analytikjena
An Endress+Hauser Company

Bedienungsanleitung

ASpect UV
Software für
UV/Vis-Spektralphotometer

Hersteller

Analytik Jena GmbH+Co. KG
Konrad-Zuse-Straße 1
07745 Jena / Deutschland
Telefon: +49 3641 77 70
Fax: +49 3641 77 9279
E-Mail: info@analytik-jena.com

Technischer Service

Analytik Jena GmbH+Co. KG
Konrad-Zuse-Straße 1
07745 Jena / Deutschland
Telefon: +49 3641 77 7407
Fax: +49 3641 77 9279
E-Mail: service@analytik-jena.com

Für einen ordnungsgemäßen und sicheren Gebrauch diesen Anleitungen folgen. Für späteres Nachschlagen aufbewahren.

Allgemeine Informationen http://www.analytik-jena.com

Dokumentationsnummer 10-2210-003-23

Ausgabe E (03/2026)

Technische Dokumentation Analytik Jena GmbH+Co. KG

© Copyright 2026, Analytik Jena GmbH+Co. KG

Inhaltsverzeichnis

1 Über dieses Dokument 7

2 ASpect UV installieren 8

3 ASpect UV starten und beenden 9

3.1 ASpect UV starten 9

3.2 Start von ASpect UV mit Modul oder Quickstart konfigurieren 9

3.3 Quickstart verwenden 10

3.4 ASpect UV beenden 10

4 Grundlegender Aufbau und Funktionen von ASpect UV 11

4.1 Programmaufbau von ASpect UV 11
4.1.1 Module in ASpect UV 11
4.1.2 Das Hauptfenster von ASpect UV 12

4.2 Das Dokumentfenster 15
4.2.1 Übersicht des Dokumentfensters 15
4.2.2 Funktionsleiste und Menü Datei im Dokumentfenster 16
4.2.3 Arbeitsblätter im Dokument 18
4.2.4 Spektren und Messkurven auf dem Arbeitsblatt anzeigen 19

4.3 Dokumente verwalten, drucken und exportieren 22
4.3.1 Dokumente öffnen und speichern 22
4.3.2 Neues Dokument erstellen 23
4.3.3 Dokumententitel bearbeiten 24
4.3.4 Änderungen im Audit Trail verfolgen 24
4.3.5 Dokumente drucken 24
4.3.6 Daten exportieren 25
4.3.7 Reportvorlagen für Druck und Export 26
4.3.8 Messdaten automatisch archivieren 29

4.4 Probensequenzen 30
4.4.1 Probentypen und Sonderproben in ASpect UV 30
4.4.2 Aufbau der Seite Probensequenz 31
4.4.3 Probensequenzen erstellen und editieren 33

4.5 Formeln verwenden 37

4.6 Zubehöre verwenden 41
4.6.1 Passive Zubehöre 41
4.6.2 Kassetten-Sipper-System 42
4.6.3 Probengeber 42
4.6.4 Küvettenwechsler 44
4.6.5 Peltiertemperiertes Zubehör 45
4.6.6 Integrationskugel 48
4.6.7 Scaneinsatz für feste Proben 48

5 Modul Schnellmessung und Online-Messungen 49

6 Modul Photometrie 51

6.1 Methodeneinstellungen im Modul Photometrie 51
6.1.1 Photometrie - Einstellungen | Allgemein 52
6.1.2 Photometrie - Einstellungen | Messzyklen 53
6.1.3 Photometrie - Einstellungen | Start Messung 54
6.1.4 Photometrie - Einstellungen | Zubehör 55

6.1.5 Photometrie - Einstellungen | Auswertung 55
6.1.6 Photometrie - Einstellungen | Kalibration 56
6.1.7 Photometrie - Einstellungen | Probensequenz 57
6.1.8 Photometrie - Einstellungen | Automatisch archivieren 57
6.1.9 Photometrie - Einstellungen | Notiz 57
6.2 Messungen im Modul Photometrie ausführen 57
6.3 Ergebnisse im Modul Photometrie anzeigen, auswerten und bearbeiten 60
6.3.1 Probentabelle im Modul Photometrie editieren 61
6.3.2 Photometriedaten auswerten 62
6.3.3 Photometriedaten mathematisch bearbeiten 63
6.4 Beispielmessung im Modul Photometrie 65

7 Modul Spektrum 68

7.1 Methodeneinstellung im Modul Spektrum 68
7.1.1 Spektrum - Einstellungen | Allgemein 68
7.1.2 Spektrum - Einstellungen | Messzyklen 70
7.1.3 Spektrum - Einstellungen | Start Messung 71
7.1.4 Spektrum - Einstellungen | Zubehör 71
7.1.5 Spektrum - Einstellungen | Auswertung 72
7.1.6 Spektrum - Einstellungen | Kalibration 73
7.1.7 Spektrum - Einstellungen | Probensequenz 74
7.1.8 Spektrum - Einstellungen | Automatisch archivieren 74
7.1.9 Spektrum - Einstellungen | Notiz 75
7.2 Messungen im Modul Spektrum ausführen 75
7.3 Ergebnisse im Modul Spektrum anzeigen, auswerten und bearbeiten 77
7.3.1 Anzeigeoptionen für die Ergebnisse im Modul Spektrum 78
7.3.2 Spektrendaten auswerten 79
7.3.3 Spektrendaten mathematisch bearbeiten 80
7.3.4 Spektren aus verschiedenen Dokumenten zusammenführen 85
7.4 Beispielmessung im Modul Spektrum 85

8 Modul Kinetik 88

8.1 Methodeneinstellung im Modul Kinetik 88
8.1.1 Kinetik - Einstellungen | Allgemein 88
8.1.2 Kinetik - Einstellungen | Messzyklen 90
8.1.3 Kinetik - Einstellungen | Start/Stopp Messung 91
8.1.4 Kinetik - Einstellungen | Zubehör 92
8.1.5 Kinetik - Einstellungen | Auswertung 92
8.1.6 Kinetik - Einstellungen | Kalibration 92
8.1.7 Kinetik - Einstellungen | Probensequenz 94
8.1.8 Kinetik - Einstellungen | Automatisch archivieren 94
8.1.9 Kinetik - Einstellungen | Notiz 94
8.2 Messungen im Modul Kinetik ausführen 94
8.3 Ergebnisse im Modul Kinetik anzeigen, auswerten und bearbeiten 96
8.3.1 Kinetikkurven auswerten 98
8.3.2 Kinetikdaten mathematisch bearbeiten 100
8.4 Beispielmessung im Modul Kinetik 100

9 Modul Thermometrie 104

9.1 Methodeneinstellung im Modul Thermometrie 104
9.1.1 Thermometrie - Einstellungen | Allgemein 105
9.1.2 Thermometrie - Einstellungen | Start Messung 106

9.1.3 Thermometrie - Einstellungen | Zubehör ... 106
9.1.4 Thermometrie - Einstellungen | Auswertung ... 108
9.1.5 Thermometrie - Einstellungen | Probensequenz ... 109
9.1.6 Thermometrie - Einstellungen | Automatisch archivieren ... 109
9.1.7 Fenster Thermometrie - Einstellungen | Notiz ... 110
9.2 Messungen im Modul Thermometrie ausführen ... 110
9.3 Ergebnisse im Modul Thermometrie anzeigen, auswerten und bearbeiten ... 111
9.3.1 Anzeigeoptionen für die Ergebnisse im Modul Thermometrie ... 113
9.3.2 Temperaturkurven auswerten ... 113
9.3.3 Temperaturkurven mathematisch bearbeiten ... 114
9.4 Beispielmessung im Modul Thermometrie ... 116

10 Modul Farbmetrik ... 120

10.1 Methodeneinstellung im Modul Farbmetrik ... 120
10.1.1 Farbmetrik - Einstellungen | Allgemein ... 120
10.1.2 Farbmetrik - Einstellungen | Start Messung ... 122
10.1.3 Farbmetrik - Einstellungen | Zubehör ... 122
10.1.4 Farbmetrik - Einstellungen | Farbwerte ... 122
10.1.5 Farbmetrik - Einstellungen | Probensequenz ... 124
10.1.6 Farbmetrik - Einstellungen | Automatisch archivieren ... 124
10.1.7 Farbmetrik - Einstellungen | Notiz ... 124
10.2 Messungen im Modul Farbmetrik ausführen ... 124
10.3 Ergebnisse im Modul Farbmetrik anzeigen und auswerten ... 127
10.3.1 Anzeigeoptionen für die Spektren im Modul Farbmetrik ... 129
10.3.2 Spektren im Modul Farbmetrik auswerten ... 129
10.4 Beispielmessung im Modul Farbmetrik ... 129

11 Allgemeine Gerätefunktionen – Menü Gerät ... 132

11.1 Gerätestatus anzeigen ... 132
11.2 Gerät initialisieren und Simulationsmodus starten ... 132
11.3 SPECORD PLUS korrigieren ... 133
11.4 Messtechnischen Zustand des SPECORD PLUS prüfen ... 134
11.4.1 Lampenintensität kontrollieren ... 134
11.4.2 Funktionsfähigkeit prüfen ... 134
11.4.3 Energie messen ... 135
11.4.4 Nullte Ordnung einstellen ... 136
11.5 Zusätzliche Funktionen zur Zubehörsteuerung ... 136
11.5.1 Zubehör aus-/einschalten ... 137
11.5.2 Erkennung des aktiven Zubehörs aus- und einschalten ... 137
11.5.3 Küvettenwechsler justieren und einzelne Positionen anfahren ... 138
11.5.4 Pumpzeit des Kassetten-Sipper-Systems optimieren ... 138
11.5.5 Probengeber APG justieren, einzelne Positionen anfahren und Pumpzeit optimieren ... 139

12 ASpect UV im Fenster Optionen einrichten ... 141

12.1 Startleiste konfigurieren ... 141
12.2 Quickstart konfigurieren ... 141
12.3 Verzeichnisse voreinstellen ... 143
12.4 Sprache einstellen ... 143
12.5 Farbschema einstellen ... 143
12.6 Startmodus für ASpect UV festlegen ... 144

12.7 Lampen einschalten und Monitor-Datei aufzeichnen ... 144
12.8 Simulationsmodus konfigurieren ... 145
12.9 Zeitliche Gültigkeiten von Referenzen und Leerwerten definieren ... 145
12.10 Einstellungen für Kalibrationen definieren ... 145
12.11 Dezimalstellen für Ausgabewerte festlegen ... 146
12.12 Eigenschaften von Passwörtern konfigurieren ... 146
12.13 Signaturen anlegen ... 147
12.14 Automatische Archivierung aktivieren ... 148
12.15 CSV-Export konfigurieren ... 149

13 Validierung des SPECORD PLUS (optional) ... 150

13.1 Validierung nach AJ ... 150
13.1.1 Prüfparameter und erforderliche Hilfsmittel ... 151
13.1.2 Validierungsparameter eingeben ... 152
13.1.3 Validierung ausführen ... 154
13.2 Validierung Standard Ph. Eur. ... 155
13.2.1 Prüfparameter und erforderliche Hilfsmittel ... 157
13.2.2 Validierungsparameter eingeben ... 157
13.2.3 Validierung ausführen ... 159
13.3 Validierung nach USP ... 160
13.3.1 Prüfparameter, Akzeptanzkriterien und erforderliche Prüfmittel ... 161
13.3.2 Validierungsparameter eingeben ... 163
13.3.3 Validierung ausführen ... 166
13.4 Validierung Wartung economic ... 167
13.4.1 Prüfparameter und erforderliche Hilfsmittel ... 168
13.4.2 Validierungsparameter eingeben ... 169
13.4.3 Validierung ausführen ... 170

14 Benutzerverwaltung und elektronische Signaturen ... 172

14.1 Benutzerverwaltung ... 172
14.1.1 Vorinstallierte Benutzer ... 172
14.1.2 Funktionen der Benutzerverwaltung ... 173
14.1.3 Benutzer anlegen und bearbeiten ... 174
14.1.4 Benutzerrechte zuweisen ... 176
14.1.5 Reports in der Benutzerverwaltung erstellen ... 177
14.1.6 Benutzer abmelden ... 178
14.1.7 ASpect UV sperren ... 178
14.1.8 Passwörter in ASpect UV ... 178
14.2 Elektronische Signatur ... 179

15 AJ File Protection ... 181

16 Optionales Modul SOAP ... 182

17 Revisionsübersicht ... 183

I Anhang ... 184

I.1 Vorinstallierte Methoden ... 184
I.2 Messwertbildung und Aufnahme der Referenzwerte ... 186
I.3 Datenformat für den Import von Probeninformationen ... 188

1 Über dieses Dokument

Was ist ASpect UV

Das Programm ASpect UV dient zur Steuerung und Auswertung von Messdaten der Geräte der SPECORD PLUS Serie von Analytik Jena.

Programmversionen

Die Beschreibung dieses Handbuchs orientiert sich an folgenden Programmversionen:

- ASpect UV ab Version 2.0
- SPECORD PLUS Firmware ab Version 4.4.2

Die Programmversion wird angezeigt, wenn Sie im Hauptfenster den Menüpunkt **Info** | **Über ASpect UV** wählen.

Zielgruppe

Dieses Handbuch richtet sich an qualifiziertes Fachpersonal mit Kenntnissen in der UV/Vis-Analytik. Grundlegende Kenntnisse über den Umgang mit Computer und Programmen, wie das Auswählen einer Option durch Anklicken mit der Maus oder das Speichern und Öffnen von Dateien, werden vorausgesetzt.

Für die sichere Bedienung des SPECORD PLUS mit ASpect UV ist die Kenntnis der Betriebsanleitung "SPECORD PLUS UV/Vis-Spektralphotometer" und "SPECORD PLUS Zubehöre UV/Vis-Spektralphotometer" erforderlich.

Typographische Konventionen

Handlungsanweisungen sind nummeriert oder in Punktaufzählungen zu Handlungseinheiten zusammengefasst.

Die Elemente des Programms ASpect UV sind wie folgt gekennzeichnet:

- Alle Elemente Menüpunkte, Fensterbezeichnungen, Buttons usw. sind mit **fett** gekennzeichnet, z. B. **Optionen**.
- Menüpunkte in einer Befehlsreihenfolge sind mit einem senkrechten Strich aneinandergefügt, z. B. **Datei** | **Speichern**.
- Einige Fenster enthalten Tabs. Bei der Bezeichnung eines bestimmten Tabs wird wie bei den Menüpunkten Fenstername und Tab mit einem senkrechten Strich aneinandergefügt, z. B. **Optionen** | **Allgemein**.

Folgende Piktogramme und Signalworte werden verwendet:

HINWEIS

Befolgen Sie so gekennzeichnete Hinweise, um Bedienungsfehler zu vermeiden und korrekte Ergebnisse zu erzielen.

Tipp

Die so gekennzeichneten Hinweise geben Ihnen nützliche Informationen zur Programmbedienung.

2 ASpect UV installieren

HINWEIS

Zur Installation von ASpect UV sind Administratorrechte am Computer erforderlich.

