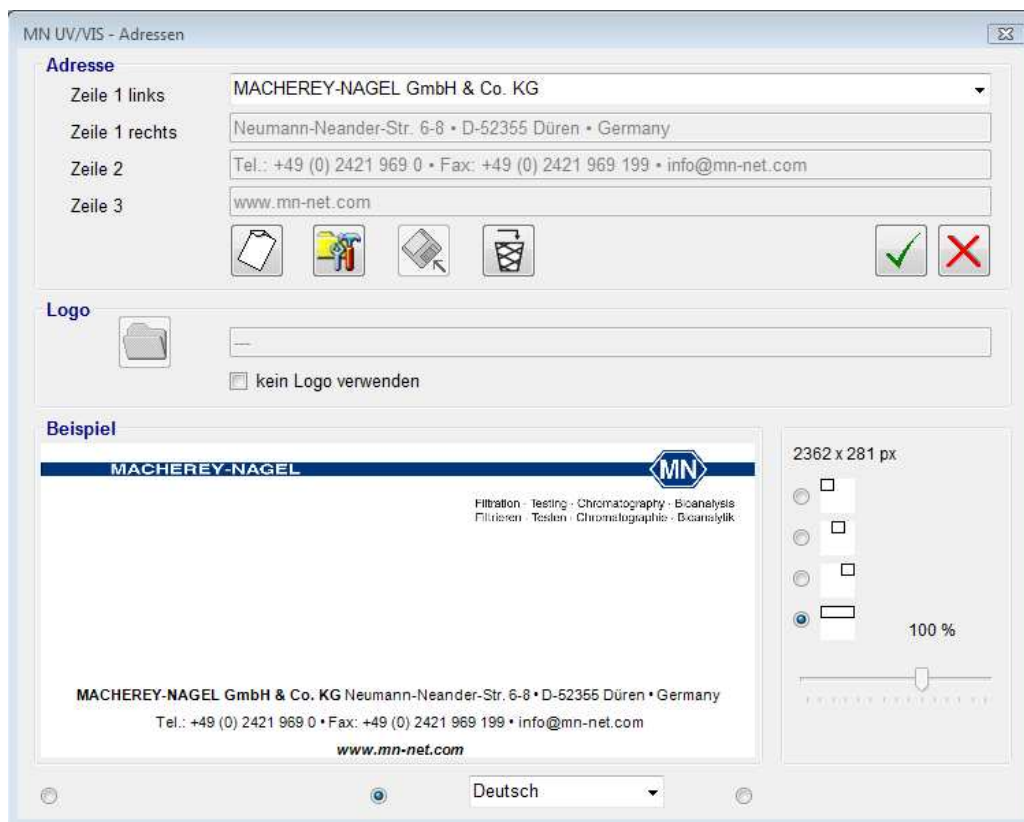


Abb. 117 : Das Adressen - Einstellfenster



Das erste Textfeld **Zeile 1 links** ist als Auswahlliste gestaltet. Haben Sie bereits Adressen gespeichert, können Sie die gespeicherten Adressen aus dieser Liste auswählen. Nach einer Neuinstallation enthält die Liste nur die MACHEREY-NAGEL Adresse. Dieser Eintrag kann nicht gelöscht oder verändert werden.



Um eine neue Adresse anzulegen, klicken Sie auf den Schalter . Möchten Sie eine bestehende Adresse verändern, wählen Sie die Adresse aus der Liste



Zeile 1 links aus und klicken Sie auf den Schalter . Der Inhalt der ersten Zeile wird in **Fettdruck** im linken Teil der ersten Textzeile in der Fußzeile abgebildet und sollte in der Regel den Firmennamen enthalten. Der Text der zweiten Zeile wird im rechten Teil der ersten Zeile in normaler Schrift abgebildet und könnte die postalische Adresse enthalten. Das dritte Textfeld **Zeile 2** enthält die zweite Zeile der Fußzeile. Sie wird in normaler Schrift gesetzt und ist für die Telefon- und Faxnummer gedacht. Das vierte Textfeld **Zeile 3** wird für die dritte Zeile der Fußzeile verwendet. Sie wird **fettkursiv** gedruckt.

Sind alle Textfelder mit den nötigen Daten gefüllt, können Sie über den Schalter



eine Grafik (GIF, JPG) laden, die als Logo verwendet werden soll. Möchten Sie kein Logo in den Protokollen ausdrucken, müssen Sie die Option **kein Logo verwenden** aktivieren.

Soll eine bestehende Adresse gelöscht werden, wählen Sie die Adresse aus und



klicken Sie auf den Schalter

Sind alle Texte gesetzt und haben Sie eine Grafik gewählt, können die einzelnen Elemente noch individuell positioniert werden, siehe Abbildung 118:



Abb. 118 : Positionieren der Elemente



Rechts oben sehen Sie vier Optionsschalter, die als Symbol je ein kleines Kästchen zeigen. Sie beeinflussen die Position des Logos. Die ersten drei stehen für linksbündig, zentriert und rechtsbündig. Die vierte Option skaliert das Logo auf die ganze Seitenbreite. Unterhalb der vier Schalter befindet sich ein Schieberegler. Wenn die Option „auf Seitenbreite skalieren“ **nicht** aktiv ist, lässt sich damit die Größe des Logos in % verändern.

Unterhalb des Beispielprotokolls befinden sich noch drei Optionsschalter, je einer in der linken Ecke, in der Mitte und in der rechten Ecke. Damit stellen Sie die Ausrichtung der Textzeilen der Fußzeile ein. Im gezeigten Beispiel ist rechtsbündig gewählt. In der Auswahlliste können Sie noch die Ausgabesprache des Protokolls einstellen. Es ist so möglich, die Protokolle in einer anderen Sprache zu drucken, als es der Einstellung der Software entspricht.



Speichern Sie die Grafiken der Logos so, dass sie immer von der Software gefunden werden können. Wenn die Grafikdatei verschoben oder gelöscht wird, kann sie nicht mehr im Protokoll verwendet werden.

Haben Sie alle Einstellungen vorgenommen, können Sie Ihr individuelles Design mit



dem Schalter speichern. Damit werden Ihre Einstellungen in der Datenbank abgelegt. Soll dieses Design auch für den Protokolldruck genutzt werden, müssen



Sie noch auf den Schalter klicken.

7.3.5 Firmenname

In bestimmten Fällen, abhängig von der Softwareinstallation Ihres Rechners, kann es möglich sein, dass die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** Ihren Firmennamen nicht aus den Windows-Einstellungen ermitteln kann. In diesem Fall wird standardmäßig „MACHEREY-NAGEL“ als Firma in den Protokollen ausgegeben. Über die Funktion **Firmenname** können Sie einen anderen Firmennamen einstellen.

7.3.6 LIMS Konfigurator



Generell gibt es zwei Möglichkeiten, Messdaten des Photometers an ein Laborinformationssystem zu senden:

a) direkt

Schließen Sie das Photometer über die serielle Schnittstelle an das LIMS an. Nach jeder Messung werden die Daten beim Ziehen der Küvette gesendet. Dabei haben Sie keine Möglichkeit, das Datenformat zu beeinflussen. Ihr LIMS muss das MACHEREY-NAGEL Datenformat akzeptieren.

b) indirekt über einen PC

Schließen Sie Ihr Photometer per RS-232 oder USB an Ihren PC an. Schließen Sie Ihr LIMS über eine weitere RS-232 Schnittstelle an den gleichen PC an. Die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** kann nun die Daten Ihres Photometer an das LIMS weitersenden.

Der Vorteil dieser Möglichkeit besteht darin, dass Sie sowohl die Daten als auch die Art der Aussendung beeinflussen können.

Klicken Sie nun auf den Menübefehl **System/LIMS Konfigurator**. Das Konfigurations-Fenster wird geöffnet, siehe Abbildung 119.

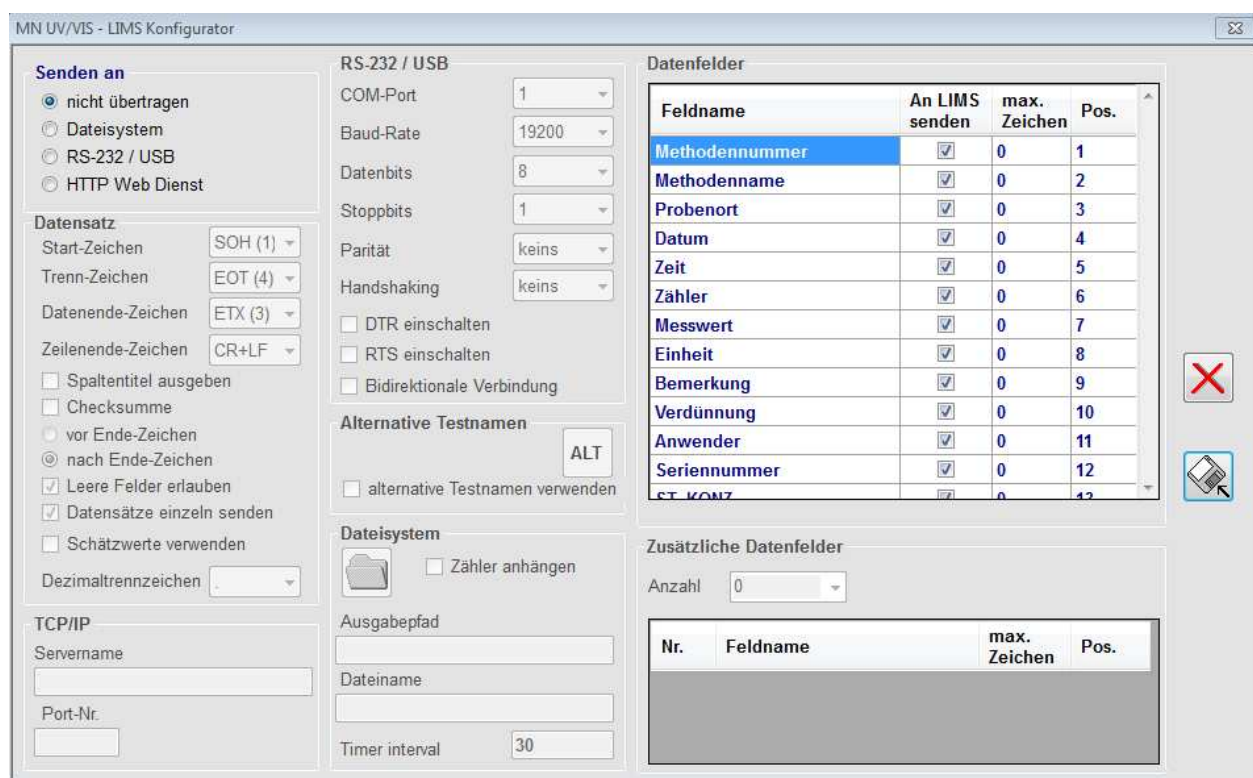


Abb. 119 : LIMS Konfigurator

Links oben befindet sich der Rahmen **Senden an**. Dort legen Sie die Art der Aussendung fest. Die erste Option **nicht Übertragen** deaktiviert die LIMS Funktion. Die zweite Option **Dateisystem** verschickt die Daten als Text-Datei. Sobald Sie diese Option aktivieren, wird der Rahmen **Dateisystem** aktiviert, siehe Abbildung 120.

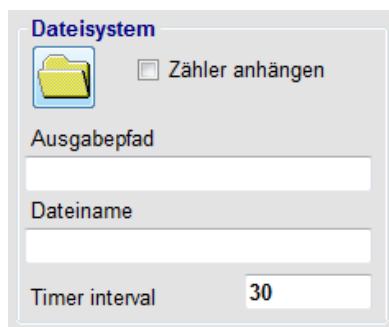


Abb. 120 : Daten als Datei senden



Über den Schalter  öffnen Sie ein Verzeichnis-Auswahlfenster. Stellen Sie dort das Verzeichnis ein, in das die Daten geschrieben werden sollen. Geben Sie in das Feld **Datei Name** den Namen der Textdatei an, den die Software erstellen soll. Wenn Sie die Funktion **Zähler anhängen** aktivieren, wird automatisch ein Zähler an den Dateinamen angehängen, aus z. B. *beispiel.txt* wird dann *beispiel_3.txt*.

Die Funktion **Dateisystem** setzt voraus, dass Ihr LIMS über einen Service verfügt, der Dateien automatisiert abholt und verarbeitet.

Die dritte Funktion des Rahmens **Senden an** , **RS-232/USB** , versendet die Messdaten über eine serielle Schnittstelle oder einen virtual-USB Adapter. Wenn die Funktion aktiv ist, wird der Rahmen **RS-232 / USB** aktiviert, siehe Abbildung 121.