Um den USB-Treiber korrekt zu installieren und die Firmware zu aktualisieren, beachten Sie unbedingt folgende Reihenfolge:

1. Installieren Sie zuerst das Programm ASpect UV auf dem Computer.
2. Schließen Sie erst danach das SPECORD PLUS an den Computer und schalten Sie das SPECORD PLUS ein.

Beim erstmaligen Anschluss erfolgt nach Einschalten des SPECORD PLUS die Geräteerkennung und die Zuordnung der Treiber.

ASpect UV installieren

- Computer einschalten.
- Die Installations-CD ASpect UV in das CD-ROM-Laufwerk einlegen.
  Bei den meisten Computern wird die Installation automatisch nach kurzer Zeit gestartet. Sollte dies nicht der Fall sein, im Stammverzeichnis der CD die Datei setup.exe starten.
- Auf **Install** klicken und den Anweisungen des Installationsprogramms folgen:
- Sprache der Installation wählen.
- Zielordner für die Installation wählen.
  ✓ Die Installation läuft automatisch ab.
- SPECORD PLUS mit dem Computer über die USB-Anschlüsse verbinden.
- SPECORD PLUS einschalten.
  ✓ Die nötigen USB-Treiber werden automatisch installiert.

Optionale Module installieren

Die optional erhältlichen Module werden ebenfalls auf CDs ausgeliefert.

- Die Installations-CD in das Laufwerk einlegen.
  Wenn die Installation nicht automatisch startet, die Datei setup.exe auf der CD starten.
- Die Programme in den gleichen Ordner wie ASpect UV installieren.
  ✓ Die optionalen Module sind bei Start von ASpect UV in das Programm eingebunden.

3 ASpect UV starten und beenden

Mit den installierten Voreinstellungen von ASpect UV erscheint beim Start des Programms das Hauptfenster und die Verbindung zum SPECORD PLUS mit angeschlossenem Zubehör wird hergestellt. Sie können den Programmstart jedoch auch so konfigurieren, dass sofort ein Anwendungsmodul geöffnet wird oder das Quickstart-Menü mit einer Sammlung ausgewählter Methoden erscheint.

3.1 ASpect UV starten

Standardmäßig wird beim Starten von ASpect UV die Verbindung zwischen Computer und SPECORD PLUS hergestellt. Dabei muss die Anschaltreihenfolge beachtet werden.

- Zubehör für die Messung im Probenraum installieren und SPECORD PLUS am Netzschalter auf der rechten Geräteseite einschalten.
- ASpect UV mit einem Klick auf das Desktop-Icon starten oder im Windows-Startmenü **ASpect UV** | **ASpect UV** wählen.
- Nur bei Verwendung des Moduls FDA 21 CFR Part 11 Compliance:
  Im Anmeldefenster **Login** (Benutzername) und **Passwort** eingeben.
  - ✓ ASpect UV startet und stellt die Verbindung zum SPECORD PLUS her. Der Monochromator des SPECORD PLUS bewegt sich und auf dem Bildschirm erscheint die Meldung **Initialisierung**. Das SPECORD PLUS ist jetzt messbereit.

Sollte die Verbindung zum SPECORD PLUS nicht hergestellt worden sein, wird ASpect UV im Simulationsmodus gestartet. Überprüfen Sie die Einstellungen im Fenster **Optionen** | **Start** | **Start ASpect UV**. Dort muss das Kontrollkästchen **Gerät initialisieren** aktiviert sein. Stellen Sie bei Bedarf die Verbindung mit dem Menüpunkt **Gerät** | **Initialisierung** nachträglich her.

3.2 Start von ASpect UV mit Modul oder Quickstart konfigurieren

ASpect UV startet standardmäßig mit dem Hauptfenster als Eingangsbildschirm. Der Programmstart kann jedoch auch so konfiguriert werden, dass ein favorisiertes Modul oder das Quickstart-Menü erscheint.

- Menüpunkt **Einstellungen** | **Optionen** wählen.
- Im Fenster **Optionen** | **Start** | **Start ASpect UV** in der Liste **Element öffnen** das gewünschte Modul oder den **Quickstart** wählen. Bei der Wahl der Option **Keines** startet ASpect UV mit dem Hauptfenster.
- Bei Auswahl von **Quickstart** das Quickstart-Menü konfigurieren.
  - ✓ Beim nächsten Start von ASpect UV wird das gewählte Element als Eingangsbildschirm angezeigt.

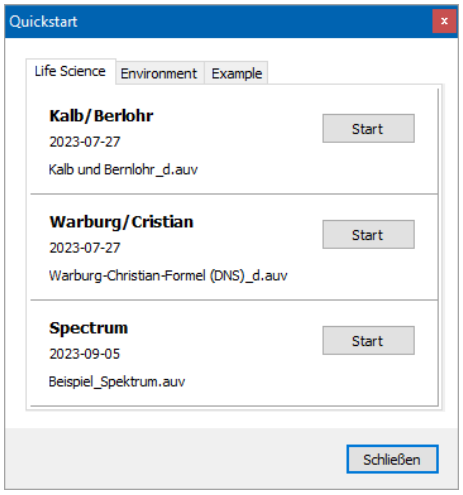
Sehen Sie dazu auch

Quickstart konfigurieren [▶ 141]

3.3 Quickstart verwenden

Im Quickstart können Sie häufig verwendete Methoden sammeln und starten. Den Inhalt des Quickstart definieren Sie im Fenster **Optionen** | **Quickstart**.

- Menüpunkt **Module** | **Quickstart** wählen.
  - ✓ Das Fenster **Quickstart** erscheint. Die Methoden sind auf Tabs gruppiert.
- Methode wählen und auf **Start** klicken.
  - ✓ Es öffnet sich das Messmodul mit der voreingestellten Methode. Sie können die dort gespeicherte Probensequenz sofort für die Messung verwenden oder die Probensequenz vorher editieren.



Sehen Sie dazu auch

Quickstart konfigurieren [▶ 141]

3.4 ASpect UV beenden

Bei der softwaregestützten Abschaltroutine wird der Monochromator des Spektrometers in der Ausgangsstellung arretiert. In dieser Position kann die Transportsicherung des Monochromators befestigt werden (siehe Bedienungsanleitung "SPECORD PLUS UV/Vis-Spektralphotometer").

- Alle Dokumentfenster schließen.
- Menüpunkt **Datei** | **Beenden** wählen.
- Es erscheint die Meldung "Abschaltroutine läuft.".
- Nach Beenden des Programms ASpect UV das SPECORD PLUS am Netzschalter ausschalten.
  - ✓ Das SPECORD PLUS ist abgeschaltet.

Wenn die Messungen mit dem SPECORD PLUS beendet sind und Sie nur noch Daten in ASpect UV auswerten, schalten Sie zunächst in den Simulationsmodus. Dadurch wird die USB-Verbindung zum Gerät geschlossen und Sie können das SPECORD PLUS am Netzschalter ausschalten. Das Programm ASpect UV kann später beendet werden.

4 Grundlegender Aufbau und Funktionen von ASpect UV

In diesem Abschnitt erhalten Sie Informationen über den Programmaufbau und modulübergreifende Programmfunktionen von ASpect UV.

4.1 Programmaufbau von ASpect UV

4.1.1 Module in ASpect UV

Das Programm ASpect UV ist modular aufgebaut. Jedem Applikationsgebiet der UV/Vis-Spektroskopie ist ein Modul zugeordnet, in dem die einzustellenden Messparameter auf die Applikation und das angeschlossene Zubehör angepasst sind. Dies ermöglicht eine schnelle Orientierung bei der Auswahl der benötigten Analysenparameter und erleichtert die Datenauswertung.

Folgende Applikationen/Module sind verfügbar:

Photometrie

Im Modul **Photometrie** werden Messungen an ausgewählten Wellenlängen vorgenommen. Quantitative Analysen an ausgewählten Wellenlängen für die Routineanalytik aber auch alle Auswertungen, die Messwerte an gewählten Wellenlängen in einer Formel verknüpfen, z. B. biochemische Auswertungen, können realisiert werden.

Spektrum

Das Modul **Spektrum** ermöglicht das Messen von Spektren bzw. Spektrenbereichen. Darauf aufbauend kann eine mathematische Datenbehandlung der Spektren oder eine Peaksuche erfolgen. Weiterhin sind anspruchsvolle quantitative Bestimmungen auf der Grundlage der Spektrenauswertung möglich (automatische Peaksuche, Peakflächen, Auswertung von Spektrenableitungen usw.).

Kinetik

Das Modul **Kinetik** ermöglicht die Aufzeichnung von zeitabhängigen Reaktionen, d.h. Registrierung der Änderung der Transmission oder Absorption an einer Wellenlänge über einen Zeitraum. Der Kurvenanstieg und Messwerte zu ausgewählten Zeitpunkten werden ausgewertet.

Schnellmessung

Mit dem Modul **Schnellmessung** kann die Absorption an einer Wellenlänge bestimmt werden. Weitere Bearbeitung, Speichern oder Drucken der Werte ist nicht möglich.

Thermometrie

Das Modul **Thermometrie** wird für die Auswertung temperaturabhängiger Änderungen der Absorption oder Transmission verwendet. Unter anderem kann der DNA-Schmelzpunkt aus den Temperaturkurven bestimmt werden. Für die Aufnahme der Temperaturkurven wird ein peltiertemperiertes Zubehör benötigt.

Farbmetrik

Im Modul **Farbmetrik** werden die Farbkoordinaten reflektierender Oberflächen oder optisch durchlässiger Proben bestimmt. Weiterhin können verschiedene Farbzahlen berechnet werden.

Optionale Module

Optional sind folgende Module erhältlich:

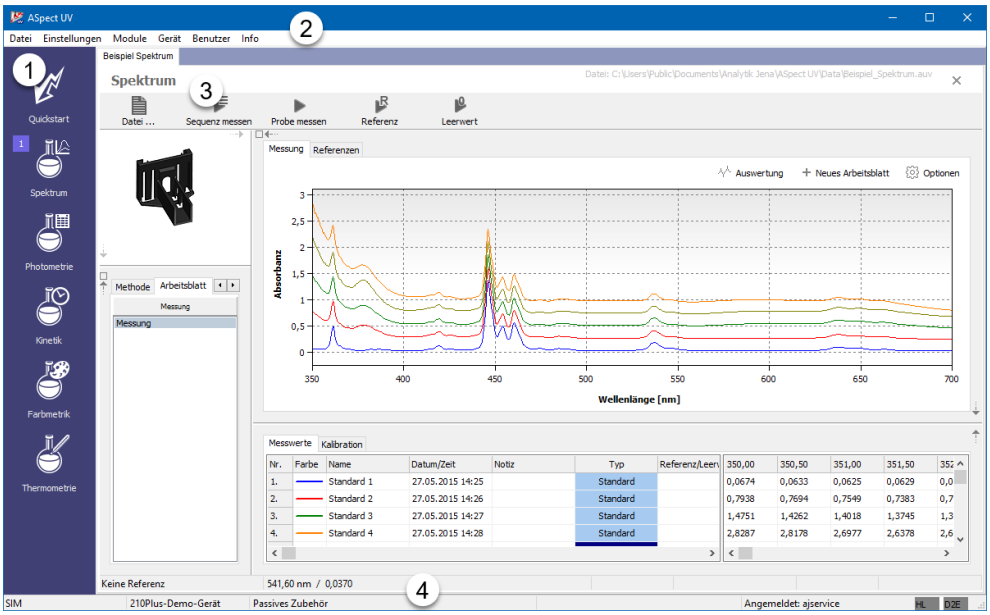
- ASpect UV Validierung AJ
- ASpect UV Validierung Standard Ph. Eur.
- ASpect UV Validierung USP
- ASpect UV Wartung economic
- AJ File Protection
- SOAP Webserver
- FDA 21 CFR Part 11 Compliance mit Benutzerverwaltung und Datensignierung

4.1.2 Das Hauptfenster von ASpect UV

Das Hauptfenster öffnet sich nach dem Start von ASpect UV. Es bietet folgende Funktionen:

- Öffnen der Module mit den abgestimmten Mess- und Auswertefunktionen
- Einstellungen von modulunabhängigen Grundfunktionen für Messung und Auswertung (Optionen)
- Funktionen zur Prüfung des SPECORD PLUS
- Zugang zur Benutzerverwaltung, wenn das Modul FDA 21 CFR Part 11 Compliance installiert ist

Komponenten im Hauptfenster



Nr.	Beschreibung
1	Die **Startleiste** enthält die Modul-Icons und Icons grundlegender Programmfunktionen.
2	In der **Menüleiste** sind die allgemeinen Funktionen von ASpect UV in Menüs angeordnet.
3	Auf der **Arbeitsfläche** werden die Dokumente angeordnet.
4	Die **Statusleiste** enthält Informationen zum Gerät und zum angemeldeten Benutzer.

Menüleiste

Die Menüleiste des Hauptfensters beinhaltet folgende Funktionen:

Menü	Unterpunkt	Beschreibung
Datei	**Methode öffnen**	Gespeicherte Methode für eine folgende Messung öffnen
	Ergebnisse öffnen	Gespeicherte Datei mit Ergebnissen in seiner Modulumgebung öffnen
	Beenden	ASpect UV beenden
Einstellungen	**Menü verbergen**	Menüleiste ausblenden
	Startleiste verbergen / Startleiste anzeigen	Startleiste ausblenden/anzeigen
	Optionen	Grundeinstellungen für ASpect UV vornehmen
Module	**Schnellmessung**	Absorptionsmessungen an einer ausgewählten Wellenlänge starten
	Spektrum	Neues Dokument im Modul **Spektrum** öffnen / zum Modul wechseln

Menü	Unterpunkt	Beschreibung
	Photometrie	Neues Dokument im Modul **Photometrie** öffnen / zum Modul wechseln
	Kinetik	Neues Dokument im Modul **Kinetik** öffnen / zum Modul wechseln
	Farbmetrik	Neues Dokument im Modul **Farbmetrik** öffnen / zum Modul wechseln
	Thermometrie	Neues Dokument im Modul **Thermometrie** öffnen / zum Modul wechseln
	Quickstart	Quickstart-Menü öffnen
Gerät	**Info**	Nach der Initialisierung Informationen über Gerät, ASpect UV, Firmware und angeschlossenes Zubehör anzeigen
	Initialisierung	Verbindung zwischen SPECORD PLUS und ASpect UV herstellen
	Simulation	ASpect UV in den Simulationsmodus versetzen
	Prüfung	Funktionsfähigkeit des SPECORD PLUS prüfen SPECORD PLUS validieren (optionale Module)
	Korrektur	Softwaregestützte Gerätekorrekturen starten
	Nullte Ordnung	Monochromatorgitter auf die Nullte Ordnung für die Justierung von Zubehör und Überprüfung der Strahlengänge stellen
	Zubehör	Zubehör aus- und einschalten, Pumpzeitoptimierung des Sipper-Systems starten, Temperaturen von Peltier-Zubehör abfragen
Benutzer	**Abmelden**	Benutzer abmelden und Programm ASpect UV sperren
	ASpect UV sperren	ASpect UV sperren
	Passwort ändern	Passwort des angemeldeten Benutzers ändern
	Benutzerverwaltung	Benutzerverwaltung öffnen
Info	**Hilfe**	Hilfe für ASpect UV öffnen
	Über ASpect UV	Informationen zur Programmversion

Startleiste

Die Startleiste auf der linken Seite des Hauptfensters enthält Icons, die einen schnellen Zugriff auf die häufig verwendeten Programmfunktionen ermöglichen. Die Startleiste kann im Fenster **Optionen** konfiguriert werden. Folgende Funktionen können angeordnet werden:

Icon	Beschreibung
	Modul **Photometrie** öffnen / neues Dokument hinzufügen
	Modul **Spektrum** öffnen / neues Dokument hinzufügen
	Modul **Kinetik** öffnen / neues Dokument hinzufügen
	Modul **Thermometrie** öffnen / neues Dokument hinzufügen
	Modul **Farbmetrik** öffnen / neues Dokument hinzufügen

Icon	Beschreibung
	Gespeicherte Methode für nächste Messungen laden
	Gespeicherte Messergebnisse und Auswertungen öffnen
	SPECORD PLUS initialisieren
	Quickstartmenü mit Methodenauswahl anzeigen
	Fenster **Optionen** öffnen
	ASpect UV beenden
	Benutzer abmelden

Am unteren Ende der Startleiste kann der aktuelle Absorptionswert an der aktuellen Wellenlängenposition des Monochromators angezeigt werden.