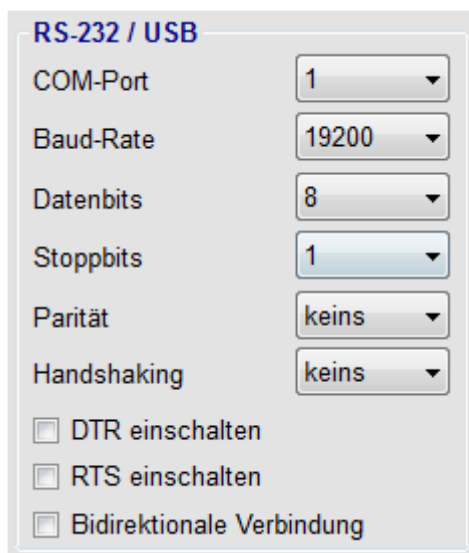


Abb. 121 : Daten über eine serielle Schnittstelle senden

Die Optionen dieses Rahmens sind selbsterklärend. Stellen Sie die Parameter ein, die von Ihrem LIMS benötigt werden.

Die letzte Möglichkeit, Daten zu senden können Sie über die Option **HTTP Web-Dienst** einstellen. Dabei werden die Daten über das PC-Netzwerk im TCP/IP Format gesendet. Wenn Sie diese Option einschalten, wird der Rahmen **TCP/IP** aktiviert, siehe Abbildung 122.



Abb. 122 : Daten per ICP/IP senden

Tragen Sie in das Feld **Servername** den gültigen Namen des Servers an, auf dem der LIMS-TCP/IP Listener läuft. Alternativ können Sie eine IP-Adresse angeben. Tragen Sie in das Feld **Port-Nr.** die Nummer des TCP/IP-Ports ein, auf der der Listener hört. Mit diesen Einstellungen können Sie Ihre Messdaten auch über das Internet versenden, wenn Sie Ihrer Firewall mitteilen, dass die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** über das Internet senden darf. **Diese Funktion setzt voraus, das Ihr LIMS über einen Service verfügt, der über einen TCP/IP-Port Daten einlesen kann.**

Nachdem Sie nun festgelegt haben, wie Sie Ihre Daten versenden, müssen Sie nun den Datensatz selber konfigurieren. Die wichtigsten Einstellungen nehmen Sie über den Rahmen **Datensatz** vor. Abbildung 123 zeigt den Rahmen **Datensatz**.

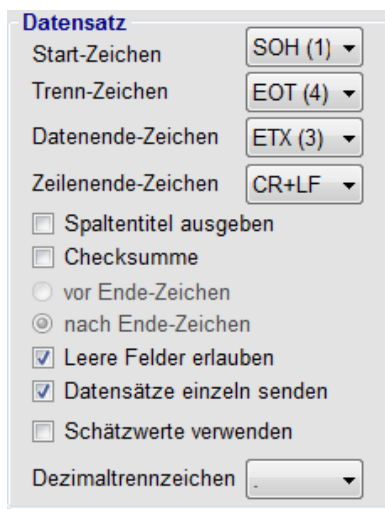


Abb. 123 : Konfigurieren des Datensatzes

Ganz allgemein sieht ein Datensatz wie folgt aus:

<Startzeichen>Datenfeld_1<Trennzeichen>Datenfeld_2<Endezeichen>
<Checksumme><Zeilenendezeichen>

Dabei können die Elemente in den spitzen Klammern teilweise fehlen. Üblicherweise wird als Startzeichen STX = ASCII 2 genutzt und als Endezeichen ETX = ASCII 3. Als Zeilenendezeichen wird entweder CR = ASCII 13 oder CR+LF = ASCII 13 + ASCII 10 verwendet. Als Trennzeichen wird üblicherweise ein Semikolon verwendet (was dann aber die Verwendung des Semikolon innerhalb eines Datenfeldes verbietet).

Ein Datensatz sieht also vereinfacht wie folgt aus:

STXDatenfeld_1;Datenfeld_2;Datenfeld_3ETXCR

Welche Zeichen Sie verwenden müssen, hängt von Ihrem LIMS ab. Mit den Optionen des Rahmens **Datensatz** können Sie alle üblichen Formate einrichten.

Da es verschiedene Möglichkeiten gibt, Checksummen zu berechnen, muss die NANOCOLOR® Spektrometer Software in der Regel umprogrammiert werden, wenn Sie Checksummen verwenden müssen. Setzen Sie sich in dem Fall bitte mit uns in Verbindung.

Eine Übersicht über die Datenfelder, die von unserem Photometer bereitgestellt werden, sehen Sie im rechten Bereich des Fensters, siehe Abbildung 124.

Datenfelder			
Feldname	an LIMS senden	max. Zeichen	Pos.
Methodennummer	☒	0	1
Methodenname	☒	0	2
Probenort	☒	0	3
Datum	☒	0	4
Zeit	☒	0	5
Zähler	☒	0	6
Messwert	☒	0	7
Einheit	☒	0	8
Bemerkung	☒	0	9
Verdünnung	☒	0	10
Anwender	☒	0	11
Seriennummer	☒	0	12

Abb. 124 : Datenfelder des Photometers

Die erste Spalte der Tabelle gibt den Feldnamen an. Mit Hilfe des Auswahlhäkchens in Spalte 2 können Sie festlegen, welches Datenfeld des Photometers an das LIMS gesendet werden soll: benötigt Ihr LIMS ein Datenfeld nicht, nehmen Sie einfach das Häkchen weg. Häufig ist die Anzahl an Zeichen eines jeden Datenfeldes begrenzt. Schreiben Sie in diesem Fall die Anzahl an erlaubten Zeichen in die dritte Spalte der

Tabelle. Ist dort eine 0 (Null) vermerkt, bedeutet das, es gibt keine Zeichenbegrenzung. Das Datenfeld kann also beliebig viele Zeichen aufnehmen. Wenn dort eine Zahl > 0 vermerkt ist, schneidet die Software das Datenfeld auf die erlaubte Anzahl ab, sollte das Photometer mehr Zeichen aussenden. Mit der letzten Spalte legen Sie die Position des Datenfeldes innerhalb Ihres LIMS-Datensatzes fest. Die in Abbildung 124 gezeigte Reihenfolge entspricht der Anordnung, die das **NANOCOLOR® Spektrometer** aussendet.

In einigen Fällen ist es erforderlich, zusätzliche Datenfelder in den Datensatz zu integrieren. Möchten Sie beispielsweise eine Auftragsnummer zu jeder Messung mit aufnehmen, gehen Sie bitte wie folgt vor:

Im unteren rechten Bereich des Fensters sehen Sie den Rahmen **Zusätzliche Datenfelder**, siehe Abbildung 125.

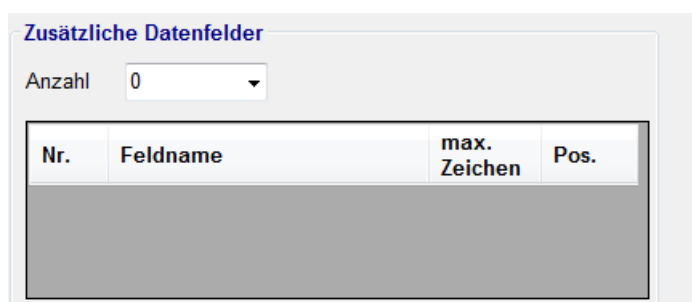


Abb. 125 : Rahmen Zusätzliche Datenfelder

Stellen Sie in der Liste **Anzahl** die Anzahl benötigter zusätzlicher Felder ein. Erstellen Sie einen eindeutigen Namen für das Datenfeld in der Spalte **Feldname**. Analog der Tabelle mit den Feldern des Photometers können Sie hier die maximale Zeichenanzahl und die Position im Datensatz festlegen, siehe Abbildung 126.



Nr.	Feldname	max. Zeichen	Pos.
1	Auftragsnummer	0	13

Abb. 126 : Definition eines zusätzlichen Datenfeldes

Wenn Sie auf diese Weise ein zusätzliches Datenfeld definiert haben und die



Einstellungen mit Hilfe des Schalters gespeichert wurden, öffnet die Software bei jeder Küvettenmessung (und bei jeder Zeile eines Datenexports) ein

Texteingabefenster, in das Sie die zusätzlichen Informationen eingeben müssen. Dies kann auch per angeschlossenen Barcodeleser erfolgen.

7.3.7 Sipper-Pumpe NANOCOLOR® FP 100

Die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** ist in der Lage, die Sipper-Pumpe FP 100 zu konfigurieren. Verbinden Sie dazu die Pumpe mit dem mitgelieferten Anschlusskabel und einem weiteren RS-232 Kabel mit Ihrem Computer und schalten Sie die Pumpe ein. Klicken Sie auf den Menübefehl **System/Einstellungen/FP 100**. Die Software meldet, an welchem Port die Pumpe gefunden wird, siehe Abbildung 127.

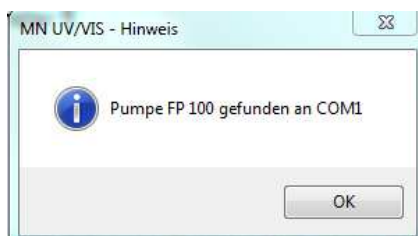


Abb. 127 : Sipper-Pumpe FP 100 gefunden

Klicken Sie auf **OK**. Die Software öffnet das FP 100 Einstellungen-Fenster, siehe Abbildung 128.

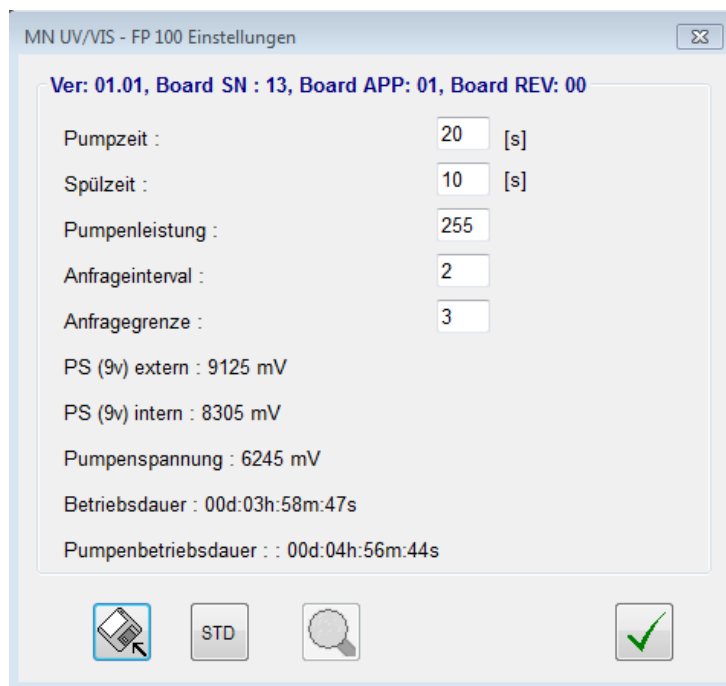


Abb. 128 : Sipper-Pumpe FP 100 Einstellungen



In der obersten Zeile des Fensters werden die Seriennummer und Revisionsnummern der Elektronik angezeigt. Mit der Einstellung **Pumpzeit** legen Sie fest, wie lange in Sekunden eine Pump-Aktion dauert, wenn einmal kurz auf den Auslöser der FP 100 gedrückt wird („pumpen“-Funktion). Die Option **Spülzeit** legt fest, wie lange in Sekunden eine Pump-Aktion dauert, wenn man einmal lang auf den Auslöser drückt („spülen“-Funktion). Mit der Funktion **Pumpleistung** kann die Leistung der Pumpe eingestellt werden. 30 ist die geringstmögliche Leistung, 255 die größte Pumpleistung.

Die Option **Anfrageinterval** bestimmt in Sekunden, in welchen Zeitabständen die Pumpe eine Kommunikation mit dem Spektrometer aufnimmt. **Anfragegrenze** ist die Anzahl an zulässigen negativen bzw. nicht durchgeführten Antworten des Spektrometers, nach der die Pumpe den Remote-Modus verläßt.

Mit dem Schalter  werden die Daten in die Pumpe geschrieben. Mit dem Schalter  können Sie Standard-Werte übernehmen. Sollte die Pumpe nicht sofort automatisch gefunden werden, kann mit dem Schalter  eine Suche manuell gestartet werden. Der Schalter  schließt das FP 100 Fenster.

Für weitere Informationen sehen Sie bitte in der Bedienungsanleitung Ihrer Sipper-Pumpe nach.

7.3.8 **NANOCOLOR® Testdaten**



Die **NANOCOLOR® Spektrometer Software** verwendet an verschiedenen Stellen Testspezifische Daten der **NANOCOLOR®** Küvettenteste. Für den Fall, das sich Test- oder Standard-Parameter ändern, können die Daten mit der Funktion **NANOCOLOR® Testdaten** angepasst werden.



Falsch eingestellte Testdaten können zu inkorrekt dargestellten IQK-Karten und zu falsch berechneten Schätzwerten für Messwerte außerhalb des Messbereichs führen. Führen Sie Änderungen an den Testdaten nur in Rücksprache mit MN durch!

7.4 Prüfmittelüberwachung (Arbeitsblatt DWA-A 704)

Die Funktionen des Rahmen **Geräte Test** dienen der Prüfmittelüberwachung nach Arbeitsblatt DWA A 704, IQK-Karte 9. Es stehen Tests zur Überprüfung der Leistung der Halogen- und Deuterium-Lampe, der Wellenlängenrichtigkeit, des Streulichtanteils, der photometrischen Richtigkeit (**NANOCHECK**) und zur Bestimmung des Signal/Rausch-Verhältnisses zur Verfügung. Der Funktionsrahmen wird in Abbildung 129 gezeigt.

MACHEREY-NAGEL empfiehlt, alle Tests mindestens halbjährlich durchzuführen.

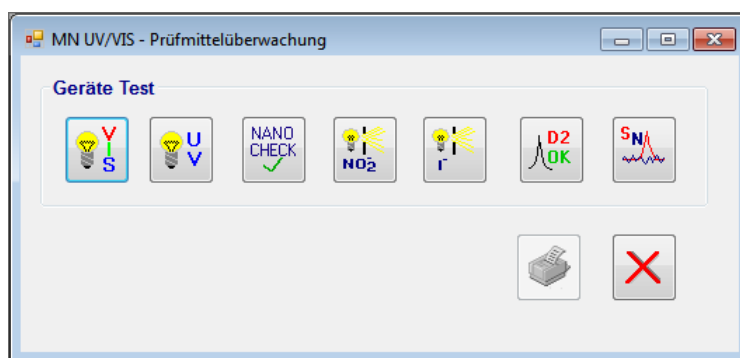


Abb. 129: Funktionsrahmen **Geräte Test**

7.4.1 Test der Halogenlampe



Der erste Schalter bestimmt den Energieverlauf der Halogenlampe des Photometers im sichtbaren Bereich. Die Messung wird als Scan im Scan-Fenster dargestellt (siehe Abbildung 130) und anschließend als Bericht ausgedruckt.

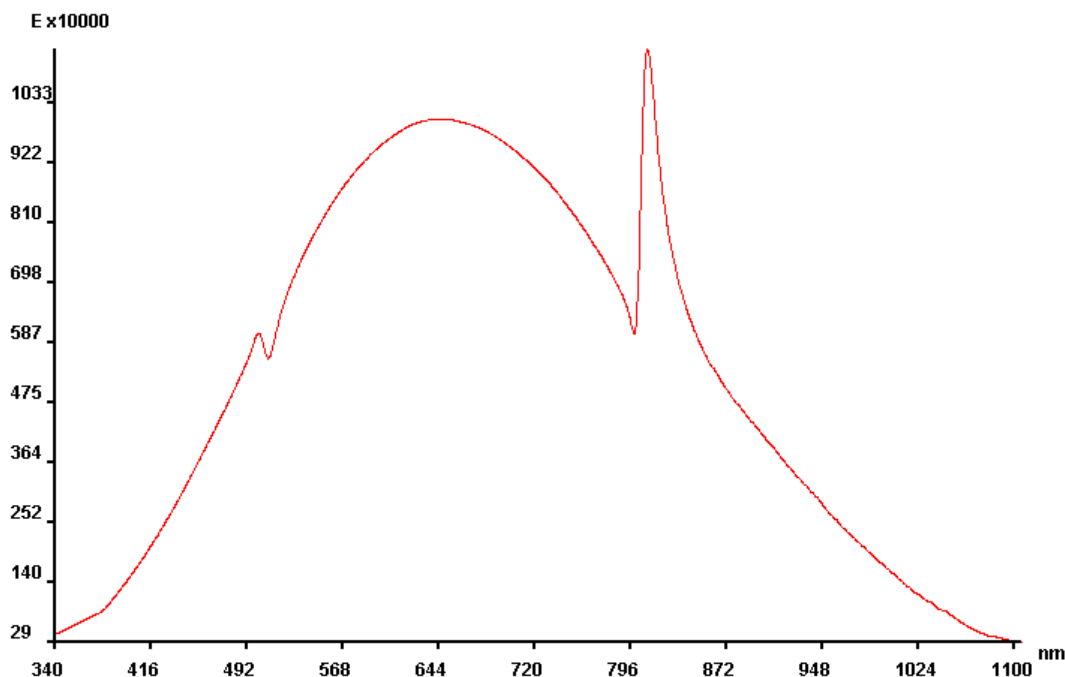


Abb. 130: Beispiel einer Lampenkennlinie (Halogenlampe)

Auf der Extinktionsachse werden relative Energiewerte angegeben, sie können zur Abschätzung der Lampenleistung verwendet werden und werden mit dem Protokoll, das nach der Messung automatisch erzeugt wird, ausgedruckt. Die Energiewerte der Wellenlängen bei 340 nm und 950 nm werden ermittelt und mit Referenzwerten verglichen. Nimmt die Lampenleistung unter die Referenzwerte ab, wird ein Lampenwechsel empfohlen.

7.4.2 Test der Deuteriumlampe

Analog zu Kapitel 7.4.2 können Sie mit dem zweiten Schalter  den Energieverlauf der Deuteriumlampe im UV Bereich bestimmen, wie in Abbildung 131 gezeigt.

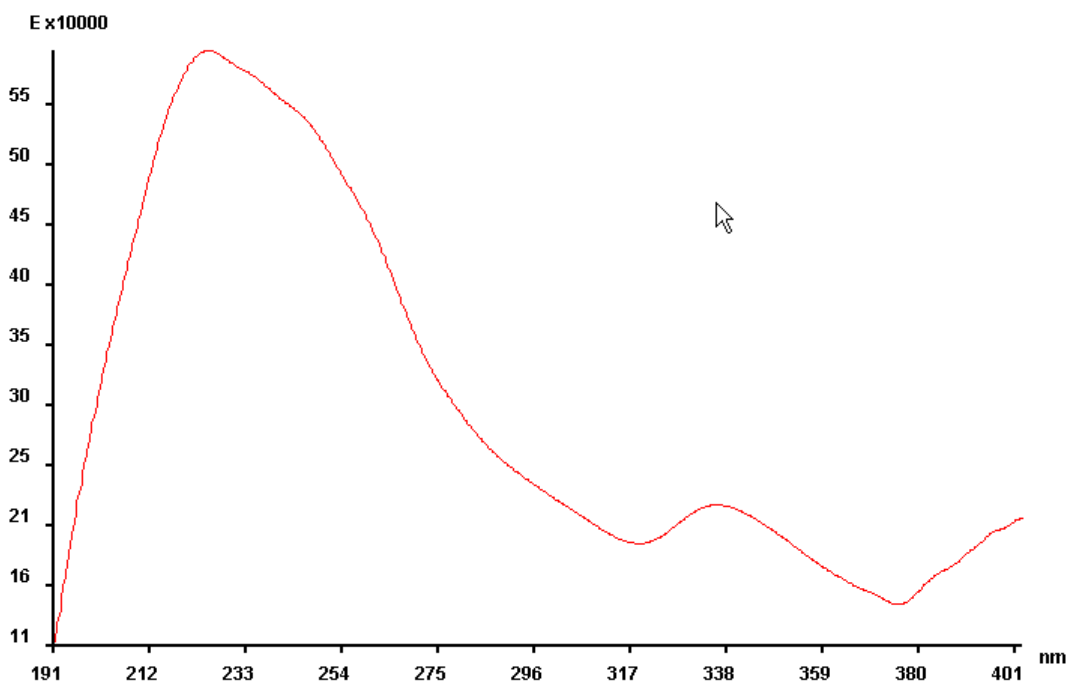


Abb. 131: Beispiel einer Lampenkennlinie (Deuteriumlampe)

Auf der Extinktionsachse werden relative Energiewerte angegeben, sie können zur Abschätzung der Lampenleistung verwendet werden und werden mit dem Protokoll, das nach der Messung automatisch erzeugt wird, ausgedruckt. Die Energiewerte der Wellenlängen bei 191 nm und 320 nm werden ermittelt und mit Referenzwerten verglichen. Nimmt die Lampenleistung unter die Referenzwerte ab, wird ein Lampenwechsel empfohlen.

7.4.3 Streulichttest nach DAB, Ph Eur



Mit dem Schalter führen Sie einen Streulicht-Test nach DAB und Ph. Eur. Bei 340 nm und 370 nm durch. Zur Durchführung eines Streulichttestes benötigen Sie ein Streulichttest-Kit, z. B. MERCK UV-VIS Standard 2 (Art. No. 1.08161.0001) und eine 10 mm Quarzküvette. Eine Alternative zu dem Testkit ist eine Lösung aus 50 g Natriumnitrit (p.a.) oder 61,5 g Kaliumnitrit (p.a.) in 1 l Reinstwasser.

Zur Durchführung des Testes klicken Sie auf den oben gezeigten Schalter und warten Sie, bis die Nullmessung gegen Luft durchgeführt wurde. Setzen Sie die 10 mm Küvette mit der Testlösung ein und drucken Sie nach der Messung das Ergebnis aus.

7.4.4 Streulichttest Kaliumiodid 220 nm



Mit dem Schalter führen Sie einen alternativen Streulicht-Test bei 220 nm durch.

7.4.5 Wellenlängenrichtigkeit



Der Schalter führt einen Test auf Wellenlängenrichtigkeit durch. Bei einem **NANOCOLOR®** ^{UV}/_{VIS} wird dabei ein Scan mit der Deuteriumlampe im visuellen Bereich von 450 nm bis 700 nm durchgeführt und die Position von drei Emissionslinien des Deuteriums mit Literaturwerten verglichen. Bei einem **NANOCOLOR®** ^{VIS} wird ein Scan mit dem internen Holmiumoxid Filter durchgeführt und 4 Referenzpeaks des Holmium-Absorptionsspektrums für die Prüfung verwendet. Abbildung 132 zeigt den Scan eines **NANOCOLOR®** ^{UV}/_{VIS} und Abbildung 133 den Test eines **NANOCOLOR®** ^{VIS}.