Statusleiste

Folgende Informationen werden in der Statusleiste eingeblendet:
- SIM: Die Software befindet sich im Simulationsmodus.
- INIT: Das Gerät ist seit dem angegebenen Zeitpunkt initialisiert.
- Gerätetyp und Seriennummer
- Angeschlossenes Zubehör
- Modul: Im angezeigten Modul findet eine Messung statt.
- Angemeldeter Benutzer
- HL/D2E: Lampenstatus

Der Lampenstatus wird mit farbigen Feldern signalisiert:

Statusfarbe	Beschreibung
Grau	Die Lampen sind nicht eingeschaltet oder die Software befindet sich im Simulationsmodus.
Grün	Die Lampen sind in Betrieb.
Rot	Die Lampen sind defekt.

Menü und Startleiste ein- und ausblenden

Bei Bedarf können Menü und Startleiste ein- und ausgeblendet werden, um den Arbeitsbereich des Hauptfensters zu vergrößern.

- Um das Menü auszublenden, den Menüpunkt **Einstellungen** | **Menü verbergen** wählen.
- Um das Menü wieder einzublenden, auf das Dropdown-Menüsymbol in der linken oberen Ecke des Hauptfensters klicken.

- Die Startleiste kann mit den Menüpunkten **Einstellungen** | **Startleiste verbergen** und **Startleiste anzeigen** aus- und eingeblendet werden.

Hilfe verwenden

Hilfe zur Bedienung von ASpect UV erhalten Sie über den Menüpunkt **Info** | **Hilfe**. In den Fenstern von ASpect UV können Sie auf den Button **Hilfe** links unten im Fenster klicken oder die Funktionstaste **F1** drücken, um Informationen zu den Fenstereinstellungen zu erhalten.

Sehen Sie dazu auch

Startleiste konfigurieren [▶ 141]

4.2 Das Dokumentfenster

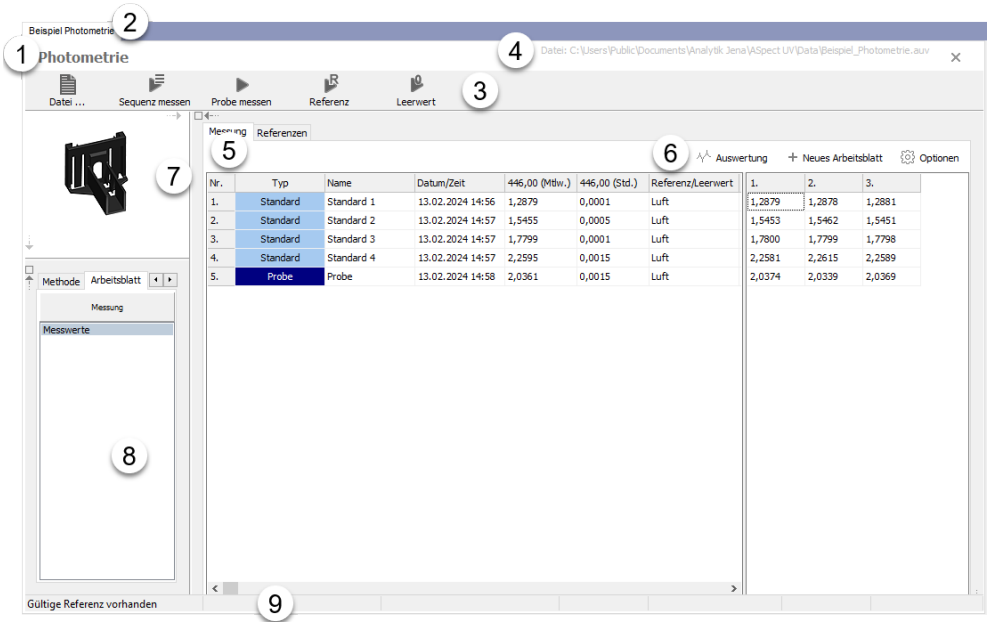
ASpect UV verwendet für alle Dateien, im folgenden Dokumente genannt, eine einheitliche Struktur, die alle Methodeneinstellungen, Probeninformationen, Messdaten und Auswertungen enthält.

Das Dokumentfenster, in dem ein Dokument geöffnet wird, ist in allen Modulen ähnlich aufgebaut. Es beinhaltet Funktionen für die Messung, Datenverwaltung und Auswertung. In diesem Abschnitt werden die allgemeinen Bedienelemente und Funktionen der Dokumentfenster erläutert. Funktionen, die nur in einzelnen Modulen verfügbar sind, werden in den Kapiteln zu den entsprechenden Modulen beschrieben.

Zwischen geöffneten Dokumenten wechseln

Wenn mehrere Dokumente des gleichen Moduls geöffnet sind, werden diese in der Form von Tabs auf der Arbeitsfläche des Hauptfensters hintereinander angeordnet. Es werden jeweils nur die Dokumente eines Moduls gleichzeitig angezeigt. Wenn Dokumente in verschiedenen Modulen geöffnet sind, muss für deren Anzeige durch einen Klick auf das Modul-Icon in der Startleiste oder Wahl des Menüpunkts im Menü **Module** in das entsprechende Modul gewechselt werden.

4.2.1 Übersicht des Dokumentfensters



Nr.	Beschreibung
1	Die Modulbezeichnung zeigt an, welches Modul geöffnet ist.
2	Der Dokumententitel dient zur Unterscheidung der geöffneten Dokumente. Er wird während der Methodeneinstellung festgelegt und kann später editiert werden. Wenn mehrere Dokumente in einem Modul geöffnet sind, kann mit Klick auf den Dokumententitel zum entsprechenden Dokument gewechselt werden.
3	Die Menü- und Funktionsleiste bietet Funktionen zur Messung und Dateiverwaltung im Dokument.
4	Der vollständige Dateiname des Dokuments wird nach dem Speichern angezeigt.

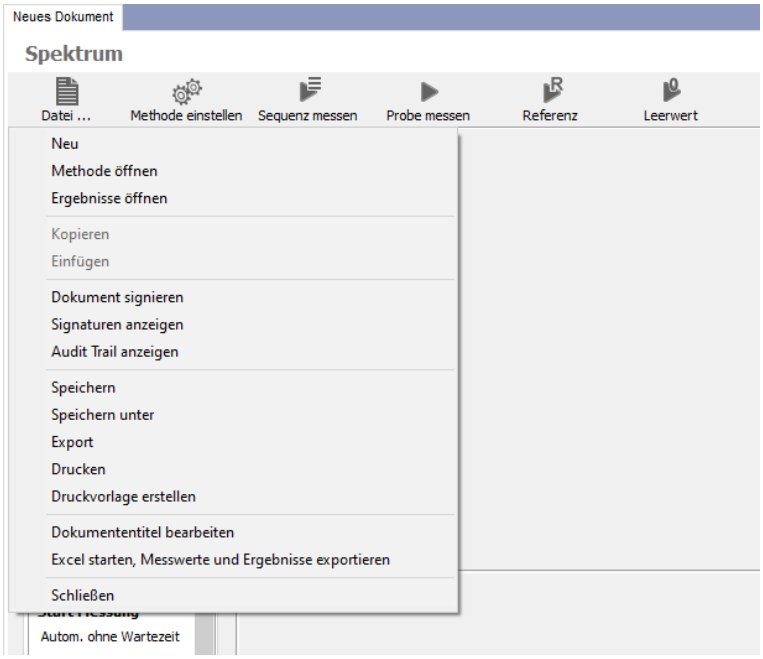
Nr.	Beschreibung
5	Das Arbeitsblatt enthält Messwerte, Auswertungen, Datenbearbeitung und Audit Trail. In einem Dokument können mehrere Arbeitsblätter mit verschiedenen Auswertungen angelegt werden.
6	Das Funktionsmenü des Arbeitsblatts enthält die Menüs für Auswertung und Ansicht des Arbeitsblatts.
7	Anzeige des in der Methode verwendeten Zubehörs. Eine Methode ist immer auf ein Zubehör zugeschnitten und kann nur mit diesem Zubehör verwendet werden.
8	Auf den Tabs werden die Methodenparameter der im Dokument hinterlegten Methode, die Notiz zur Messung und die im Arbeitsblatt vorgenommene Datenbearbeitung angezeigt.
9	In der Statusleiste des Dokumentfensters werden Informationen zur Referenz und zur Messung (aktuelle Messwerte und Messzeit) angezeigt. Während der Messung wird ein Fortschrittsbalken eingeblendet.

Sehen Sie dazu auch

Arbeitsblätter im Dokument [▷ 18]

4.2.2 Funktionsleiste und Menü Datei im Dokumentfenster

Jedes Dokument hat eine eigene Funktionsleiste und ein Menü **Datei**.



Funktionsleiste

Die Funktionsleiste des Dokumentfensters beinhaltet Funktionen für die Dateiverwaltung und Messung. Die Anzeige der Leiste wird entsprechend dem aktuellen Analysenstand und dem verwendeten Zubehör automatisch angepasst.

Icon	Beschreibung
	Menü **Datei** mit Funktion für die Datenverwaltung im Modulfenster
	Methodenfenster öffnen und Methode einstellen
	Einzelne Probenmessung unabhängig von der eingestellten Sequenz starten
	In der Methode eingegebene Sequenz messen Bei wiederholtem Aufruf der Funktion kann die Sequenz temporär geändert werden.

Icon	Beschreibung
	Referenzmessung unabhängig von den Einstellungen in der Sequenz starten
	Leerwertmessung unabhängig von den Einstellungen in der Sequenz starten
	Sequenz unterbrechen Die laufende Probenmessung wird fertig abgearbeitet und anschließend wird die noch ausstehende Probensequenz angezeigt. Die Probensequenz kann nacheditiert werden.
	Nur für Kinetikmessungen: Pause Laufende Messung unterbrechen und zu einem späteren Zeitpunkt fortsetzen
	Stopp Laufende Messung stoppen und nicht weiter fortsetzen
	Für Kassetten-Sipper-System und Probengeber APG verfügbar: Pumpe ein- bzw. ausschalten und Probe transportieren bzw. Transport stoppen
	Für Probengeber APG verfügbar: Probenkanüle absenken bzw. hochfahren
	Für Probengeber APG mit Rührfunktion verfügbar: Rührer ein- bzw. ausschalten
	Für peltiertemperiertes Zubehör verfügbar: Starttemperatur im Zubehör einstellen

Menü Datei

Die Funktionen im Menü **Datei** des Dokumentfensters werden jeweils auf das aktuelle Dokument angewandt. Einige Funktionen können bereits vorhandene Daten überschreiben. In diesem Fall erfolgt vor dem Überschreiben der Daten eine Sicherheitsabfrage. Folgende Funktionen sind im Menü **Datei** des Dokumentfensters verfügbar:

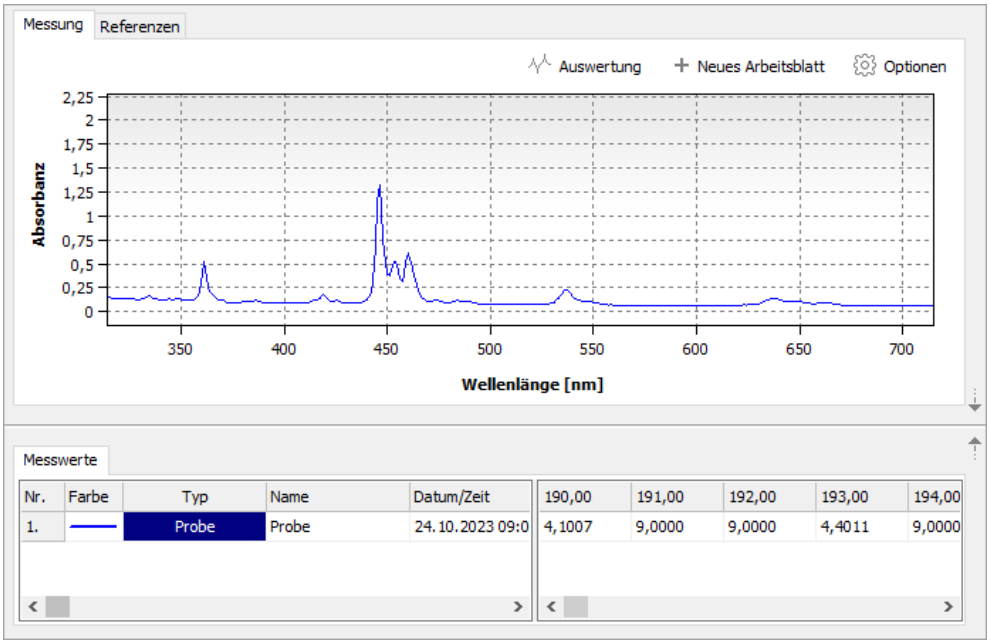
Datei	Beschreibung
Neu	Aktuelles Dokument leeren und für neue Analyse vorbereiten
Methode öffnen	Methode eines gespeicherten Dokuments öffnen Die Methode kann für weitere Messungen modifiziert werden.
Ergebnisse öffnen	Messwerte, Methode und Auswertungen öffnen Dem Dokument können weitere Daten durch Messungen mit unveränderter Methode hinzugefügt werden.
Kopieren / **Einfügen**	In den Modulen **Spektrum** und **Farbmetrik** verfügbar: Messergebnisse kopieren und in ein anderes Dokument einfügen
Dokument signieren	Dokument mit einer elektronischen Signatur versehen
Signaturen anzeigen / **Signaturenanzeige schließen**	Signaturen eines Dokuments anzeigen / Anzeige schließen
Audit Trail anzeigen / **Audit Trail verbergen**	Audit Trail anzeigen bzw. ausblenden
Speichern	Messwerte, Methode und Auswertungen in einer Datei speichern
Speichern unter	Messwerte, Methode und Auswertungen in einer neuen Datei speichern
Messwerte in CSV-Datei exportieren	Messwerte des Dokuments in das CSV-Format exportieren
Export	Messwerte und Auswertungen über die Report-Funktionen exportieren
Drucken	Messwerte, Methode und Auswertungen mit ausgewählter Reportvorlage drucken

Datei	Beschreibung
Druckvorlage erstellen	Eigene Druckvorlagen erstellen
Dokumententitel bearbeiten	Dokumententitel auf dem Reiter des Dokuments ändern
Excel starten, Messwerte und Ergebnisse exportieren	Messwerte und Ergebnisse in eine Excel-Datei exportieren und diese Datei in Excel öffnen Hinweis: Diese Funktion erfordert ein installiertes Excel-Programm.
Schließen	Dokument schließen

4.2.3 Arbeitsblätter im Dokument

Auf den Arbeitsblättern des Dokuments werden Messwerte und Referenzen angezeigt.