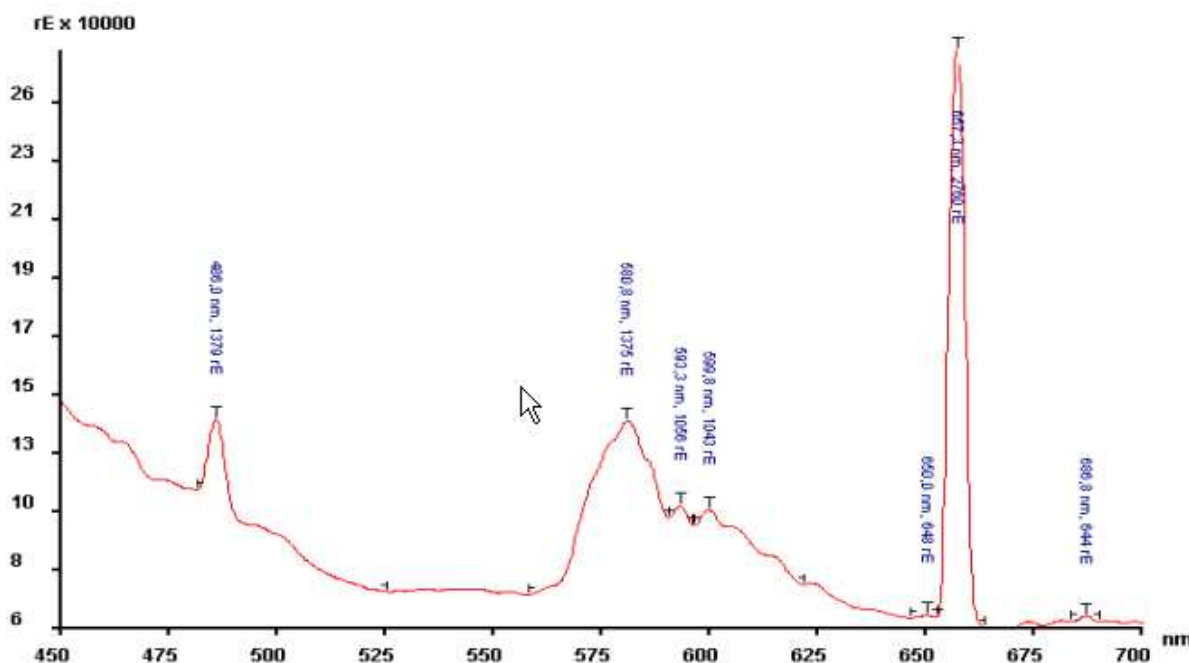


Abb. 132: Test auf Wellenlängenrichtigkeit mit Deuterium-Lampe

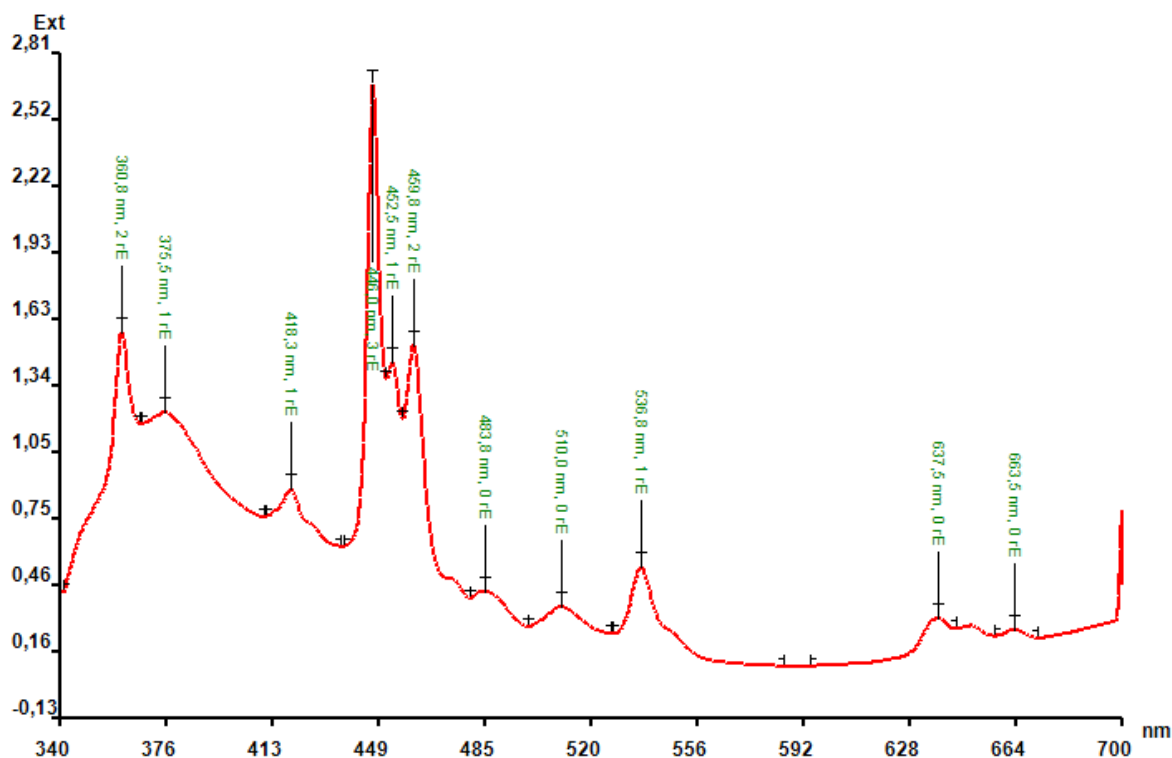


Abb. 133: Test auf Wellenlängenrichtigkeit mit Holmiumoxid-Filter

Die Referenz-Wellenlängen für das **NANOCOLOR®^{UV}/VIS** liegen bei 486,0 nm, 581,8 nm und 656,1 nm.

Die Referenz-Wellenlängen für das **NANOCOLOR® VIS** liegen bei 360,5 nm, 453,3 nm, 536,6 nm und 637,2 nm.

Die gemessenen Abweichungen dürfen 1 nm je Wellenlänge nicht überschreiten. Nach der Testdurchführung wird automatisch ein Testprotokoll gedruckt.

7.4.6 Photometrische Richtigkeit mit **NANOCHECK**



Mit dem Schalter  können Sie einen Test auf photometrische Richtigkeit durchführen. Zur Durchführung dieses Tests benötigen Sie ein **NANOCHECK**-Testkit von MACHEREY-NAGEL, Artikelnummer 925701.

Wenn Sie auf obigen Schalter klicken, öffnet sich das **NANOCHECK**-Fenster, siehe Abbildung 134

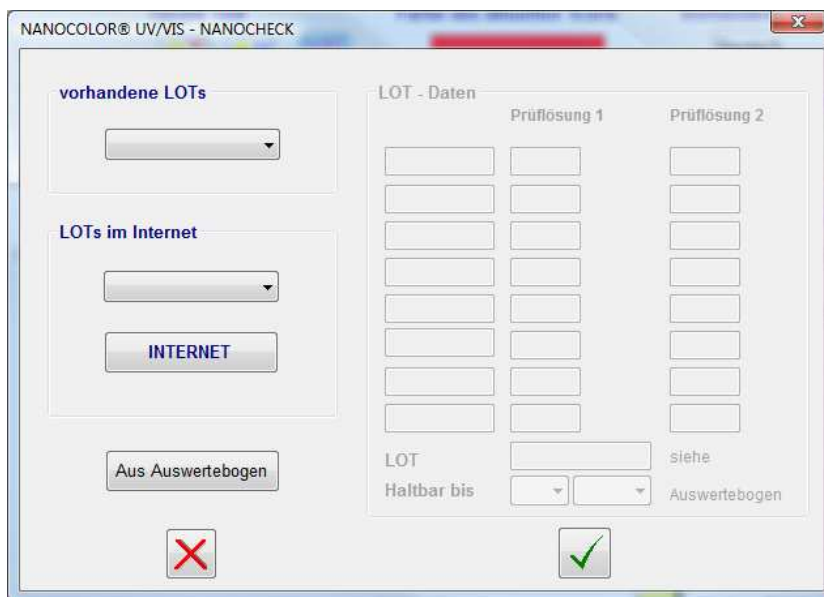
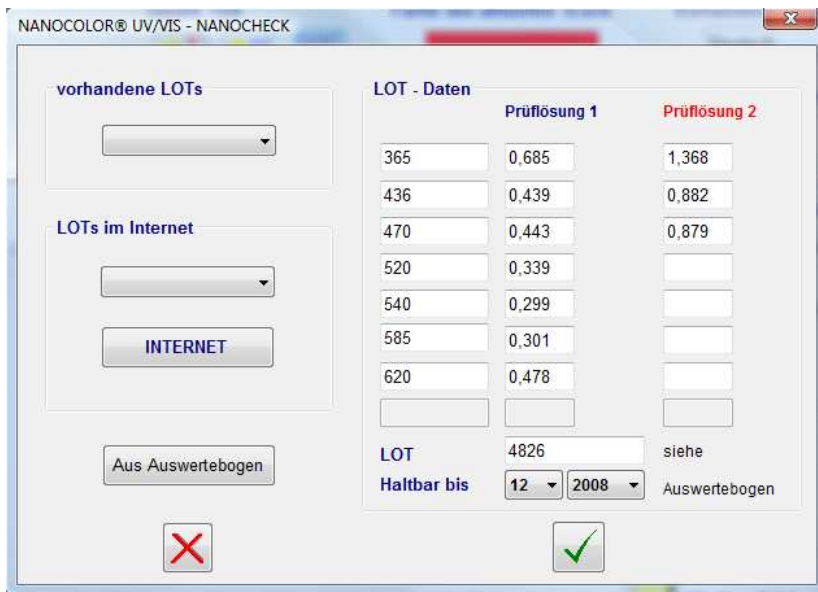


Abb. 134: **NANOCHECK**-Fenster

Der **NANOCHECK**-Test arbeitet mit chargenspezifischen Testwerten. Diese müssen zunächst in das **NANOCHECK**-Fenster eingegeben werden. Das kann auf verschiedenen Wegen erfolgen:

A) Im einfachsten Fall klicken Sie einfach auf den Schalter **Aus Auswertebogen**. Die im **NANOCHECK**-Fenster auf der rechten Seite gelegenen Eingabefelder werden aktiviert. Klicken Sie die Felder nacheinander mit der Maus an und tippen Sie die Sollwerte der Extinktion nach dem Auswertebogen Ihres **NANOCHECK**-Testes ein, siehe als Beispiel Abbildung 135.



The screenshot shows the 'NANOCOLOR® UV/VIS - NANOCHECK' window. It contains two dropdown menus on the left: 'vorhandene LOTs' and 'LOTs im Internet', with an 'INTERNET' button below the second. A table in the center is titled 'LOT - Daten' and has three columns: 'Wellenlänge (nm)', 'Prüflösung 1', and 'Prüflösung 2'. The table contains several rows of data. Below the table, there are fields for 'LOT' (4826), 'Haltbar bis' (12/2008), and a 'siehe Auswertebogen' link. At the bottom, there are red 'X' and green checkmark buttons.

Wellenlänge (nm)	Prüflösung 1	Prüflösung 2
365	0,685	1,368
436	0,439	0,882
470	0,443	0,879
520	0,339	
540	0,299	
585	0,301	
620	0,478	

Abb. 135: NANOCHECK-Fenster, Eingabe der Testwerte

Füllen Sie alle Felder aus, die sich in einer Zeile mit Wellenlängenangabe befinden. Zeilen ohne Wellenlängenangabe lassen Sie aus.

B) Die zweite Möglichkeit besteht darin, einen bereits gespeicherten **NANOCHECK** Test aufzurufen. Jeder **durchgeführte NANOCHECK**-Test wird automatisch auf der Festplatte Ihres Computers gespeichert, die Testwerte stehen damit weiteren Testen zur Verfügung. Öffnen Sie die Liste vorhandene LOTs. Dort werden alle **NANOCHECK**-LOTs angezeigt, die sich auf Ihrer Festplatte befinden. Wählen Sie Ihren LOT aus, die Eingabefelder werden dann automatisch gefüllt. **Haben Sie noch keinen NANOCHECK Test durchgeführt und keine Daten aus dem Internet geladen, ist diese Liste leer.**

C) Verfügt Ihr Rechner über eine Internetverbindung, können Sie auch auf den Schalter Internet im Rahmen LOTs im Internet klicken. Die Software sucht nun auf dem MACHEREY-NAGEL Internet-Server nach aktuellen **NANOCHECK**-Informationen. Alle im Internet gefundenen LOT-Nummern werden in der Liste über dem Schalter Internet angezeigt. Wenn Sie eine LOT-Nummer in dieser Liste auswählen, wird diese LOT-Information aus dem Internet geladen und auf Ihrer Festplatte gespeichert. Sie können dieses LOT nun über die Liste vorhandene LOTs auswählen.

Sind alle Datenfelder gefüllt, klicken Sie auf den Schalter Ausführen. Das Programm fordert Sie nun auf, die NULL-Küvette einzusetzen. Warten Sie, bis das Photometer alle Wellenlängen vermessen hat. Danach setzen Sie nach Aufforderung die Prüflösung 1 ein. Warten Sie, bis alle Wellenlängen gemessen wurden. Nun setzen Sie die Prüflösung 2 ein und messen wieder alle Wellenlängen.

Das Testergebnis wird in Protokollform ausgedruckt.

7.4.7 Bestimmung des Signal/Rauschverhältnisses



Der Schalter ermöglicht die Durchführung eines Signal/Rauschen-Testes. Der Test kann im visuellen Bereich bei den Wellenlängen 345 nm, 436 nm, 540 nm, 585 nm und 700 nm oder im UV-Bereich bei 220 nm, 260 nm, 280 nm, 334 nm und 366 nm durchgeführt werden. Weiterhin kann der Test mit und ohne NULL-Küvette erfolgen. Welcher Test durchgeführt wird, wird über die Tasten **[STRG]** und **[ALT]** gesteuert:



visuell ohne NULL



UV ohne NULL [STRG] und



visuell mit NULL [ALT] und



UV mit NULL [STRG & ALT] und

Der Test führt jeweils 50 Einzelmessungen durch und bestimmt die Signalstreuung des Detektors. **Achtung, dieser Test dauert über 10 Minuten!** Abbildung 136 zeigt einen Ausschnitt aus dem Messprotokoll dieses Testes.