Das Arbeitsblatt **Messung** enthält die Messwerte der Proben und Standards, die Sie mit den Funktionen des jeweiligen Analysenmoduls auswerten können. Diese Funktionen stehen auch in der Methode des Moduls zur Verfügung. Auf dem Arbeitsblatt **Referenzen** finden Sie die gemessenen Referenzen. Die Arbeitsblätter **Messung** und **Referenzen** können nicht gelöscht werden, auf diese Weise bleiben die originalen Messdaten immer erhalten.



Funktionsleiste im Arbeitsblatt

Das Arbeitsblatt hat eine eigene Funktionsleiste auf der rechten oberen Seite:

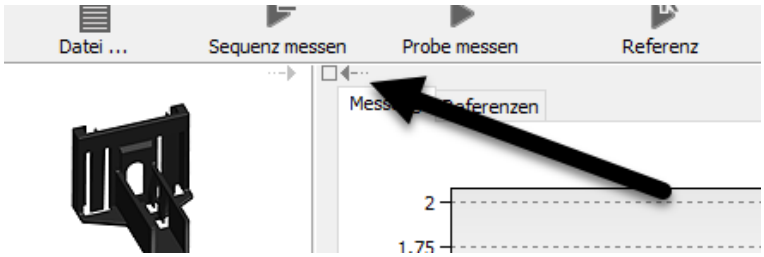
Funktion	Beschreibung
Auswertung	Menü mit modulspezifischen Auswertungen
Neues Arbeitsblatt	Nur auf den Arbeitsblättern **Messung** und **Referenzen** verfügbar: Messwerte in ein neues Arbeitsblatt kopieren
Optionen	Kurvenansichten skalieren, Textboxen erstellen, Arbeitsblatt umbenennen
	Arbeitsblatt löschen

Arbeitsblatt aufteilen

Das Arbeitsblatt teilt sich in einen unteren und einen oberen Bereich für die Ausgabe von Spektren, Messdaten und Auswertungen. Die Ausgabe hängt von den Analysen im Modul ab. Die Bereichsgrenzen können Sie mit der Maus verschieben.

- Den Mauszeiger auf eine Begrenzungslinie führen und, wenn der Doppelpfeil erscheint, mit gedrückter linker Maustaste die Begrenzungslinie verschieben.
- Mit einem Klick auf die Trennlinienpfeile an den Enden der Trennlinien die Begrenzungen in vordefinierten Bereichen verschieben.

Beispiel für Trennlinienpfeile zum Anpassen der Fensterbereiche



Hinweis: Die Trennlinienpfeile finden Sie auch im Methodenfenster auf der Seite **Probensequenz** zwischen der grafischen Eingabe und der Probentabelle.

Neues Arbeitsblatt einfügen

Sie können die Messdaten in ein neues Arbeitsblatt kopieren, um verschiedene Auswertungen nebeneinander in einem Dokument vorzunehmen.

- Im Arbeitsblatt **Messung** auf + **Neues Arbeitsblatt** klicken.
- Das Arbeitsblatt **Referenzen** können Sie auf die gleiche Weise kopieren.
  - ✓ Im Dokument erscheint ein weiteres Arbeitsblatt mit dem Titel **Neues Arbeitsblatt** mit der Kopie der Daten des Arbeitsblattes **Messung**.

Tipp

Es werden nur Messdaten kopiert, die auf dem Arbeitsblatt **Messung** aktiviert sind. Deaktivieren Sie die Messdaten, die Sie in der weiteren Datenbearbeitung nicht benötigen, indem Sie einen Rechtsklick auf die Probe ausführen und im Kontextmenü die Funktion **Ausblenden** wählen.

Arbeitsblatt umbenennen

Zur besseren Übersicht können Sie den neuen Arbeitsblättern einen neuen Titel geben. Die Arbeitsblätter **Messung** und **Referenzen** können Sie nicht umbenennen.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Optionen** | **Arbeitsblatt umbenennen** wählen.
- Im Eingabefeld den Namen editieren.
  - ✓ Das aktuelle Arbeitsblatt wird umbenannt.

4.2.4 Spektren und Messkurven auf dem Arbeitsblatt anzeigen

In folgenden Modulen werden Spektren oder Messkurven angezeigt:

- Spektrum
- Kinetik
- Thermometrie
- Farbmetrik

Spektren bzw. andere Messkurven werden in allen Modulen gleich dargestellt. Folgende Funktionen können auf die Kurvendarstellung angewendet werden:

- Kurve skalieren
- Kurve mit Text versehen (Textbox)
- Kurve/Probe markieren
- Kurvenfarbe ändern

- Kurve ausblenden (Probe deaktivieren)

Kurven skalieren

In der grafischen Darstellung der Kurven können Sie den Abbildungsmaßstab ändern und die Anzeige vergrößern. Den Kurvenausschnitt legen Sie interaktiv mit der Maus oder in einem Dialogfenster fest.

Bereich mit Maus umranden

- Mit gedrückt gehaltener Maustaste ein Rechteck über den zu vergrößernden Bereich ziehen.
  - ✓ Beim Loslassen der Maustaste aktualisiert sich die Anzeige für den markierten Bereich.
- Mit einem Doppelklick auf die Kurve wird die ursprüngliche Anzeige wieder hergestellt.

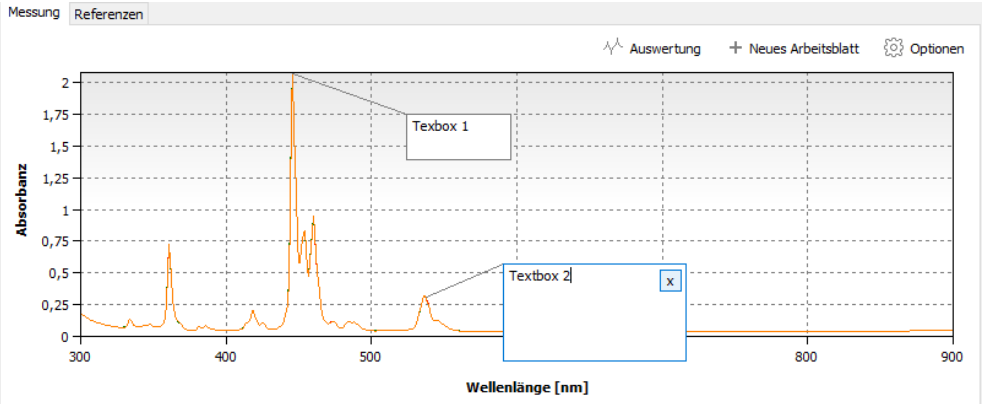
Ausführung über Dialogfenster

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Optionen** | **Skalierung** wählen.
- In der Liste **Skalierung** die Option **Benutzerdefiniert** wählen.
- In den Eingabefeldern **X-Achse** und **Y-Achse** die neuen Grenzen eingeben. Wenn die Option **Fixiert** aktiviert wurde, kann die Darstellung anschließend nicht mehr mit der Maus geändert werden.
  - ✓ Die Kurvenanzeige wird aktualisiert.

Hinweis: Bei Auswahl der Option **Automatisch** in der Liste **Skalierung** wird die ursprüngliche Ansicht wieder hergestellt.

Textbox erstellen

Eine Textbox ist ein Textfeld, das beliebig auf der grafischen Darstellung positioniert und in der Größe verändert werden kann. Eine Bezugslinie von der Textbox kann auf eine bestimmte Stelle in der Grafik verweisen. Auf diese Weise können Sie der grafischen Darstellung Anmerkungen zu Details der Messkurve hinzufügen. Textboxen werden mit den Daten gespeichert und ausgedruckt.



- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Optionen** | **Textbox erstellen** wählen. Der Cursor wandelt sich in ein Fadenkreuz mit der Bezeichnung "T".
- Auf die Stelle in der Kurve klicken, an der die Bezugslinie beginnen soll, und den Cursor mit gedrückter Maustaste zu der Stelle ziehen, an der die Textbox stehen soll.
- In die Textbox klicken und den Text editieren.
  - ✓ Die Textbox ist nun an der Grafik verankert und wird mit den Daten gespeichert und gedruckt.

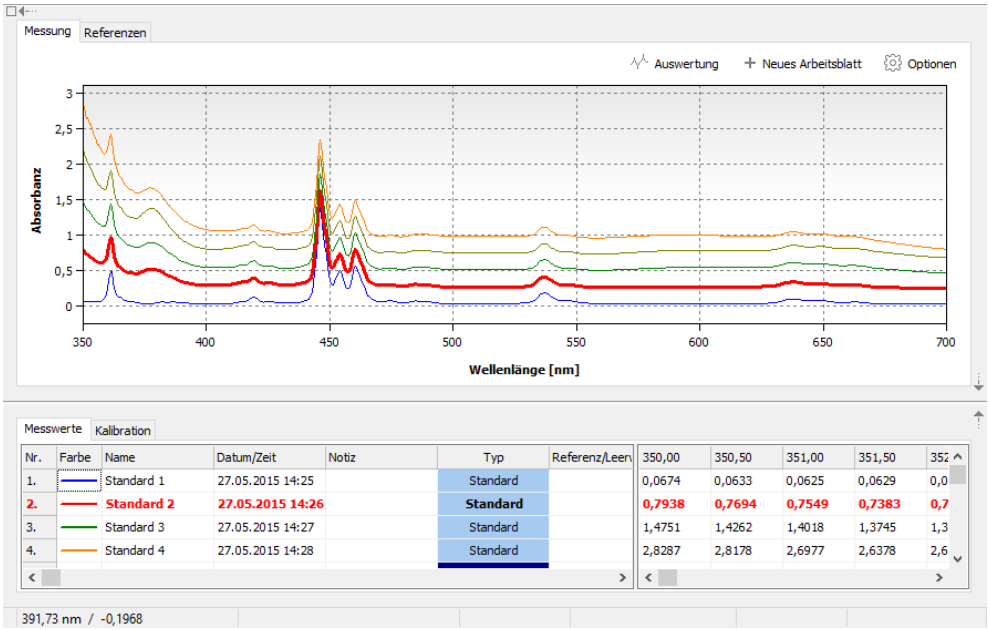
Weitere Textboxfunktionen

- Die Größe der Textbox kann nachträglich angepasst werden. Dafür den Cursor auf eine der Rahmenlinien führen und mit gedrückt gehaltener Maustaste die Rahmenlinie an die gewünschte Position verschieben.

- Um eine Textbox zu verschieben, den Mauszeiger auf den oberen Rand der Textbox führen, bis das Orientierungskreuz erscheint, und mit gedrückt gehaltener Maustaste die Textbox auf die neue Position ziehen.
- Zum Löschen der Textbox den Cursor auf die rechte obere Ecke in der Textbox führen. Wenn das Icon ✕ erscheint, darauf klicken.

Proben markieren

Zur besseren Übersicht in einer Kurvenschar können Kurven mit einer fetten Linie hervorgehoben werden.



Nr.	Farbe	Name	Datum/Zeit	Notiz	Typ	Referenz/Leer	350,00	350,50	351,00	351,50
1.		Standard 1	27.05.2015 14:25		Standard		0,0674	0,0633	0,0625	0,0629
2.		**Standard 2**	**27.05.2015 14:26**		**Standard**		**0,7938**	**0,7694**	**0,7549**	**0,7383**
3.		Standard 3	27.05.2015 14:27		Standard		1,4751	1,4262	1,4018	1,3745
4.		Standard 4	27.05.2015 14:28		Standard		2,8287	2,8178	2,6977	2,6378

- In der Probentabelle **Messwerte** einen Rechtsklick auf eine Probe ausführen.
- Im Kontextmenü die Option **Mehrere Proben markieren** wählen. Im Auswahlfenster nur die Kontrollkästchen aktivieren, deren Proben in der Grafik und der Probentabelle hervorgehoben werden sollen. Um die Hervorhebung rückgängig zu machen, die entsprechenden Kontrollkästchen deaktivieren.
- Alternativ können auch einzelne Proben direkt markiert bzw. deren Markierung entfernt werden. Dafür im Kontextmenü die Optionen **Markieren** bzw. **Markierung entfernen** wählen.
  - ✓ Die gewählten Probenkurven werden in der Grafik fett hervorgehoben und in der Probentabelle mit fetter Schrift markiert.

Kurvenfarbe ändern

Den Kurven wird automatisch eine Farbe zugeordnet. Zur besseren Übersicht können Sie die Farben einzelner Probenkurven ändern.

- In der Probentabelle **Messwerte** auf die Tabellenzelle **Farbe** der Probe klicken.
- Im Fenster **Farbe** per Mausklick eine neue Farbe wählen.
  - ✓ Die Anzeige der Kurve wird mit der neuen Farbe aktualisiert.

Kurve ausblenden / Proben (de-)aktivieren

Proben können deaktiviert und aus der Anzeige ausgeblendet werden. Gleichzeitig wird durch die Deaktivierung die Probe von Analysen ausgeschlossen, ohne die Probe völlig aus dem Datensatz zu löschen.

- In der Probentabelle **Messwerte** einen Rechtsklick auf eine Probe ausführen.
- Im Kontextmenü den Punkt **Mehrere Proben Ein-/Ausblenden** wählen. Im Auswahlfenster nur die Kontrollkästchen aktivieren, deren Proben angezeigt und analysiert werden sollen.
- Alternativ kann auch eine einzelne Probe deaktiviert bzw. aktiviert werden. Dafür im Kontextmenü die Optionen **Ausblenden** bzw. **Einblenden** wählen.

✓ Die nicht aktivierten Probenspektren werden aus der Grafik ausgeblendet und in der Probentabelle mit hellgrauer Schrift markiert.

4.3 Dokumente verwalten, drucken und exportieren

Dokumente in ASpect UV haben eine einheitliche Datenstruktur und enthalten folgende Informationen:

- Messwerte der Proben, Standards, Referenzen und Leerwerte
- Methodenparameter
- Auswertungen der Messwerte/Kalibrierkurven
- Parameter zur Datenbearbeitung
- Audit Trail
- Signaturen

Die Dateien sind im Microsoft Windows Dateisystem mit der Dateierweiterung "*.auv" gekennzeichnet.

4.3.1 Dokumente öffnen und speichern

Dokumente können sowohl im Hauptfenster als auch in den Modulen geöffnet werden. Der einfachste Weg ist das Laden von Messergebnissen oder Extrahieren von Methoden durch einen Klick auf das entsprechende Icon in der Startleiste des Hauptfensters. Falls die Icons noch nicht in der Startleiste angezeigt werden, können Sie deren Anzeige im Fenster **Optionen** | **Allgemein** | **Startleiste** aktivieren.