Prüfbericht

13.01.2009

NANOCOLOR® UV / vis

Signal / Rauschen

Photometer S/N : NUV0027

Firma : MACHEREY-NAGEL GmbH & Co. KG

Prüfer : WieczorrekC

N = 50 , α = 95%

345 nm : I0 = 8927 , s = 4 = 0,04 %

Delta 2 mE (0.5 E), 6 mE (1.0 E), 63 mE (2.0 E)

436 nm : I0 = 91863 , s = 34,6 = 0,04 %

Delta 2 mE (0.5 E), 5 mE (1.0 E), 52 mE (2.0 E)

540 nm : I0 = 282895 , s = 63,9 = 0,02 %

Delta 1 mE (0.5 E), 3 mE (1.0 E), 30 mE (2.0 E)

585 nm : I0 = 404769 , s = 26,7 = 0,01 %

Delta < 1 mE (0.5 E), 1 mE (1.0 E), 9 mE (2.0 E)

700 nm : I0 = 425151 , s = 57,9 = 0,01 %

Delta 1 mE (0.5 E), 2 mE (1.0 E), 18 mE (2.0 E)

Abb. 136 : Messprotokoll Signal/Rauschen Test

Für jede Wellenlänge wird der mittlere Detektorwert I_0 und die Standardabweichung s der Streuung angegeben.

Weiterhin wird der zu erwartende mittlere Fehler *Delta* einer Einzelmessung in Milliextinktionen (mE) für zu erwartende Messgrößen von 0,5 E, 1 E und 2 E angezeigt.

7.5 LOG Dateien anzeigen

Die Menüfunktion *LOG Datei ansehen* öffnet ein Fenster, das Ihnen die Möglichkeit bietet, alle von der Software erstellten LOG-Dateien anzusehen, siehe Abbildung 137.

Mit den Schaltern **ERROR**, **SYSTEM** und **PC** werden die entsprechenden LOG-

Dateien geöffnet und in dem Textfenster angezeigt. Der Schalter  kopiert den LOG-Eintrag oder die Textauswahl in die Zwischenablage.

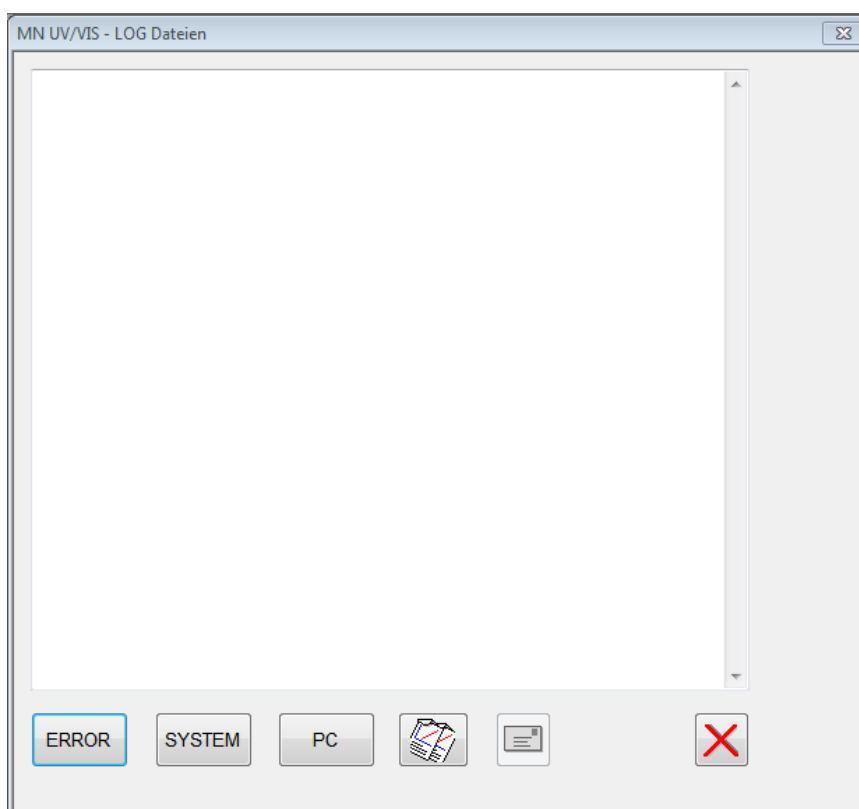


Abb. 137 : LOG Dateien ansehen

Ist die Option **Fehlerbericht erlauben** in den allgemeinen Einstellungen aktiv,

aktiviert sich der Schalter  bei einem angezeigten Fehlerbericht.



Wenn Sie auf den Schalter klicken, werden Sie von der Software gefragt, ob Sie wirklich einen Fehlerbericht an MACHEREY-NAGEL senden möchten. Klicken Sie auf **Ja**. Es öffnet sich ein Fenster, in dem Sie bitte Ihren Name, Telefonnummer und e-mail Adresse sowie eine kurze Beschreibung des Fehlers angeben. Klicken Sie nun auf den **OK** Schalter. Das Senden der Nachricht kann unter Umständen länger als eine Minute dauern (je nach Qualität der Internetverbindung). Abbildung 138 zeigt das Adressfenster.

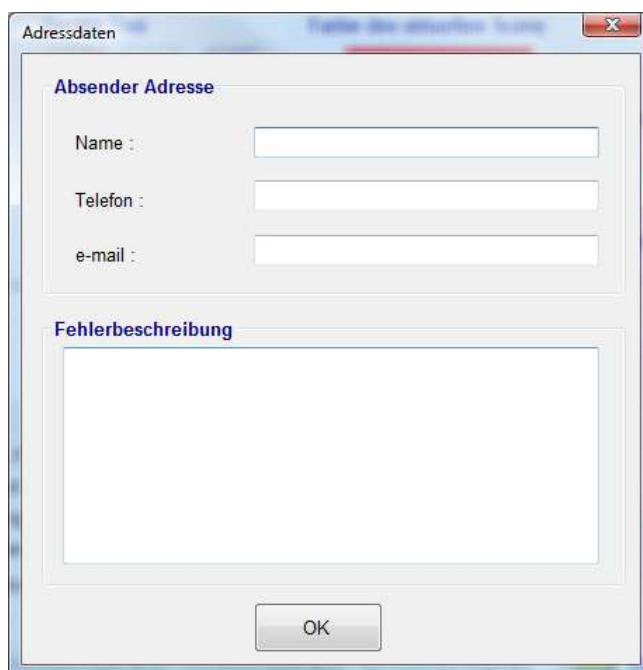


Abb. 138: Adressfenster des Fehlerberichts



Diese Funktion verwendet Port 25. Möglicherweise wird dieser Port von einem Virens Scanner oder einer Firewall auf Ihrem lokalen Rechner gesperrt. In diesem Fall wenden Sie sich bitte an Ihren Systemadministrator. Besteht keine Internetverbindung, sind diese Funktionen deaktiviert.

7.6 Hashcode zeigen

Um allen Ansprüchen der GLP zu genügen, werden die ausgegebenen Protokolle mit speziellen Codes, sog. Hash-Codes versehen. In diesen Codes sind z.B. die Anwendernamen verschlüsselt. Mit dieser Maßnahme soll das Fälschen von Mess-Protokollen erschwert werden. Wenn Sie ein Protokoll auf Echtheit überprüfen müssen, klicken Sie auf den Menübefehl **Hashcode zeigen**. Das Hashcode Fenster wird in Abbildung 139 gezeigt.

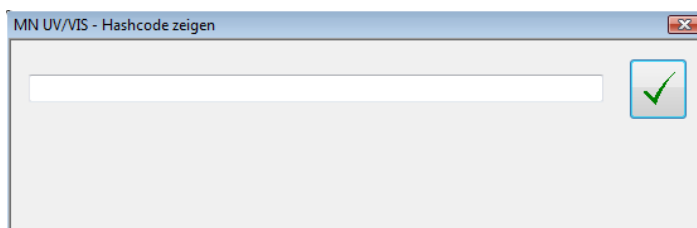


Abb. 139 : Hashcode zeigen

Geben Sie in das Textfeld zum Beispiel den im Protokoll angegebenen Anwendernamen ein und klicken Sie auf den Schalter mit dem grünen Häkchen. Der User-Hashcode wird berechnet und unterhalb des Textfeldes angezeigt. Der angezeigte Code und der Code auf dem Messprotokoll müssen identisch sein.

7.7 GUID's verwalten

Ein Globally Unique Identifier (GUID) ist eine global eindeutige Zahl mit 128 Bit (das sind 16 Bytes), die in verteilten Computersystemen zum Einsatz kommt. GUID stellt eine Implementierung des Universally Unique Identifier-Standards (UUID) dar. Damit lassen sich z. B. Dokumente weltweit einmalig identifizieren.

Als zusätzliche Sicherheit haben Sie die Möglichkeit, jedes ausgedruckte Dokument mit einer solchen GUID zu versehen. Sie schalten diese Funktion über das Einstellungen-Menü mit der Funktion **GUID's verwenden** ein (siehe 6.1). Wenn Sie diese Funktion verwenden, werden alle durch die Software erzeugten GUID's in einer Datenbank gespeichert. Die Menüfunktion **GUID's verwalten** öffnet diese Datenbank und zeigt die erstellten GUID's an. Durch einen Vergleich können Sie so feststellen, ob die GUID eines Dokumentes tatsächlich von dieser Software erstellt wurde. Abbildung 140 zeigt die GUID-Datenbank.

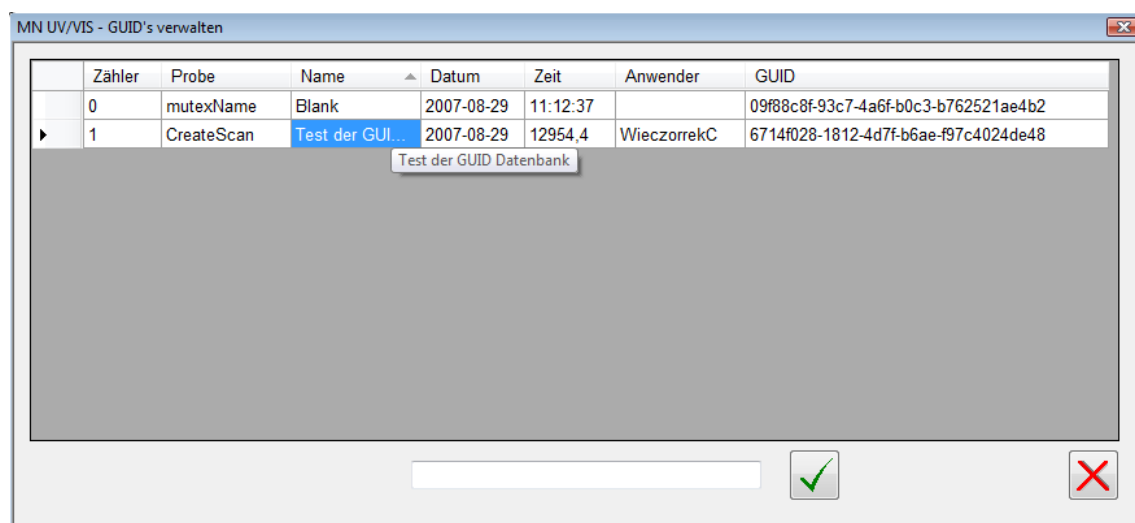


Abb. 140 : GUID-Datenbank

Abbildung 141 zeigt einen Ausschnitt aus einem gedruckten Wellenlängen-Scan. In der letzten Zeile sehen Sie die verwendete GUID. Sie ist mit der in Zeile 2 der Datenbank identisch.

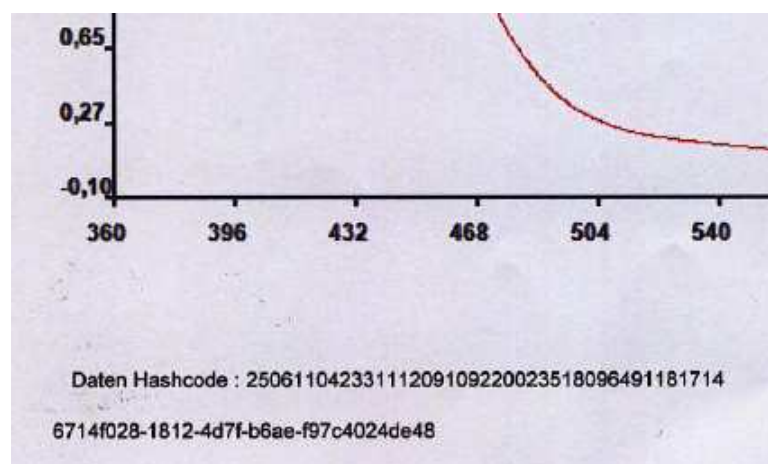


Abb. 141 : GUID auf einem Scanausdruck



8 Anhang

8.1 Export des Photometerspeichers nach ASCII

Mit dieser Funktion können Sie den Inhalt des Arbeitsspeichers in eine Semikolonformatierte Textdatei exportieren. Jedes Datenfeld wird durch ein Semikolon getrennt, jeder Datensatz befindet sich in einer Zeile und wird durch CR+LF abgeschlossen. Die erste Zeile der Datei enthält die Spaltenüberschriften. Ausdruck 1 zeigt eine kurze Beispieldatei.