Ergebnisse öffnen

Mit der Funktion **Ergebnisse öffnen** laden Sie das gesamte Dokument in den Arbeitsbereich von ASpect UV. Sie können bisherige Messergebnisse und Auswertungen betrachten, weitere Messwerte hinzufügen oder die Auswertung editieren oder ergänzen. Beim Laden der Ergebnisse werden die Zubehöreinstellungen und das angeschlossenen SPECORD PLUS mit Zubehör geprüft (eingeschaltet und initialisiert oder simuliert). Es können dem Dokument nur weitere Messungen hinzugefügt werden, wenn die aktuell im SPECORD PLUS angeschlossenen Zubehöre mit den Zubehöreinstellungen in der Methode übereinstimmen. Eine weitere Analyse und Auswertung der Messdaten ist immer möglich.

Hinweis: Sie können auch Messergebnisse mit der Erweiterung "*.dat" öffnen, die mit WinASPECT oder WinASPECT PLUS erzeugt wurden.

▶ In der Startleiste auf das Icon **Ergebnisse öffnen** klicken oder im Hauptfenster den Menüpunkt **Datei** | **Ergebnisse öffnen** öffnen wählen.

▶ Im Standardfenster **Öffnen** die Dateitypen "*.auv" für ASpect UV-Dateien oder "*.dat" für WinASPECT oder WinASPECT PLUS-Dateien auswählen.

▶ Datei auswählen und mit Klick auf **Öffnen** öffnen.

✓ Die Ergebnisse werden im entsprechenden Modul angezeigt.

Alternativ können Sie im Dokumentfenster eines Moduls den Menüpunkt **Datei** | **Ergebnisse öffnen** wählen. Beim Laden im Dokumentfenster eines Moduls sind folgende Einschränkungen zu beachten:

- Es können nur Ergebnisse geöffnet werden, die auch mit diesem Modul erzeugt wurden. Anderenfalls erfolgt eine Fehlermeldung.
- Die Daten werden im aktuellen Dokument geöffnet. Vorherige Inhalte des Dokuments werden nach Rückfrage überschrieben. Wenn das aktuelle Dokument bereits gespeichert wurde, wird die gespeicherte Datei nicht verändert.

- WinASPECT und WinASPECT PLUS-Dateien können nur im Hauptfenster geöffnet werden.

Methode öffnen

Mit der Funktion **Methode öffnen** extrahieren Sie die Methode aus einem vorhandenen Dokument. Die Methode enthält die Messparameter, Parameter für Auswertungen und die Parameter der Messsequenz. Sie können die Methode editieren oder sofort mit ihr eine Messung starten.

Beim Öffnen der Methode wird geprüft, ob das initialisierte Gerät (Zubehör und SPECORD PLUS-Typ) mit den Einstellungen in der Methode übereinstimmen. Ist das nicht der Fall, wird die Methode nicht geladen. Installieren Sie das entsprechende Zubehör oder laden Sie eine geeignete Methode. Wenn Sie im Simulationsmodus arbeiten, wählen Sie den SPECORD PLUS-Typ und das Zubehör in den Einstellungen im Fenster **Optionen**.

- In der Startleiste auf das Icon **Methode öffnen** klicken oder im Hauptfenster den Menüpunkt **Datei** | **Methode öffnen** wählen.

- Alternativ können Sie im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Methode öffnen** öffnen wählen. Beim Laden der Methode gelten die gleichen Einschränkungen wie beim Laden von Ergebnissen (siehe oben).
- Im Standardfenster **Öffnen** die Datei auswählen und mit Klick auf **Öffnen** öffnen.
  - ✓ Die Methode wird geladen. Sie können mit der Methode eine Messung starten oder sie als Vorlage verwenden und editieren.

Dokument speichern

Das Speichern der Dokumente erfolgt im Dokumentfenster mit den Standardfunktionen **Speichern** und **Speichern unter**. Beim Speichern der Dateien werden sowohl Methoden, originale Daten als auch Änderungen im Dokument gespeichert.

- Wenn Änderungen in eine bereits vorhandene Datei gespeichert werden sollen, im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Speichern** wählen.
- Wenn Änderungen in eine andere Datei gespeichert werden sollen, im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Speichern unter** wählen. Im Standardfenster **Speichern unter** einen Dateinamen und eine Dateipfad eingeben und die Datei mit Klick auf **Speichern** speichern.
  - ✓ Das Dokument wird gespeichert.

4.3.2 Neues Dokument erstellen

Ein neues Dokument ist der Ausgangspunkt für die Erstellung einer Methode mit anschließender Messung. Beim Start eines Moduls erscheint ein neues Dokument ohne Daten. Alternativ kann auch das aktuelle Dokument im Modul durch ein neues Dokument überschrieben werden.

- Mit einem Klick auf ein Modul-Icon in der Startleiste oder der Wahl des Modul-Menüpunkts wird ein neues Dokument im Modul angelegt, z. B. **Modul** | **Spektrum** oder

.

  - ✓ Es erscheint ein neues Dokument mit dem Titel "Neues Dokument".
- Durch Wiederholtes Klicken auf das Icon werden weitere neue Dokumente im Modul geöffnet. Die Anzahl der in einem Modul geöffneten Dokumente wird neben dem Icon in der Startleiste angezeigt.

- Wenn verschiedene Module gleichzeitig geöffnet sind, müssen Sie mit einem Klick auf das Icon das Modul zunächst wieder in den Vordergrund holen, bevor Sie weitere Dokumente erstellen können.
- Alternativ können Sie im aktuellen Dokument den Menüpunkt **Datei** | **Neu** wählen. Bereits vorhandene Daten im aktuellen Dokumentfenster werden nach Rückfrage gelöscht und das Dokument erneuert.

4.3.3 Dokumententitel bearbeiten

Der Dokumententitel erscheint auf dem Reiter des Dokuments. Wenn mehrere Dokumente in einem Modul geöffnet sind, können Sie anhand des Titels das Dokument identifizieren. Beim Anlegen eines Dokuments steht im Titel die Bezeichnung "Neues Dokument". Erstmalig wird der Titel in der Methodeneinstellung auf der Seite **Allgemein** festgelegt. Den Dokumententitel können Sie nach dem ersten Messstart über einen Menüpunkt im Dokument ändern.

- Im Dokument den Menüpunkt **Datei** | **Dokumententitel bearbeiten** wählen.
- Im Feld **Neuer Titel** die Bezeichnung editieren.
  - ✓ Der Dokumententitel wird aktualisiert.

4.3.4 Änderungen im Audit Trail verfolgen

Alle Operationen in einem Dokument werden grundsätzlich in einem Audit Trail aufgezeichnet. Der Audit Trail ist damit das Logbuch für die erstellte Methode, die ausgeführten Messungen und Datenbearbeitungen.

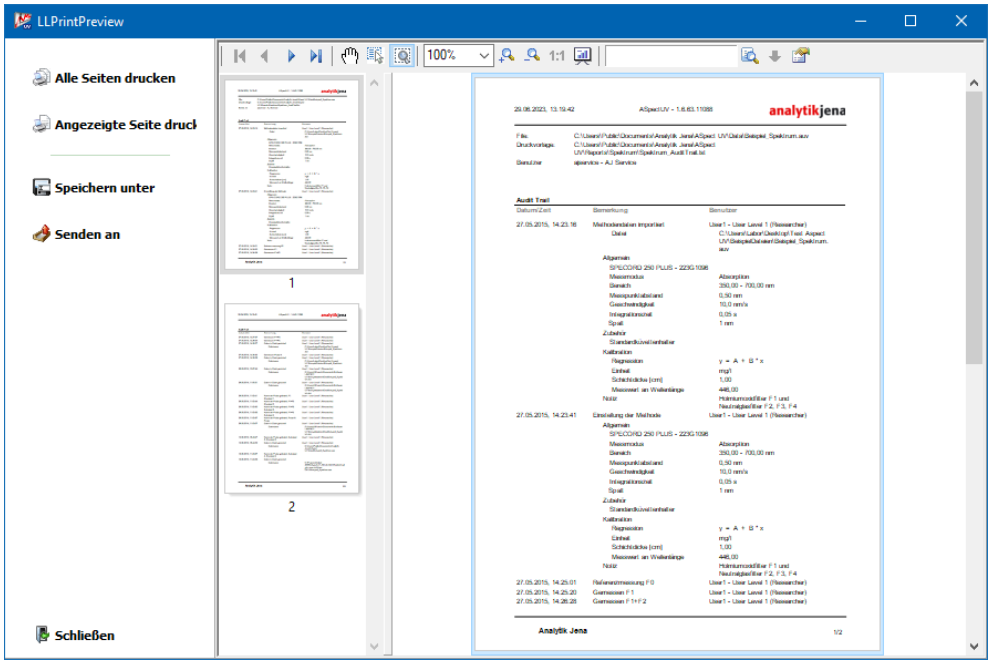
Audit Trail anzeigen

- Zur Anzeige des Audit Trails des aktuellen Dokuments im Modul den Menüpunkt **Datei** | **Audit Trail anzeigen** wählen.
  - ✓ Der Audit Trail wird auf einem Tabellenblatt in der unteren Hälfte des Arbeitsblattes eingeblendet.
- Zum Ausblenden des Audit Trails den Menüpunkt **Datei** | **Audit Trail verbergen** wählen.

4.3.5 Dokumente drucken

Sie können die Inhalte der Dokumente drucken oder als E-Mail versenden. Die Druckfunktion in den jeweiligen Modulen werden über das Fenster **LLPrintPreview**, das die Druckvorschau, die Druckfunktionen, den Export der Daten und den E-Mail-Versand enthält, gesteuert. Für den Druck müssen Sie mit einer Reportvorlage die Druckinhalte wählen.

Fenster LLPrintPreview mit Druckvorschau und Auswahl für Druck



Folgende Optionen sind für den Ausdruck verfügbar:

Option	Beschreibung
Alle Seiten drucken	Das gesamte Protokoll drucken
Angezeigte Seite drucken	Nur die aktuell ausgewählte Seite drucken
Speichern unter	Protokoll in verschiedene Formate exportieren
Senden an	Mit dem auf dem Computer installierten E-Mail-Programm das Protokoll per E-Mail versenden. Es stehen die gleichen Formate wie beim Export zur Auswahl.

Dokument drucken / E-Mail senden

- Im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Drucken** wählen.
- Im Fenster **Öffnen** im Ordner *\\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect UV\Reports* die benötigte Reportvorlage für das aktuelle Modul wählen.
- Im Fenster **LLPrintPreview** eine der oben aufgeführten Optionen wählen.
- Nur bei Druck des Protokolls: Bei Bedarf Drucker einstellen.

  ✓ Das Protokoll wird gedruckt bzw. per E-Mail versandt.

Sehen Sie dazu auch

Reportvorlagen für Druck und Export [▶ 26]

4.3.6 Daten exportieren

Die ASpect UV-Dateien mit der Erweiterung "*.auv" sind verschlüsselt und so gegen Manipulation gesichert. Um die Daten trotzdem in anderen Programmen nutzen zu können, besteht die Möglichkeit die Daten zu exportieren. ASpect UV verfügt bei der Datenausgabe über eine große Anzahl Ausgabeformate. Neben der Ausgabe auf dem Drucker können die Daten in das PDF-, HTML-, CSV-, Excel- oder Textformat exportiert oder als Bilddatei gespeichert werden. Wenn auf Ihrem PC ein Excel-Programm installiert ist, können Sie mit dem Menübefehl **Excel starten, Messwerte und Ergebnisse exportieren** in eine neue Excel-Mappe exportieren.

Daten über die Reportfunktionen exportieren

Folgende Exportformate stehen unter den Reportfunktionen zur Verfügung:

- HTML

- PDF
- Rich Text Format (RTF)
- Text Format (*.txt)

Tipp

Exportieren Sie die Messdaten in eine TXT- oder CSV-Datei, wenn Sie die Daten in ein Tabellenprogramm öffnen möchten.

Über die Reportvorlagen wird der Inhalt der exportierten Datei gesteuert. Für jedes Modul stehen unterschiedliche Vorlagen zur Verfügung.

- ▶ Im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Export** wählen.
- ▶ Im Fenster **Öffnen** die Vorlage im Ordner \\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect UV\Reports auswählen.
- ▶ Im Fenster **Ausgabe-Einstellungen** in der Liste **Ausgabe auf** das gewünschte Export-format wählen und auf **Starten** klicken.
- ▶ Im Fenster **Speichern unter** den Namen für die Exportdatei eingeben.
  - ✓ Die Messdaten werden in das gewählte Format exportiert.

Tipp

Der Export über Reports kann auch über die Druckfunktion erfolgen. Nutzen Sie dafür im Fenster **LLPrintPreview** die Funktion **Speichern unter**.

Messwerte in CSV-Format exportieren

Sie können die Messwerte in eine CSV-Datei exportieren.

- ▶ Im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Messwerte in CSV-Datei exportieren** wählen.
- ▶ Im Standardfenster **Speichern unter** einen Dateinamen eingeben bzw. auswählen und auf **Speichern** klicken.
  - ✓ Die Daten werden in eine CSV-Datei mit dem gewählten Namen exportiert.

Messwerte in Excel exportieren

Wenn Sie auf ihrem Computer ein Excel-Programm installiert haben, können Sie die Messwerte direkt, ohne zu speichern, in das Programm exportieren.

- ▶ Im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Excel starten, Messwerte und Ergebnisse exportieren** wählen.
  - ✓ Excel wird geöffnet und die Daten in eine neue Excel-Mappe exportiert.

Sehen Sie dazu auch

Reportvorlagen für Druck und Export [▶ 26]

4.3.7 Reportvorlagen für Druck und Export

Für den Druck und den Export der Messdaten und Analysenergebnisse werden Reportvorlagen mit unterschiedlichen Inhalten verwendet. Auf diese Weise kann mit Auswahl einer Reportvorlage Umfang und Inhalt der Ausgabe gesteuert werden. Für jedes Modul stehen spezielle Reportvorlagen zur Verfügung, die an die Messdaten und die möglichen Auswertungen angepasst sind.

Standardmäßig wird ein Satz Reportvorlagen installiert. Bei Bedarf können diese Vorlagen von Programmierern oder geübten Anwendern mit dem Reportdesigner "Report-/Druckmodul List & Label" individuell angepasst werden. Eine Beschreibung des Reportdesigners ist auf der Installations-CD von ASpect UV enthalten.

Die Vorlagen sind nach der Programminstallation in folgenden Ordnern abgelegt:

- Im Installationspfad C:\Program Files (x86)\ ASpect UV\Reports
- Im Bibliothekspfad \\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect UV\Reports 2.0

Modul Spektrum

\\Spectrum

Vorlage	Inhalt des Ausdrucks bzw. Exports
Spectrum_All_Data.lst	Alle vorliegenden Daten: Methode, Spektren, Kalibration, Ergebnistabelle, Auswertungen
Spectrum_All_Data_wo_MeasureData.lst	(all data without measured data) Ergebnistabelle (inkl. Variablen und Statistik falls aktiviert) und die Kalibrierkurve (falls vorhanden)
Spectrum_Audit Trail.lst	Audit Trail des Dokuments
Spectrum_Calibration.lst	Kalibrierkurve und Kalibrierparameter
Spectrum_Chart.lst	Spektren (mit dicken Linien), Ergebnisse und Kalibrierkurve
Spectrum_Measure_Values.lst	Messwerte des Dokuments
Spectrum_Measure_Values_Transposed.lst	Transponierte Ausgabe der Messwerte des Dokuments
Spectrum_Method.lst	Methode des Dokuments
Spectrum_Results.lst	Auswertungen der Messwerte

Modul Photometrie

\\Photometry

Vorlage	Inhalt des Ausdrucks bzw. Exports
Photometry_All_Data.lst	Alle vorliegenden Daten: Methode, Kalibration, Ergebnistabelle, Auswertungen
Photometry_Audittrail.lst	Audit Trail des Dokuments
Photometry_Calibration.lst	Kalibrierkurve und Kalibrierparameter
Photometry_Evaluation.lst	Auswertungen der Messwerte
Photometrie_Measure_Values.lst	Messwerte des Dokuments
Photometry_Measure_Values_Transposed.lst	Transponierte Ausgabe der Messwerte des Dokuments
Photometry_Method.lst	Methode des Dokuments
Photometry_Results.lst	Ergebnistabelle (inkl. Variablen und Statistik falls aktiviert) und die Kalibrierkurve (falls vorhanden)

Modul Kinetik

\\Kinetics

Vorlage	Inhalt des Ausdrucks bzw. Exports
Kinetics_All_Data.lst	Alle vorliegenden Daten: Methode, Spektren, Kalibration, Ergebnistabelle, Auswertungen
Kinetics_Audit Trail.lst	Audit Trail des Dokuments
Kinetics_Calibration.lst	Kalibrierkurve und Kalibrierparameter
Kinetics_Charts.lst	Ergebnistabelle, Kinetikkurven (mit dicken Linien) und Kalibrierung (falls vorhanden)

Vorlage	Inhalt des Ausdrucks bzw. Exports
Kinetics_Evaluation.lst	Auswertungen der Messwerte
Kinetics_Measure_Values.lst	Messwerte des Dokuments
Kinetics_Measure_Values_Transposed.lst	Transponierte Ausgabe der Messwerte des Dokuments
Kinetics_Method.lst	Methode des Dokuments
Kinetics_Results.lst	Ergebnistabelle (inkl. Variablen und Statistik falls aktiviert) und die Kalibrierkurve (falls vorhanden)

Modul Thermometrie

\\Thermometry

Vorlage (de/en)	Inhalt des Ausdrucks bzw. Exports
Thermometry_All_Data.lst	Alle vorliegenden Daten: Methode, Temperaturkurven, Ergebnistabelle, Auswertungen

Modul Farbmetrik

\\Colometric

Vorlage (de/en)	Inhalt des Ausdrucks bzw. Exports
Colormetric_All_Data.lst	Alle vorliegenden Daten: Methode, Spektren, Ergebnistabelle, Farbkoordinaten/Farbzahlen

Modul Validierung AJ

\\Validation\AJ

Vorlage (de/en)	Inhalt des Ausdrucks bzw. Exports
Compact_AJ.lst	Kurzprotokoll mit Übersicht der Validierungsergebnisse
Detailed_AJ.lst	Ausführliches Validierungsprotokoll mit Sollwerten, Messdaten ggf. Spektren, Validierungsergebnissen und Audit Trail

Modul Validierung Standard Ph. Eur.

\\Validation\Standard Ph Eur

Vorlage (de/en)	Inhalt des Ausdrucks bzw. Exports
Compact_EUP.lst	Kurzprotokoll mit Übersicht der Validierungsergebnisse
Detailed_EUP.lst	Ausführliches Validierungsprotokoll mit Sollwerten, Messdaten ggf. Spektren, Validierungsergebnissen und Audit Trail

Modul Validierung Wartung economic

\\Validation\Eco maintenance

Vorlage (de/en)	Inhalt des Ausdrucks bzw. Exports
Compact_ECO.lst	Kurzprotokoll mit Übersicht der Validierungsergebnisse
Detailed_ECO.lst	Ausführliches Validierungsprotokoll mit Sollwerten, Messdaten ggf. Spektren, Validierungsergebnissen und Audit Trail

Modul Validierung USP

\\Validation\USP

Vorlage (de/en)	Inhalt des Ausdrucks bzw. Exports
USP_All_Data.lst	Ausführliches Validierungsprotokoll mit Sollwerten, Messdaten ggf. Spektren, Validierungsergebnissen und Audit Trail

Benutzerverwaltung

\\User Management

Vorlage	Inhalt des Ausdrucks bzw. Exports
UM_Audittrail.lst	Audit Trail über die Änderungen in den Benutzerprofilen
UM_LoginList.lst	Liste der erfolgreichen und fehlgeschlagenen Benutzeranmeldungen in ASpect UV
UM_UserList.lst	Liste der angelegten Benutzerprofile und deren Status
UM_UserRights.lst	Liste der Rechte eines ausgewählten Benutzerprofils

Service Dokumentation

Die Reportvorlagen im Ordner \\Service werden für Service-Zwecke verwendet.

4.3.8 Messdaten automatisch archivieren

Sie können Daten automatisch archivieren. Folgende Optionen stehen Ihnen dafür zur Verfügung:

- Daten speichern
- Drucken mit einer ausgewählten Reportvorlage
- Exportieren mit einer ausgewählten Reportvorlage
- Daten als CSV-Datei exportieren

Für das automatische Archivieren müssen Sie **in der Methode** die Zieldateien und Reportvorlage festlegen. Den Zeitpunkt und die Aktivierung dieser Funktion definieren Sie programmweit im Fenster **Optionen**.

Zieldateien und Reportvorlagen in der Methode definieren

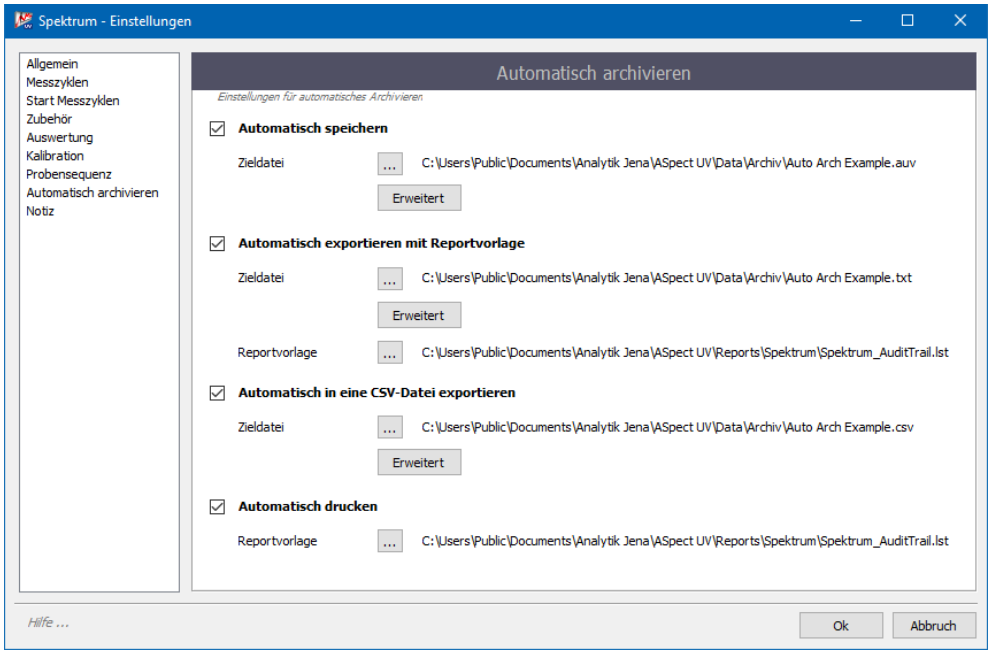
- In den Methodenparametern auf die Seite **Automatisch archivieren** wechseln.
- Die Archivierungsfunktion aktivieren.
- Für das automatische Speichern oder den Datenexport die Zieldatei wählen. Neben Zieldatei auf ... klicken und im Fenster **Speichern unter** den Pfad und den Dateinamen eingeben.
- Optional können Sie nach Klick auf **Erweitert** ein Fenster mit Optionen für den Zieldateinamen öffnen und Folgendes definieren:
  - **Zusatz im Dateinamen**: Eine Zeichenkette vor den gewählten Namen (Präfix) setzen oder an den Namen anhängen (Suffix).
    Diese Funktion können Sie beispielsweise zusammen mit der Option **Änderung vor der Speicherung erlauben** nutzen, um an einen festgelegten Probennamen eine Serien-ID anzuhängen oder diese dem Probennamen voranzustellen.
  - **Zeitstempel**: Die Startzeit der Messung zum Namen hinzufügen.
    Die Startzeit wird im Format yyyy-mm-dd_hh_mm-ss,sss ausgegeben,z. B. "autosave-Photometrie 2020-10-22_13-59 50,022.auv". Der Zeitstempel kann ebenfalls dem Dateinamen vorangestellt oder angehängt werden.
    Diese Option ist in der Voreinstellung aktiviert.

- **Änderung vor der Speicherung erlauben**: Wenn aktiviert, erscheint zum Zeitpunkt der Archivierung ein Fenster mit einem Eingabefeld zum Ändern des Dateinamens. Der Zielpfad kann nicht geändert werden.

▶ Für das automatische Drucken oder den Datenexport die Reportvorlage wählen. Neben Reportvorlage auf ... klicken und im Fenster **Öffnen** die Reportvorlage wählen.

Hinweis: Die automatische Archivierung müssen Sie programmweit im Fenster **Optionen | Erweitert | Automatische Archivierung** aktivieren. Wenn die Archivierung nicht aktiviert ist, erhalten Sie darüber eine Meldung beim Schließen und Laden einer Methode mit automatischer Archivierung. Sie können über den Link in der Meldung das Fenster **Optionen** öffnen und die Archivierung aktivieren. Wenn die Archivierung weiterhin deaktiviert ist, können Sie mit der Methode Messungen starten, müssen aber die Daten manuell speichern, drucken oder exportieren.

Beispiel Methodeneinstellungen im Modul Spektrum



Sehen Sie dazu auch

Automatische Archivierung aktivieren [▶ 148]

4.4 Probensequenzen

Eine Probensequenz enthält eine Liste mit der Reihenfolge der abzuarbeitenden Proben mit Informationen über Probentyp, Namen und weiteren für die Analyse wichtigen Daten der Proben. Nach Messstart wird diese Sequenz automatisch abgearbeitet und die Ergebnisse im Ergebnisfenster angezeigt. Probensequenzen können nach der Messung eingesehen und um weitere Proben ergänzt werden

4.4.1 Probentypen und Sonderproben in ASpect UV

In ASpect UV werden verschiedene Probentypen in den Probensequenzen verwendet. Die Probentypen haben in der Analyse bestimmte Funktionen. In den Probentabellen werden die Probentypen in der Spalte **Probentyp** definiert. In der Grafik der Probensequenzen sind die Probentypen mit einem kleinen Symbol (Kreis mit Buchstaben) gekennzeichnet und können per Mausklick geändert werden.

Probe	Symbol	Probe mit unbekannter Konzentration des Analyten
Referenz	R	Jede Absorptions-, Transmissions- oder Reflexionsmessung erfordert eine vorhergehende Messung der Basislinie als gerätespezifischen Referenzwert. Die Referenzmessung kann mit leerem Probenraum oder Referenzprobe (Probenmatrix ohnen Analyten) erfolgen. Meist wird in der Referenzmessung gleich die Referenzprobe mitgemessen. Die folgenden Messungen von Probe und Standard werden mit der Referenzmessung korrigiert.
Probe	P (En: S)	Probe mit Analyten
Leerwert	0	Probe ohne Analyten (nur Probenmatrix) Dieser Wert wird benötigt, wenn Sie den Messwert der Probenmatrix angezeigt bekommen möchten. Sonst können Sie die Probenmatrix auch in der Referenz messen. Für die Aufnahme des Leerwerts müssen Sie in der Probensequenz die Reihenfolge Referenz – Leerwert – Probe einstellen. Die Referenzmessung (Basislinie) erfolgt mit leerem Probenraum oder einer Probe ohne Probenmatrix, z. B. einer Küvette mit Wasser. Alle folgenden Probenmessungen werden mit dem Leerwert korrigiert.
Standard	Std	Probe mit bekannter Konzentration des Analyten bei Analysen mit Kalibration

Für einige Zubehöre gibt es Sonderproben, an denen keine Messwertaufnahme erfolgt. Sie werden ebenfalls als Probentyp spezifiziert.

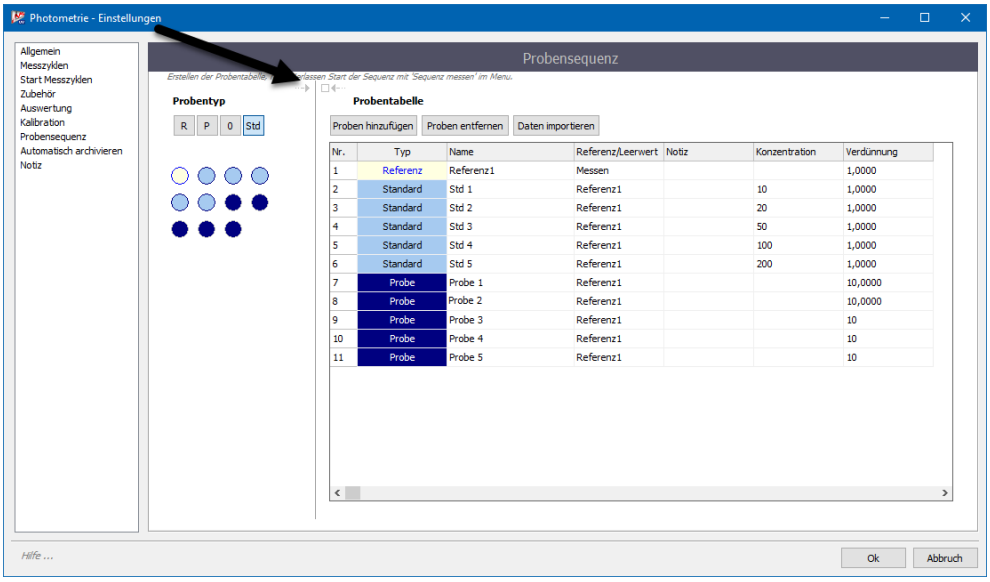
Probentyp	Symbol	Beschreibung
Keine Messung	?	Für Küvettenwechsler und APG Der betreffende Zubehörplatz ist nicht belegt.
Spülen	W	Für Kassetten-Sipper-System und APG Die Probe auf diesem Zubehörplatz wird zum Spülen der Probenwege (Kanüle, Schläuche) verwendet.