Methodennummer;Methodenname;Probenort;Datum;Zeit;Zaehler;Messwert;Einheit;Bemerkung;Verduennung;Anwender;Seriennummer;Dezimalen;Senden;ST_KONZ;ST_KONZ_DE;LOT_TEST;LOT_ST_IQC_M_Counter;IQC_D_Counter;E;NTE;Set_NTU

```
0261;CSB160;DDORF;2008.02.03;10:45;2;86;mg/l02;;0;Tim;NUV0027;0;True;80;5;A456852;X258456;;;0.354;0;20
0261;CSB160;DDORF;2008.02.03;10:45;1;86;mg/l02;;0;Tim;NUV0027;0;True;80;5;A456852;X258456;;;0.354;0;20
0231;CSB160;DDORF;2008.02.03;08:20;1;;g/l02;<1.00;0;Hans;NUV0027;2;True;80;5;A456852;X258456;;;0.354;0;20
0261;CSB160;Koeln;2008.02.03;12:45;1;84;mg/l02;;0;Hans;NUV0027;0;True;80;5;A456852;X258456;;;0.354;0;20
```

Ausdruck 1 : ASCII-Exportdatei der Photometer-Daten



8.2 Export des Photometerspeichers nach XML

Das XML-Format gestattet die einfache Übernahme der Daten in Datenbankprogramme. Das verwendete XML-Schema wird in Ausdruck 2 angegeben.

```
<xs:schema id="NewDataSet" xmlns="" xmlns:xs="http://www.w3.org/2001/XMLSchema"
  xmlns:msdata="urn:schemas-microsoft-com:xml-msdata">
  <xs:element name="NewDataSet" msdata:IsDataSet="true"
    msdata:UseCurrentLocale="true">
    <xs:complexType>
      <xs:choice minOccurs="0" maxOccurs="unbounded">
        <xs:element name="Table1">
          <xs:complexType>
            <xs:sequence>
              <xs:element name="Methodennummer" type="xs:string" minOccurs="0" />
              <xs:element name="Methodenname" type="xs:string" minOccurs="0" />
              <xs:element name="Probenort" type="xs:string" minOccurs="0" />
              <xs:element name="Datum" type="xs:string" minOccurs="0" />
              <xs:element name="Zeit" type="xs:string" minOccurs="0" />
              <xs:element name="Zaehler" type="xs:int" minOccurs="0" />
              <xs:element name="Messwert" type="xs:double" minOccurs="0" />
              <xs:element name="Einheit" type="xs:string" minOccurs="0" />
              <xs:element name="Bemerkung" type="xs:string" minOccurs="0" />
              <xs:element name="Verduennung" type="xs:string" minOccurs="0" />
              <xs:element name="Anwender" type="xs:string" minOccurs="0" />
              <xs:element name="Seriennummer" type="xs:string" minOccurs="0" />
              <xs:element name="Dezimalen" type="xs:int" minOccurs="0" />
              <xs:element name="Senden" type="xs:boolean" minOccurs="0" />
              <xs:element name="ST_KONZ" type="xs:double" minOccurs="0" />
              <xs:element name="ST_KONZ_DE" type="xs:double" minOccurs="0" />
              <xs:element name="LOT_TEST" type="xs:string" minOccurs="0" />
              <xs:element name="LOT_ST" type="xs:string" minOccurs="0" />
              <xs:element name="IQC_M_Counter" type="xs:int" minOccurs="0" />
              <xs:element name="IQC_D_Counter" type="xs:int" minOccurs="0" />
              <xs:element name="E" type="xs:double" minOccurs="0" />
              <xs:element name="NTE" type="xs:int" minOccurs="0" />
              <xs:element name="Set_NTE" type="xs:int" minOccurs="0" />
            </xs:sequence>
          </xs:complexType>
        </xs:element>
      </xs:choice>
    </xs:complexType>
  </xs:element>
</xs:schema>
```

Ausdruck 2 : XML Datenschema der Photometer-Daten

Einen Beispiel-Datensatz können Sie in Ausdruck 3 sehen. Die Daten für Probenort, Verdünnung und Anwender werden nur ausgegeben, wenn sie im Photometer entsprechend definiert und bei der Messung angegeben wurden. Liegt der Messwert außerhalb des Messbereiches des verwendeten Testes, erkennbar an dem vorangestellten größer (>) oder kleiner (<) Zeichen, wird der Wert im Feld Bemerkung ausgegeben.



```
<Table1>
  <Methodennummer>0261</Methodennummer>
  <Methodenname>CSB160</Methodenname>
  <Probenort>DDORF</Probenort>
  <Datum>2022.02.03</Datum>
  <Zeit>10:45</Zeit>
  <Zaehler>2</Zaehler>
  <Messwert>86</Messwert>
  <Einheit>mg/l 02</Einheit>
  <Bemerkung xml:space="preserve"> </Bemerkung>
  <Verduennung>0</Verduennung>
  <Anwender>Anwender</Anwender>
  <Seriennummer>NUV0027</Seriennummer>
  <Dezimalen>0</Dezimalen>
  <Senden>true</Senden>
  <ST_KONZ>80</ST_KONZ>
  <ST_KONZ_DE>5</ST_KONZ_DE>
  <LOT_TEST>J852456</LOT_TEST>
  <LOT_ST>A456789</LOT_ST>
  <IQC_M_Counter>5</IQC_M_Counter>
  <IQC_D_Counter>1</IQC_D_Counter>
  <E>0.256</E>
  <NTU>0</NTU>
  <Set_NTU>20</Set_NTU>
</Table1>
```

Ausdruck 3 : XML Datensatz

8.3 Export eines Scans, Format ASCII

Bei dem Export eines Scans in das ASCII Format wird jede Zeile mit CR+LF beendet. Alle Felder werden durch Semikolon getrennt. Die Datei enthält 3 bis 4 Datenteile. Teil 1 gibt die Zusatzinformationen des Scans in der Form

Beschreibung-Semikolon-Wert

wieder.

Teil 2 gibt die Datentabelle des Scans in der Form

Nummer-Semikolon-Nanometer-Semikolon-Ext.-Semikolon-geglättete Ext.

wieder.

Im dritten Teil werden die Daten in Transmission ausgegeben.

Nummer-Semikolon-Nanometer-Semikolon-Trans%-Semikolon-gegl. Trans%

Wurde eine NULL-Linie für diesen Scan berechnet, wird sie im vierten Teil in der Form

Nummer-Semikolon-Nanometer-Semikolon-Ext.



ausgegeben. Der Folgende Ausdruck 4 zeigt eine (stark gekürzte) Beispieldatei.

```
Titel : ;Beispielexport ASCII
Bezeichnung : ;Holmiumoxid-Filter
Küvette : ;14 mm
Probennummer : ;002
Operator : ;Dr. Carsten Wieczorrek
Datum : ;25.09.2006;Uhrzeit : ;04:28
Photometer : ;NANOCOLOR® UVIS
Seriennummer : ;000011
Dateiname : ;D:\net_projekte\test.txt
```

```
TimeStamp :; 0
```

```
No.;nm;Ext;Ext2
37;259,2;0;-0,003
38;259,5;0;-0,01
39;259,8;0;-0,025
40;260;-0,05;-0,045
41;260,2;-0,1;-0,054
```

```
No.;nm;T[%];T2[%]
37;259,2;100;100,7
38;259,5;100;102,3
39;259,8;100;105,9
40;260;112,2;110,9
41;260,2;125,9;113,2
```

```
No.;nm;Ext
37;259,2;0,232
38;259,5;0,232
39;259,8;0,232
40;260;0,232
41;260,2;0,232
```

Ausdruck 4 : ASCII-Export eines Scans

8.4 Export eines Scans, Format netCDF / ANDI

Das ANDI-Protokoll (Analytical Data Interchange) ist eine US-amerikanische Norm für die programm- und plattformunabhängige Speicherung chromatographischer und spektroskopischer Daten. Ziel ist es, alle Daten direkt miteinander vergleichen zu können, egal mit welchem Gerät und auf welcher Computerplattform die Messung durchgeführt wurde. Gleichzeitig sollen bei den großen anfallenden Datenmengen hohe Kompressionsraten erzielt werden, um Speicherplatz zu sparen.

Definiert ist die Norm in **ASTM E 1947 -98 (2004)** und **ASTM E 1948 -98 (2004)**. Weitere Informationen können unter www.astm.org bezogen werden.

Technische Plattform des ANDI-Protokolls ist das netCDF (network Common Data Form) Interface. netCDF ist ein Satz mehrerer Interfaces für Array-orientierten Datenzugriff. Die netCDF Bibliotheken unterstützen ein plattformunabhängiges Format für die Repräsentation wissenschaftlicher Daten. Weitere Informationen zu netCDF finden Sie unter www.unidata.ucar.edu

Da gespeicherte ANDI / netCDF Dateien binär codiert sind, sind sie ohne entsprechende Software nicht lesbar. Wenn Sie wissen wollen, welche Informationen in einer netCDF Datei gespeichert werden, müssen Sie folgenden Weg gehen:

Klicken Sie auf *Start/Ausführen*. Geben Sie in die Zeile **Öffnen:** **cmd** ein und klicken Sie auf **OK**. Es öffnet sich die Windows-Kommandozeile, siehe Abbildung 142.

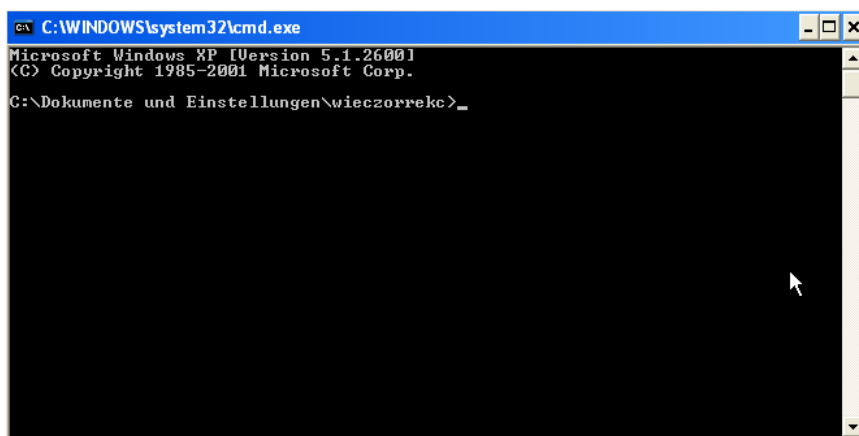


Abbildung 142 : Windows® Kommandozeile

Tippen Sie **cd** ein und drücken Sie die **[ENTER]** Taste. Anschließend wechseln Sie in das Installationsverzeichnis Ihrer **NANOCOLOR® Spektrometer Software** und dort in das Verzeichnis *ncdump* (siehe Abbildung 143).

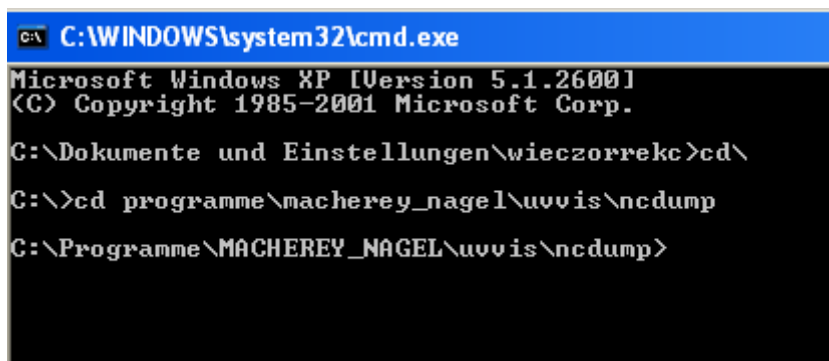


Abbildung 143 : Wechseln in das Installationsverzeichnis

Dort geben Sie folgenden Aufruf ein (die Pfade und Dateinamen sind nur Beispiele!):



ncdump c:\export\uvvis.cdf > c:\export\uvvis.txt

Das Programm **ncdump** liest alle Daten der binär verschlüsselten Datei *c:\export\uvvis.cdf* und schreibt sie als lesbaren Text in die Datei *c:\export\uvvis.txt*. Die Datei *c:\export\uvvis.txt* kann nun von Ihnen geöffnet werden. Von der **NANOCOLOR® Spektrometer Software** oder anderer spektroskopischer Software kann diese Datei nicht gelesen werden.