4.4.2 Aufbau der Seite Probensequenz

Die Seite **Probensequenz** der Methodenparameter ist in allen Modulen von ASpect UV identisch. Die Seite ist in zwei Bereiche aufgeteilt: links der Grafikbereich und rechts die Probentabelle. Im Grafikbereich erhalten Sie eine schnellen Überblick über die Probenfolge und können den Probentyp per Mausklick zuordnen. In der Tabelle editieren Sie alle Eigenschaften der Proben wie Probentyp, Probennamen, Standardkonzentrationen und andere.

Wenn der Grafikbereich nicht angezeigt wird, klicken Sie auf die Trennlinienpfeile (Pfeil in Abbildung unten), um den Grafikbereich zu öffnen. Anschließend schieben Sie mit gedrückter Maustaste die Trennlinie in die richtige Position.

Beispiel für Methodenseite Probensequenz im Modul Photometrie



Buttons im Fenster Probensequenz

Mit den Buttons fügen Sie der Tabelle weitere Proben hinzu oder löschen nicht benötigte Proben.

Button	Beschreibung
Proben hinzufügen	Eine oder mehrere Proben eines Probentyps ab einem ausgewählten Listenplatz in der Sequenz hinzufügen
Proben entfernen	Ein oder mehrere Proben eines Probentyps aus der Sequenz entfernen
Daten importieren	Probendaten aus einer CSV- oder TXT-Datei importieren

Probentabelle

Die Spalten der Probentabelle können Sie selbst konfigurieren.

- Rechtsklick auf den Spaltenkopf ausführen und im Kontextmenü alle benötigten Spalten aktivieren.
- Um eine Spalte an eine andere Position zu verschieben, auf den Titel der Spalte klicken und mit gedrückter Maustaste die Spalte an die gewünschte Position ziehen.

  ✓ Die Tabelle ist konfiguriert.

Die Tabellenspalten beinhalten die Probeneigenschaften.

Spalte	Beschreibung
Nr.	Zeile in der Probensequenz
Pos.	Position im Zubehör
Charge	Beladung des Zubehörs
Typ	Probentyp oder Sonderprobe
Name	Probenname
Referenz/Leerwert	Referenz bzw. Leerwert, mit dem Probenmesswert korrigiert wird
Notiz	Optionale Notiz zur Probe
Einwaage	Einwaage der Probe beim Probenaufschluss Dieser Wert wird bei Analysen mit Kalibration in der Berechnung der Konzentration bei Proben und Leerwerten berücksichtigt. Er kann darüber hinaus für alle Probentypen (inkl. Standard) im Formeleditor genutzt werden.
Konzentration	Konzentration des Standards
Verdünnung	Verdünnung der Probe

Spalte	Beschreibung
	Dieser Wert wird bei Analysen mit Kalibration in der Berechnung der Konzentration bei Proben und Leerwerten berücksichtigt. Er kann darüber hinaus für alle Probentypen (inkl. Standard) im Formeleditor genutzt werden.
Variable A ... H	Probenabhängige Variablen, die in einer Formel verrechnet werden können Beispiel: Wenn Sie eine Konzentrationsanalyse mit Faktor berechnen, können Sie in der Formel die Verdünnung als probenabhängige Variable berücksichtigen.

4.4.3 Probensequenzen erstellen und editieren

Probensequenzen sind abhängig vom Zubehör. Bei manuellem Probenwechsel folgen die Proben lückenlos aufeinander. Bei Küvettenwechslern und automatischen Probengebern wird jeweils die Beladung (Charge) berücksichtigt.

Ab ASpect UV 2.0 werden Referenzen und Leerwerte im Dokument gespeichert, sodass sie in anderen Methoden geladen und für die Berechnung wiederverwendet werden können. Dafür müssen Sie für jede Referenz und jeden Leerwert einen eindeutigen Namen in der Probentabelle eintragen.

Bei Bestätigen der Methodenparameter mit **Ok** wird unter anderem geprüft, ob die Probentabelle ausreichend ausgefüllt ist oder ob für die Analyse notwendige Daten fehlen. Unter anderem müssen die Standardkonzentrationen und die Namen der Referenzen/ Leerwerte eingetragen sein.

HINWEIS

Am Beginn der Probensequenz sollte eine Referenz stehen. Alle darauf folgenden Messungen werden mit der Referenz korrigiert. Sie ist so lange gültig, bis eine neue Referenz gemessen oder die Methode (das Dokument) gewechselt wird.

Wenn in der Sequenz keine Referenz definiert wurde, muss eine Referenzmessung manuell vor dem Start der Sequenz erfolgen.

Probensequenzen mit manuellem Probenwechsel

Bei Verwendung von Küvettenhaltern und Zubehör für feste Proben müssen Sie nach jeder Messung die Probe manuell tauschen. Die Proben geben Sie aufeinanderfolgend ohne Lücken in der Probentabelle ein.

- In den Methodenparametern auf die Seite **Probensequenz** wechseln.
- Auf **Proben hinzufügen** klicken.
- Im Fenster **Proben hinzufügen** für die ersten Proben eines Typs folgende Daten eingeben:

Option	Beschreibung
Einfügen	Auswahl des Einfügebereichs der Proben **Am Anfang** Proben ab der Zeile 1 der Probentabelle einfügen **Am Ende** Proben an das Ende der Probentabelle anfügen **Ab Zeilennummer** Proben mit Beginn der ausgewählten Zeilennummer aufeinanderfolgend einfügen

Option	Beschreibung
	Wenn auf dem gewählten Probenplatz schon Einträge vorhanden sind, werden sie in der Probentabelle nach unten verschoben. Es werden keine Probeneinträge überschrieben.
Probentyp	Auswahl des Probentyps
Anzahl	Anzahl der einzufügenden Proben des gleichen Typs

- Eingaben mit **Ok** bestätigen.
- Erneut auf **Proben hinzufügen** klicken und die weiteren Einträge vornehmen, bis alle Proben/Probentypen angelegt sind.
- Wenn Referenzen und Leerwerte angelegt sind, für diese Proben einen Probennamen eingeben.
- Für Standards die bekannten Analytkonzentrationen eingeben.
  - ✓ Die Probentabelle ist angelegt. Sie können weitere Eingabe zu den Probeneigenschaften vornehmen (siehe unten).

Probensequenzen mit automatischen Probenwechsel

Bei der Verwendung von Küvettenwechslern oder Probengebern werden die Proben gemäß der Belegung des Zubehörs (Charge) automatisch angefahren und gemessen. Nach der Messung der 1. Charge können Sie das Zubehör erneut belegen und die nächsten Messungen automatisch ausführen. In der Probentabelle definieren Sie die Probenabfolge deshalb chargenweise. Innerhalb einer Charge müssen die Probenplätze nicht lückenlos belegt werden.

Wenn nicht bereits angezeigt, blenden Sie bei Verwendung eines Küvettenwechslers oder Probengebers zur besseren Übersicht über die Probenplatzierung im Zubehör die Spalte **Charge** ein.

- In den Methodenparametern auf die Seite **Probensequenz** wechseln.
- Auf **Proben hinzufügen** klicken.
- Im Fenster **Proben hinzufügen** für die ersten Proben eines Typs folgende Daten eingeben:

Option	Beschreibung
Einfügen	Auswahl des Einfügebereichs der Proben **Am Anfang** Proben ab der Zeile 1, 1. Charge der Probentabelle einfügen **Am Ende** Proben an das Ende der Probentabelle anfügen **Ab Zeilennummer** Proben mit Beginn der ausgewählten Zeilennummer aufeinanderfolgend einfügen **Ab Position in Charge** Proben ab der ausgewählten Position in der Charge einfügen **Ab erster freier Position in Charge** Die nächste freie Position zum Einfügen der Proben wird automatisch gesucht
Probentyp	Auswahl des Probentyps
Anzahl	Gesamtanzahl der einzufügenden Proben des gleichen Typs
Gesamt pro Charge	Gesamtanzahl Proben innerhalb einer Belegung des Zubehörs unabhängig vom Probentyp

- Eingaben mit **Ok** bestätigen.
- Erneut auf **Proben hinzufügen** klicken und die Einträge vornehmen, bis alle Proben/Probentypen angelegt sind.

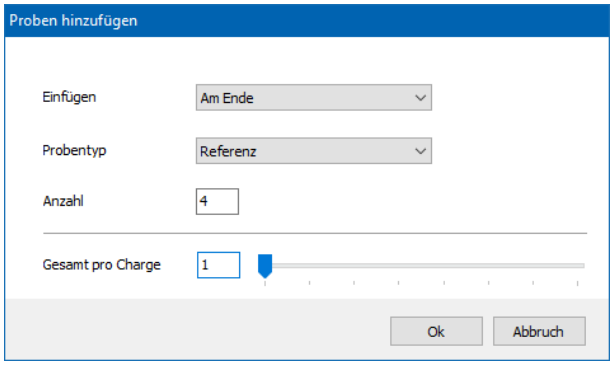
- Wenn Referenzen und Leerwerte angelegt sind, für diese Proben einen Probennamen eingeben.
- Für Standards die bekannten Analytkonzentrationen eingeben.

  ✓ Die Probentabelle ist angelegt. Sie können weitere Eingabe zu den Probeneigenschaften vornehmen (siehe unten).

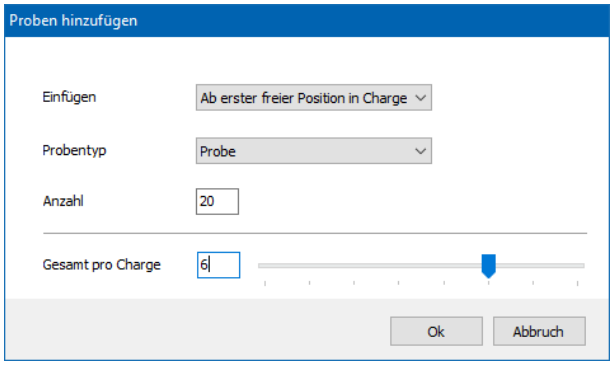
Beispiel für eine Probensequenz mit 8fach-Küvettenwechsler

Innerhalb der Probensequenz können Sie die Proben unterschiedlicher Typen über verschiedene Chargen im Küvettenwechsler oder Probengeber verteilen. Im Beispiel werden für den 8fach-Küvettenwechsler die Einstellungen für eine Messung von 4 Chargen mit jeweils 5 Proben und der dazugehörigen Referenz vorgenommen.

- Auf **Proben hinzufügen** klicken und zuerst die 4 Referenzproben auf die jeweils 1. Probenplätze der einzelnen Chargen des Küvettenwechslers verteilen:

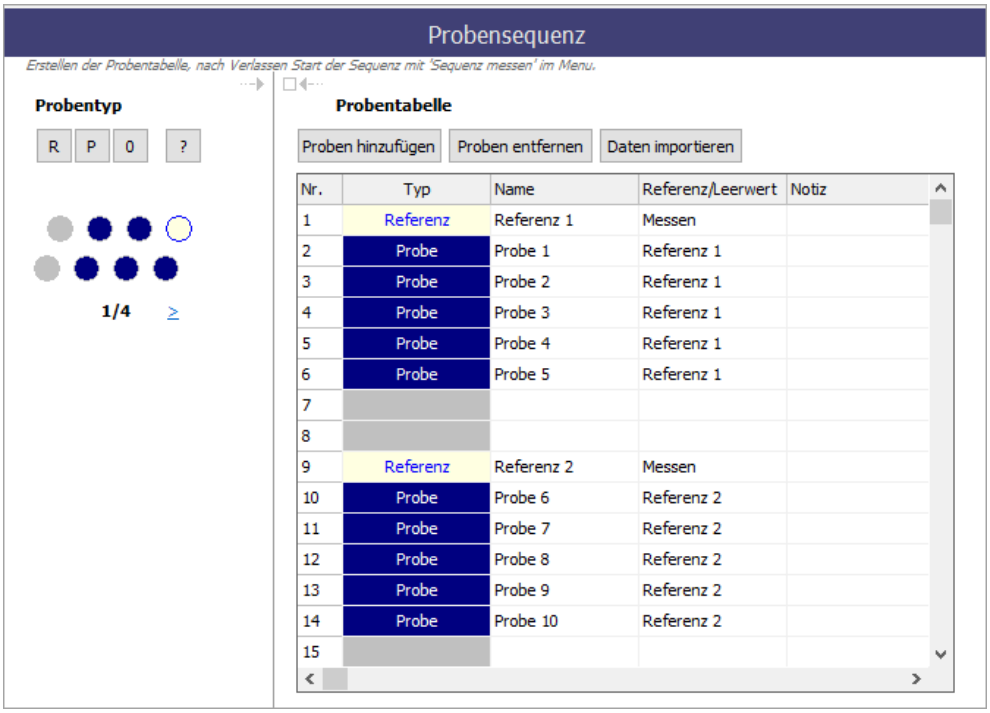


- Eingaben mit **Ok** bestätigen.
- Erneut auf **Proben hinzufügen** klicken und die Proben auf die verschiedenen Chargen verteilen (5 Proben * 4 Chargen = Anzahl 20; 1 Referenz + 5 Proben = 6 Proben gesamt pro Charge):



- Eingaben mit **Ok** bestätigen.

  ✓ Es werden 4 Chargen angelegt, in denen jeweils eine Referenz an erster Stelle steht und anschließend 5 Proben folgen. Pro Charge (Beladung) bleiben 2 Probenplätze im Küvettenwechsler leer.



Probennamen eingeben

Die Eingabe der Probennamen für die Probentypen **Probe** und **Standard** ist optional. Sie können auch nach der Messung noch eingetragen werden. Für die Probentypen **Referenz** und **Leerwert** müssen zwingend eindeutige Probennamen vergeben werden.

- In die Probenzelle der Spalte **Name** klicken und den Namen eingeben.
  Wenn Sie den Namen mit der Maus markieren, stehen Ihnen nach Rechtsklick im Kontextmenü die Standard-Editierfunktionen (Ausschneiden, Kopieren, Einfügen und Löschen) zur Verfügung.

Aufeinanderfolgenden Proben kann der gleiche Name bzw. bei Namen mit Nummerierung auch ein aufsteigender Index zugewiesen werden.

- In der 1. Zelle der Folge einmal klicken, den Namen eingeben und mit der Enter-Taste bestätigen.
- Zelle mit Namen sowie die folgenden Zellen mit gedrückter Maustaste markieren.
- Mit rechter Maustaste auf die Markierung klicken und im Kontextmenü **Unten ausfüllen** bzw. **Unten aufsteigend ausfüllen** wählen.
  - ✓ Allen Proben wurde der gleiche Name oder der Name mit aufsteigender Nummerierung zugewiesen.

Weitere Probendaten eingeben

- Bei Aktivierung der Kalibration müssen Sie in der Spalte **Konzentration** der Probentabelle die Konzentration der Standardproben eingeben.
- Bei Bedarf können Sie die Faktoren für Einwaage und Verdünnung für Proben und Standardproben eingeben.
- In weiteren Tabellenspalten können Sie individuelle Variablen A ... H, Notiz und weitere Probendaten für jede Probe eingeben.
- Die Parameter **Einwaage** und **Verdünnung** werden nur bei Analysen mit Kalibration in der Berechnung berücksichtigt. Bei allen anderen Analysen sind diese Eingaben nur eine zusätzliche Information zur Probe. Wenn Sie Einwaage und Verdünnung in einer Konzentrationsanalyse mit Faktor verrechnen möchten, nutzen Sie die Variablen A ... H in der Formel.