8.5 Literaturangaben zu den Bio-Testen

Konzentrationsbestimmung von ss-DNA, ds-DNA und ss-RNA aus:

Frederick M. Ausubel et. al.
Short Protocols in Molecular Biology, 4th Ed
A3-11 (1999)
John Wiley.

Konzentrationsbestimmung von Proteinen, A280 nm – A260 nm Methode

C. K. Woodward, B. D. Hilton
Annu. Rev. Biophys. Bioeng. 8
99-127 (1979).

Konzentrationsbestimmung von Proteinen, A215 nm – A225 nm Methode

W. Jencks
Catalysis in Chemistry and Enzymology
417-436 (1969)
McGraw-Hill, New York.

Konzentrationsbestimmung von Proteinen, A235 nm – A280 nm Methode

S. W. Englander, N. R. Kallenbach
Q. Rev. Biophys. 16
521-655 (1984).

NULL-Wertbestimmung bei Referenzwellenlänge 320 nm

Warburg, O.; Christian, W.
Biochem. Z. 310
384-421 (1942).



8.6 Angaben zur Glättungsfunktion

Die Messwerte der Wellenlängen-Scans können geglättet werden. Die verwendete Glättungsfunktion bestimmt den geglätteten Messwert eines Punktes $F(x_i)$ aus der gewichteten Mittelung von 27 Messpunkten $f_i \circ x_i$ mit dem eigentlichen Messpunkt als Zentrum. Die Wichtungsfaktoren f_i werden einer Standard-Gauss-Funktion entnommen (siehe Formel 1). Die Stärke der Glättung wird über die Standardabweichung der Gauss-Funktion bestimmt. Der in dieser Software einstellbare Glättungsfaktor entspricht σ .

$$F(x_i) = \sum_{i=-13}^{i+13} f_i \cdot x_i$$
$$f_i = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma} \cdot e^{-\frac{i^2}{2\sigma^2}}$$

Formel 1 : Glättungsfunktion

8.7 Sprachauswahl der Software

Die Software **NANOCOLOR®** ^{UV}/_{VIS} wird in der Version 4.5 in den Sprachen Deutsch, Englisch, Französisch, Polnisch und Spanisch ausgeliefert. MACHEREY-NAGEL bemüht sich, weitere Sprachen zur Verfügung zu stellen. Wenn Sie eine Sprache selber programmieren möchten, können Sie wie folgt vorgehen:

1. Erstellen Sie eine Sicherheitskopie der Datei *mn_uvis_language.xml* aus dem Verzeichnis *language* im Installationsverzeichnis dieser Software.
2. Starten Sie das Programm LANGUAGE_TOOL aus dem Verzeichnis *language* im Installationsverzeichnis dieser Software.
3. Klicken Sie auf **Language File / Open Language File**
4. Wählen Sie in dem Dateiauswahlfenster die Datei *mn_uvis_language.xml* aus.
5. Klicken Sie auf **Modify Language File / New Language**
6. Geben Sie den Namen der Sprache ohne Sonderzeichen an (also z.B. „Francais“ und **nicht** „Français“)
7. Übersetzen Sie alle Texte und füllen Sie die neue Sprachspalte aus
8. Klicken Sie auf **Language File / Save Language File**

Die neue Sprache steht Ihnen nun in der **NANOCOLOR®** ^{UV}/_{VIS} zur Verfügung.

8.8 Auswahl der Einheiten

An verschiedenen Stellen dieser Software können Sie physikalische Einheiten aus Listen auswählen. Die Listen enthalten sehr viele der in der Photometrie gebräuchlichen Einheiten. Sollten Sie eine Einheit benötigen, die nicht in der Liste enthalten ist, haben Sie zwei Möglichkeiten: a) die Listen sind beschreibbar, klicken Sie einfach in das Textfeld der Liste und geben Sie die Einheit mit der Tastatur ein und b) öffnen Sie den Windows-Editor und geben Sie Ihre Einheiten in der Form

Einheit 1 [ENTER] Einheit 2 [ENTER] Einheit 3

in den Editor ein und speichern Sie den Text unter dem Dateinamen *units.ini* in dem Unterverzeichnis *ini* Ihrer **NANOCOLOR® Spektrometer Software**. Beim nächsten Start der Software werden die Einheiten der Datei *units.ini* ausgelesen und an den Anfang der Einheiten-Listen gestellt.

8.9 Ausreißerelementinierung und Wiederholungsmessungen

Bei der Erstellung von Kalibrierkurven kann es aufgrund von Fehlern bei der Herstellung der Lösung und der Messung zu „Ausreißern“ kommen. Dieses Kapitel handelt davon, wie Sie mit solchen Ausreißern umgehen können und welche Möglichkeiten Sie haben, die Genauigkeit Ihrer Kalibrierung zu optimieren.

8.9.1 Ausreißer

In der Statistik gibt es mehrere Tests, um festzustellen, ob ein Messwert innerhalb einer bestimmten Wahrscheinlichkeit ein Ausreißer ist oder nicht. Einer dieser Tests, der Ausreißertest nach Grubbs, ist seit der Version 3.0 in die Software integriert. Das Programm erkennt automatisch, ob ein Messwert als Ausreißer behandelt werden muss bzw. ob der Messwert innerhalb des Erwartungsbereiches liegt. Abbildung 144. zeigt eine Messreihe mit einer linearen Kalibrierungsfunktion.

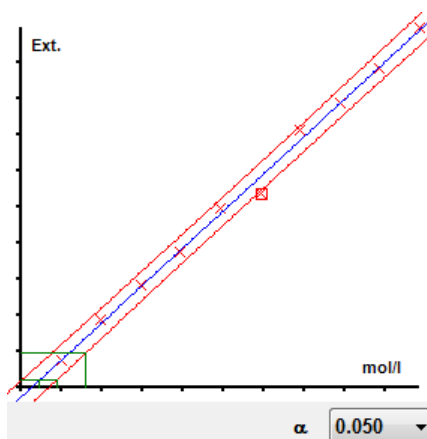


Abbildung 144 : Kalibriergerade mit Ausreißer

Die Software zeichnet um alle erkannten Ausreißer ein rotes Quadrat. In obiger Abbildung ist der 6. Messwert offensichtlich nicht korrekt. Entsprechend breit ist der Vertrauensbereich. Abbildung 145 zeigt die zu der Messung gehörenden Daten.

	Nr.	Ext.	Konz.	J/N
	1	0,062	10	☒
	2	0,158	20	☒
	3	0,239	30	☒
	4	0,319	40	☒
	5	0,418	50	☒
▶	6	0,454	60	☒
	7	0,603	70	☒
	8	0,666	80	☒
	9	0,749	90	☒
	10	0,843	100	☒

Abbildung 145 : Messdaten mit Ausreißer bei Pos. 7

Sie haben zwei Möglichkeiten, mit Ausreißern umzugehen. Die einfachste Möglichkeit ist, das Häkchen in der Spalte **J/N** einfach auszuschalten, siehe Abbildung 146.

	Nr.	Ext.	Konz.	J/N
	1	0,062	10	☒
	2	0,158	20	☒
	3	0,239	30	☒
	4	0,319	40	☒
	5	0,418	50	☒
▶	6	0,454	60	☐
	7	0,603	70	☒
	8	0,666	80	☒
	9	0,749	90	☒
	10	0,843	100	☒

Abbildung 146 : Ausschalten des Ausreißers

Die Kalibriergerade wird automatisch neu gezeichnet, siehe Abbildung 147.

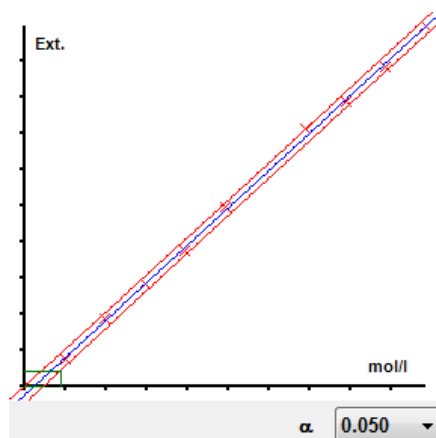


Abbildung 147 : Gerade ohne Ausreißer

Der Vertrauensbereich wird deutlich schmaler. Auf diese Art können Sie jeden beliebigen Messpunkt von der Berechnung ausschließen oder auch wieder einschließen.

Die zweite Möglichkeit der Ausreißerkorrektur besteht darin, die fehlerhafte Lösung neu anzusetzen und nachzumessen. Klicken Sie dazu doppelt mit der linken Maustaste auf das Datenfeld mit dem fehlerhaften Wert, im Beispiel das Feld „0,454“. Sie werden daraufhin von der Software aufgefordert, die neue Lösung in das Photometer einzusetzen, siehe Abbildung 148.

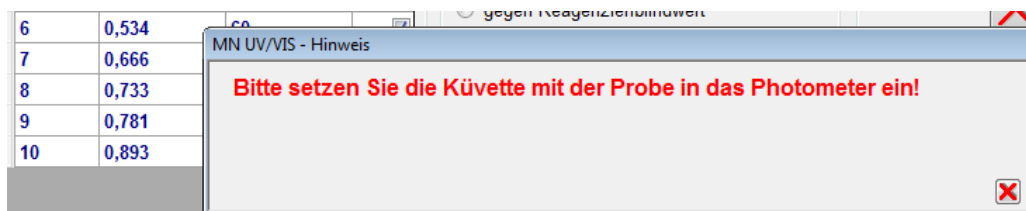


Abbildung 148 : Nachmessen einer Probe

Wie Abbildung 149 zeigt, wird der neue Messwert sofort in die Tabelle übernommen. Beim Ziehen der Küvette wird auch die Graphik neu gezeichnet.

	4	0,319	40	☒
►	5	0,418	50	☒
	6	0,475	60	☒

Abbildung 149 : Anzeige des neuen Messwertes

8.9.2 Mehrfachmessung

In obigem Beispiel wurde eine Kalibrierreihe mit 10 Lösungen verschiedener Konzentration angelegt. Es gibt einen statistischen Trick, wie Sie a) die Genauigkeit Ihrer Messung erhöhen können und b) gleichzeitig weniger Arbeit haben. Das Verfahren nennt sich Mehrfachmessung. Anstatt 10 verschiedene Lösungen der Konzentrationen 10 bis 100 anzusetzen, benötigen Sie z. B. nur 4 verschiedene Lösungen mit den möglichen Konzentrationen 20, 40, 60 und 80. Mit den Lösungen 20 und 80 machen Sie aber 3 bis 4 Einzelerperimente, mit den Konzentrationen des mittleren Bereichs z. B. 2 Einzelerperimente. Abbildung 150 zeigt dieses Verfahren für die gleiche Kalibrierung wie unter 8.9.1 beschrieben.



	Nr.	Ext.	Konz.	J/N
	1		20	☒
	2		20	☒
	3		20	☒
	4		40	☒
	5		40	☒
	6		60	☒
	7		60	☒
	8		80	☒
	9		80	☒
	10		80	☒

Abbildung 150 : Erstellen von Mehrfachmessungen

Wenn Sie für die Lösung 20 und 80 je drei Experimente durchführen und für die Lösung 40 und 60 jeweils zwei, ergibt das auch 10 photometrische Messungen. In der Tabelle in Abbildung 126 sehen Sie, dass die Lösungen Nr. 1 bis 3 alle die Soll-Konzentration „20“ aufweisen, dann kommt zweimal die 40, zweimal die 60 und wieder 3 mal die 80. Abbildung 151 zeigt die zugehörigen Messdaten.

	Nr.	Ext.	Konz.	J/N
	1	0,194	20	☒
	2	0,184	20	☒
	3	0,185	20	☒
	4	0,377	40	☒
	5	0,360	40	☒
▶	6	0,565	60	☒
	7	0,565	60	☒
	8	0,738	80	☒
	9	0,738	80	☒
	10	0,741	80	☒

Abbildung 151 : Messdaten der Mehrfachmessung

Da Sie unterschiedliche Experimente mit den einzelnen Lösungen durchgeführt haben, erhalten Sie nicht exakt die gleichen Ergebnisse. Durch das Prinzip der Mehrfachmessung wird aber die statistische Genauigkeit gesteigert, wie Abbildung 152 zeigt.

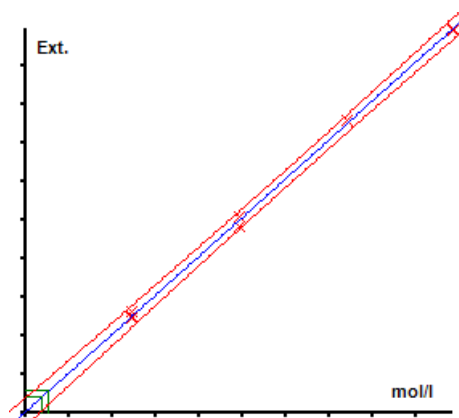


Abbildung 152 : Enger Vertrauensbereich bei Mehrfachmessungen

Was bedeutet „unterschiedliche Experimente“? Es bedeutet nicht, eine Küvette dreimal zu messen. Sie müssen schon drei verschiedene Tests mit drei verschiedenen Küvetten ansetzen, benötigen dafür aber nur eine Testlösung. Dieses Verfahren erfasst alle Küvetten-Fehler, Mess-Fehler und Test-Fehler, reduziert aber den Einfluss von Wiege-/Verdünnungsfehlern und Ihre Arbeit.



Das Verfahren der Mehrfachmessung funktioniert nur bei linearen Funktionen! Geben Sie die Konzentrationen immer in aufsteigender Reihenfolge wie im Beispiel an!

Führen Sie bei nicht-linearen Funktionen immer die Methode nach Kapitel 8.9.1 durch!

8.9.3 Signifikanzniveau α

Für den Grubbs-Ausreißertest, die Vertrauensbereiche und die Kenndaten Nachweisgrenze, Erfassungsgrenze und Bestimmungsgrenze ist die Genauigkeit anzugeben, mit der die Ergebnisse berechnet werden sollen. Diese Wahrscheinlichkeit oder auch das Signifikanz-Niveau α können Sie unterhalb des Grafikbereichs aus eine Liste wählen, siehe Abbildung 144 oder 147. Für den Grubbs-Test sind die Wahrscheinlichkeiten 0,1, 0,05 und 0,01 möglich. Der Vertrauensbereich und die Nachweis-, Erfassungs- und Bestimmungsgrenze können auch 0,005 und 0,001 gewählt werden. Werden diese kleinen Werte gewählt, wird der Grubbs-Test mit $\alpha = 0,05$ berechnet.

Ein Wert von $\alpha = 0,05$ bedeutet, das die Wahrscheinlichkeit, dass der als Ausreißer erkannte Wert tatsächlich ein Ausreißer ist, bei 95% liegt. Oder anders herum: Es besteht eine Wahrscheinlichkeit von 5 %, das der Wert doch kein Ausreißer ist.

8.10 Bioanalytik Scan

Bei der photometrischen Bestimmung von Proteinen, DNA und RNA werden je Probe Messungen bei mehreren Wellenlängen (typischer Weise 260 nm, 280 nm, 320 nm) durchgeführt. Da bei jeder Wellenlänge eine NULL-Messung anfällt, ist der Messaufwand nicht unerheblich. Wesentlich eleganter und einfacher ist die Aufnahme eines Wellenlängen-Scans, der dann automatisch ausgewertet wird.

Da die Extinktionen der Proben sehr hoch sind und nur wenige µl an Probelösung vorhanden sind, können normale Küvetten in der Regel nicht verwendet werden. In diesen Fällen bietet sich eine Reflexions-Küvette, z. B. LabelGuard™ MicroCell von Implen, an. Diese Küvetten verfügen über eine optische Schichtdicke von 0,2/1,0 mm und einem Probenvolumen von 0,7 bis 5 µl.

Um einen Bioanalytik-Scan auszuwerten, erstellen Sie einfach einen Scan von 200 nm bis 340 nm. Oder Sie öffnen im Verzeichnis *example* unterhalb des Installationsverzeichnis finden Sie die Datei *example_bio.nc*. Abbildung 153 zeigt die Datei *example_bio.nc* im Scan-Fenster.

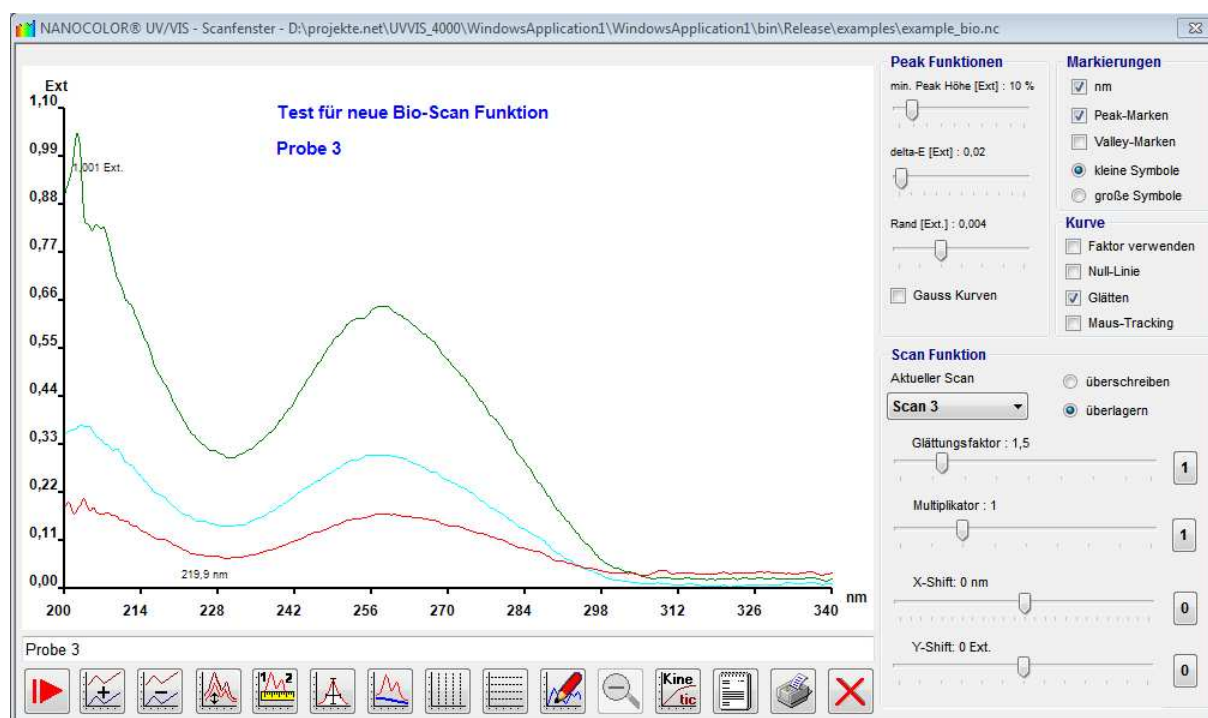


Abb. 153 : Bioanalytik Scan

Im Scan-Fenster werden drei Proben mit unterschiedlicher Konzentration angezeigt. **Entscheidend für die Auswertung ist, dass Sie den Wellenlängen-Scan auf 200 nm bis 340 nm festlegen.**

Wählen Sie nun den Menübefehl **Scan/Bioanalytik Scan**. Die Software öffnet nun das Fenster der Bioanalytik-Scan-Auswertung, siehe Abbildung 154.

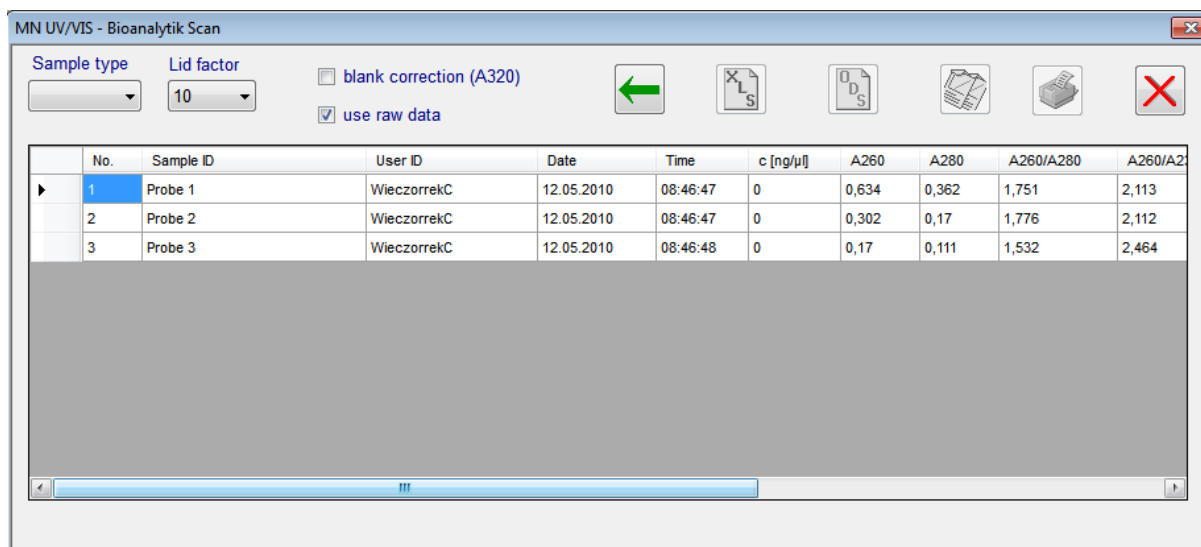


Abb. 154 : Auswertung der Bioanalytik Scans

Die Software erstellt für jeden Scan eine Zeile in der Tabelle, die neben den GLP-relevanten Daten die Extinktionen bei 230 nm, 260 nm, 280 nm, 320 nm, das Verhältnis A260/A280 und A260/A230 enthält. Wählen Sie nun in der Liste Sample type den Typ Ihrer Probe aus, siehe Abbildung 155:

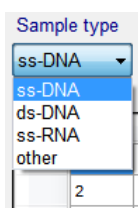


Abb. 155 : Auswahlliste Sample type

Wenn Sie den Sample type auf "other" setzen, müssen Sie den korrekten Faktor in der Spalte **Factor** selber eintragen.

Nun müssen Sie in der Liste den **Lid factor** wählen. Dieser Proportionalitätsfaktor ist von der verwendeten Küvette abhängig (bzw. bei den Reflexions-Küvetten vom Deckel) und sollte in der Anleitung der Küvette zu finden sein. Bei 10 mm optischer Schichtdicke gilt Lid factor = 1. Wenn Sie den Lid factor auf "other" setzen, müssen Sie den korrekten Faktor in der Spalte **Lid f.** selber eintragen.

Mit der Option **blank correction (A320)** legen Sie fest, ob eine NULL-Korrektur mit der Extinktion bei 320 nm durchgeführt werden soll. Mit der letzten Option **use raw data** bestimmen Sie, ob die Rohdaten des Scans oder die geglätteten Daten verwendet werden sollen. Abbildung 156 zeigt eine vollständige Auswertung.



Sample type

ss-DNA

Lid factor

10

☒ blank correction (A320)
 ☒ use raw data

	Time	c [ng/μl]	A260	A280	A260/A280	A260/A230	Factor	Lamda	A(Lamda)	A320	Lid f.	Smooth
▶	8:46:47	225,94	0,634	0,362	1,751	2,113	37,04	230	0,3	0,024	10	1,2
	8:46:47	108,53	0,302	0,17	1,776	2,112	37,04	230	0,143	0,009	10	1,2
	8:46:48	48,52	0,17	0,111	1,532	2,464	37,04	230	0,069	0,039	10	1,2

Abb. 156 : vollständige Auswertung

Alle Ergebnisse können als Protokoll gedruckt oder nach EXCEL oder OpenOffice exportiert werden.

8.11 Software-Fehler

Trotz aller Tests und Prüfungen lassen sich Software-Fehler leider nicht vollständig vermeiden. Bitte tragen Sie zu einer Verbesserung unserer Software-Produkte bei und melden Sie uns Fehler, die Ihnen aufgefallen sind. Senden Sie uns eine kurze e-mail an die Adresse sales@mn-net.com, Betreff „UV/VIS Softwarefehler“ mit einer Beschreibung des Fehlers (was ist passiert oder nicht passiert nach dem klicken auf welchen Schalter / Menüpunkt) und legen Sie die folgenden drei Dateien der e-mail bei:

1. *error.log* oder *error.crp* aus dem Verzeichnis *errorlog*
2. *sys.log* oder *sys.crp* aus dem Verzeichnis *syslog*
3. *environment.log* oder *environment.crp* aus dem Verzeichnis *syslog*

Beide Verzeichnisse finden Sie im Installationsverzeichnis Ihrer **NANOCOLOR® Spektrometer Software**.

Bitte verwenden Sie nach Möglichkeit die Softwarefunktion „Fehlerbericht senden“ aus Kapitel 7.5.