Probentypen editieren

In der Probentabelle können Sie die Probentypen ändern. Für Referenzen und Leerwerte ist beim ersten Einfügen in die Probentabelle die Messung in der Sequenz voreingestellt. Sie können stattdessen die Verwendung von gespeicherten Daten definieren.

- In das Probentypenfeld in der Probentabelle rechtsklicken und im Kontextmenü den neuen Probentyp wählen.
- Für Referenzen und Leerwerte eine der beiden Optionen **Messen** oder **Laden aus Datei** wählen. Bei Bedarf eine passende gespeicherte Referenz mit gleichen Methodenparametern auswählen.

Alternativ können Sie die Probentypen mit den Probensymbolen in der Grafik editieren.

- Den Grafikbereich durch Verschieben der Trennlinienpfeile vergrößern, bis die Probensymbole mit ihrer Nummerierung erscheinen. Die Nummerierung bezeichnet bei manuellem Probenwechsel die Zeile in der Probentabelle oder bei automatischen Wechsel den Platz im Zubehör.
- Den Button des Probentyps (**Probentyp**) aktivieren und auf das Probensymbol klicken. Um mehrere nebeneinanderliegende Proben gemeinsam zu markieren, mit gedrückter Maustaste einen Rahmen um die Probensymbole ziehen.
  - ✓ Die Probentypen werden entsprechend geändert.

Proben aus der Sequenz entfernen

Sie können nicht benötigte Proben aus der Probentabelle entfernen.

- Auf **Proben entfernen** klicken.
- Die zu entfernenden Proben mit den folgenden Einstellungen auswählen:

Option	Beschreibung
Löschen	**Am Anfang** Anzahl Proben am Anfang der Probentabelle löschen
	Am Ende Anzahl Proben am Ende der Probentabelle löschen
	Anzahl ab Zeilennummer Anzahl Proben ab ausgewählter Zeilennummer löschen
	Zeilennummer von - bis Proben zwischen den angegebenen Zeilennummern löschen
Typ	**Alle** Proben, unabhängig vom Probentyp, löschen
	Probentyp Proben des ausgewählten Probentyps löschen
Anzahl	Anzahl der zu entfernenden Proben

Probensequenz während der Messung editieren

Eine laufende Messung können Sie unterbrechen, um noch nicht abgearbeitete Proben der Sequenz zu editieren oder weitere Proben der Sequenz hinzuzufügen.

- Im Dokumentfenster die Messung mit Klick auf unterbrechen.
  Das Fenster **Sequenz einstellen** erscheint.
- Weitere Proben der Sequenz hinzufügen oder die noch nicht bearbeiteten Proben beliebig editieren (siehe oben) und mit **Ok** bestätigen.
- Die Abfrage zum Starten der Messung mit **Ja** bestätigen.
  - ✓ Die Messung wird fortgeführt.

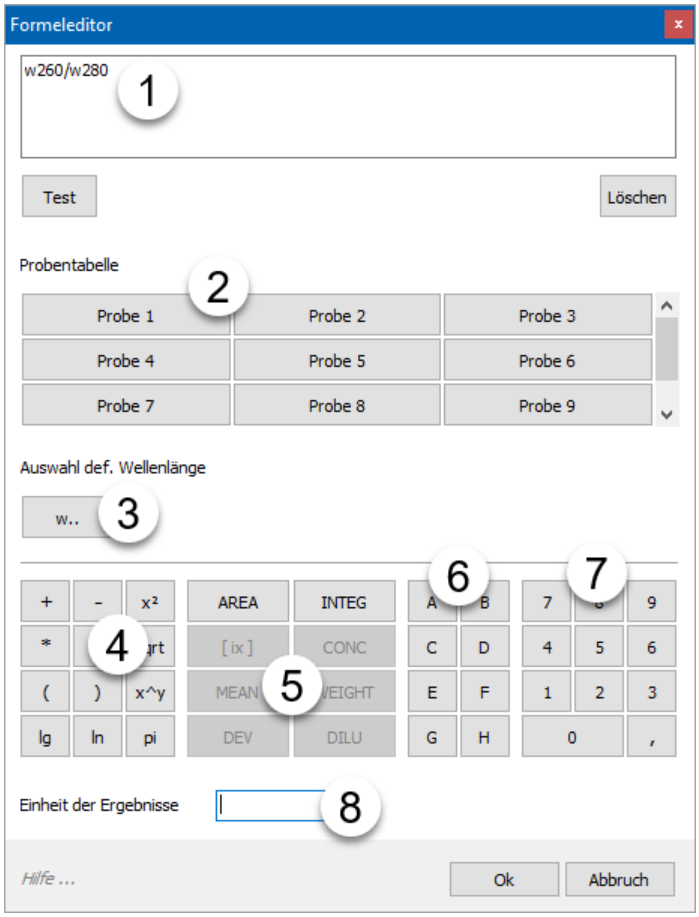
4.5 Formeln verwenden

In ASpect UV können Messergebnisse einer oder mehrerer Proben einer Sequenz in einer Formel (Funktion) ausgewertet werden.

In der Methode können Sie die Formeln auf den Seiten **Auswertung** oder **Kalibration** erstellen. Diese Formeln werden dann auf die mit dieser Methode gemessenen Proben angewendet.

Nach der Probenmessung werden die Ergebnisse der Formelberechnungen im Auswertebereich des Dokumentfensters auf dem Tab **Formel** angezeigt. Sie können die Auswertungen durch Eingabe weiterer Formeln ergänzen oder vorhandene Formeln editieren.

Aufbau des Formeleditors



Nr.	Beschreibung
1	Im **Eingabebereich** können Sie die Formel (Funktion) entweder mit Hilfe der Buttons zusammenstellen oder direkt über die Tastatur eingeben. Die Buttons unter dem Eingabereich dienen zur Prüfung und Korrektur der Formeln: **Test** Richtigkeit der Formelsyntax testen **Löschen** Letzten Term in der Formel löschen
2	**Probentabelle** entsprechend der eingestellten Probensequenz Wenn Sie in der Formel die Werte ausgewählter Proben (Argument mit Probenbezug) miteinander verknüpfen möchten, erstellen Sie zunächst auf der Seite **Probensequenz** eine Probentabelle und geben Sie den Proben eindeutige Namen. Die angelegten Proben finden Sie in diesem Bereich des Formeleditors.
3	Funktionsargumente
4	Operanden
5	Funktionen
6	Probenabhängige Variablen

Nr.	Beschreibung
	Es stehen 8 (A – H) probenabhängige Variablen zur Verfügung. Der Wert der Variablen wird für jede Probe individuell bereits in der Probentabelle der Sequenz oder bei nachträglichen Berechnungen nach der Messung in die Ergebnistabelle eingetragen.
7	Zahlen
8	Einheit des Ergebnisses

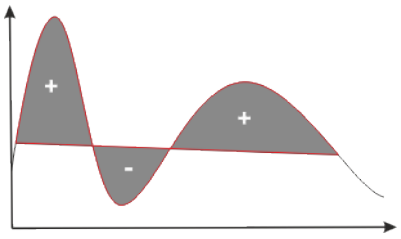
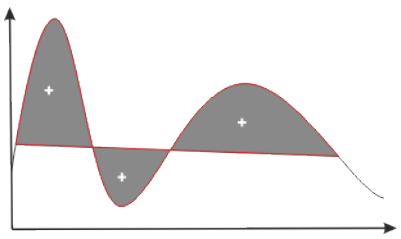
Funktionsargumente

Sie können Messwerte an definierten Wellenlängen, Zeiten oder Temperaturen als Argumente in den Funktionen verwenden. Die Verfügbarkeit hängt vom gewählten Modul und den Einstellungen im Messparameterfenster ab.

Button	Beschreibung	Syntaxbeispiel
w...	Messwert an einer definierten Wellenlänge	w280
t...	Für Modul **Kinetik** Messwert an einem definierten Zeitpunkt im Format thh:mm:ss	t00:00:10
T...	Für Modul **Thermometrie** Messwert an einer definierten Temperatur	T38

Funktionen

Im Formeleditor sind Funktionen enthalten, die in der Formel verwendet werden können. Sie finden die Funktionen im unteren Bereich des Formeleditors.

Button	Beschreibung	Syntaxbeispiel
INTEG	Für Spektren, Zeitkurven oder Temperaturkurven Integral zwischen der Messkurve und einer Basislinie Die Basislinie wird durch zwei Grenzpunkte, deren Abszissenwerte eingegeben werden, definiert. Die Ordinatenwerte der Grenzpunkte entsprechen den zu den Abszissenwerten zugehörigen Messwerten. Wenn eine Basislinie mehrere Peaks schneidet, werden Flächen oberhalb und unterhalb von Messkurve und Basislinie eingeschlossen. Das Integral ist die Differenz der Flächen oberhalb und unterhalb der der Basislinie. 	INTEG[320~500]
AREA	Für Spektren, Zeitkurven oder Temperaturkurven Betrag der Fläche zwischen der Messkurve und einer Basislinie Die Basislinie wird, wie beim Integral, durch 2 Grenzpunkte definiert. Der Betrag der Flächen ist die Summe der Flächen oberhalb und unterhalb der der Basislinie. 	AREA[320~500]

Button	Beschreibung	Syntaxbeispiel
SLOPE	Für Modul **Kinetik** Anstieg der Kinetikkurve in einem definierten Zeitbereich	SLOPE[00:00:10~00:01:00]
TIME	Für Modul **Kinetik** Zeitpunkt an einem definierten Absorbanzwert Wenn der Zeitpunkt zwischen 2 Messwerten liegt, wird mit linearer Interpolation der Zeitpunkt des Absorbanzwerts ermittelt.	TIME(2)
Y[i]	Für Modul **Kinetik** Messwert an einem ausgewählten Messpunkt	Y[1]
CONC	Für Methoden mit Kalibration Konzentrationswert einer Probe oder eines Standards	CONC
WEIGHT	Faktor für die Einwaage einer Probe aus der Probentabelle	WEIGHT
DILU	Verdünnungsfaktor einer Probe aus der Probentabelle	DILU
[ix]	Mehrfachmessungen und zeitzyklische Messungen Wert einer ausgewählten Einzelmessung Die Einzelmessungen innerhalb einer Mehrfachmessung oder einer zyklischen Messung werden beginnend mit 1 durchnummeriert. An den Index der Einzelmessung fügen Sie direkt den gewünschten Wert an.	[5]w560
MEAN	Mehrfachmessungen und zeitzyklische Messungen Mittelwert der Einzelmessungen	MEANw560
DEV	Standardabweichung der Einzelmessungen	DEVw560
	Probenbezug Den Wert einer ausgewählten Probe aus der Probentabelle in der Formel verwenden.	{Probe 1}w560

Funktionsargumente für Energiemessungen

Bei Zweistrahlgeräten werden die Energiespektren von beiden Strahlengängen aufgezeichnet. Beim SPECORD 50 wird eine interne Referenz mit einer zweiten Diode im Monochromator ermittelt. Sie müssen für Energiemessungen den Kanal M (Messkanal) oder R (Referenzkanal) vor dem Funktionsargument angeben, z. B. Messwert an der Wellenläge 560 nm im Messkanal: Mw560.

Formeln mit und ohne Bezug auf eine ausgewählte Probe

Formeln können Sie mit und ohne Bezug auf eine bestimmte Probe erstellen. Bei einer Formel ohne Probenbezug wird die Funktion auf alle Proben angewendet, z. B. berechne den Quotienten aus den Absorptionswerten an den Wellenlängen 260 und 280: w260/w280.

Bei einem Probenbezug wird das Funktionsargument einer ausgewählten Probe aus der Probensequenz erzeugt und in der Formel verwendet, z. B. subtrahiere den Messwert an der Wellenlänge 560 nm der ersten Probe "Sample 1" bei allen anderen Proben vom Messwert bei 560 nm: w560-{Sample 1}w560. Bei einem Probenbezug steht der Probenname in geschweiften Klammern vor dem Funktionsargument.

Den Probenbezug können Sie auch auf die Funktionen im Formeleditor anwenden, z. B. {Sample 1}INTEG[320~500] oder {Sample 1}conc.

Eingabe der Formel

Am einfachsten ist es, die Formel mit Klick auf die Buttons des Formeleditors zusammenzustellen. Alternativ können Sie die Formeln entsprechend der oben beschriebenen Syntax direkt in das Feld eintragen. Wenn Sie einen Probenbezug herstellen möchten, klicken Sie zunächst auf den Button der Probe und schließen daran gleich den gewünschten Wert (Argument) an.

Beispiel 1 (mit Probenbezug)

Subtrahiere den Absorptionswert der Probe 1 an der Wellenlänge 560 von den Absorptionen der weiteren Proben an der Wellenlänge 560 nm.

- Auf **w...** klicken, den Wert "560" eingeben und mit der ENTER-Taste bestätigen.
- Auf den Button **–** klicken.
- Auf den Button **Probe 1** klicken.
- Auf **w...** klicken, den Wert "560" eingeben und mit der ENTER-Taste bestätigen.
  - ✓ Im Editor wird die Formel "w560-{Probe 1}w560" angezeigt. Die Ergebnisse der Berechnung werden im Dokument auf dem Tab **Formel** ausgegeben.

Beispiel 2 (ohne Probenbezug)

Berechne als Maß für die DNA-Reinheit den Quotient aus den Absorptionswerten an den Wellenlängen 260 nm und 280 nm.

- Auf **w...** klicken, den Wert "260" eingeben und mit der ENTER-Taste bestätigen.
- Auf den Button **/** klicken.
- Auf **w...** klicken, den Wert "280" eingeben und mit der ENTER-Taste bestätigen.
  - ✓ Im Editor wird die Formel "w260/w280" angezeigt. Die Ergebnisse der Berechnung werden im Dokument auf dem Tab **Formel** ausgegeben.

4.6 Zubehöre verwenden

Angeschlossene Zubehöre werden automatisch beim Einschalten des SPECORD PLUS erkannt und in den Methodenparametern berücksichtigt. In diesem Kapitel finden Sie eine Übersicht über die zubehörspezifischen Methodenparameter und Programmfunktionen geordnet nach Zubehörtyp und Modul.

Beachten Sie auch die Hinweise zur Montage, Justierung und Funktion der Zubehöre in der Bedienungsanleitung "SPECORD PLUS Zubehöre UV/Vis-Spektralphotometer".

In der Methode sind die Zubehörparameter jeweils auf der Seite **Zubehör** angeordnet.

4.6.1 Passive Zubehöre

Passive Zubehöre sind Zubehöre, die nicht elektronisch angesteuert oder durch einen Identifikationsstecker automatisch erkannt werden:

- Standardküvettenhalter
- Halter für 100mm-Küvetten
- Halter für Rundküvetten
- Halter für Mikro-Kleinküvetten
- Justierbarer Halter für Mikro-Kleinküvetten
- Küvettenhalter temperierbar 10 mm und 50 mm
- Halter für Zylinderküvetten bis 50 mm und 100 mm
- Set Lichtleiterkopplung
- Halter für feste Proben

Methodenparameter

In allen Modulen stehen auf der Seite **Zubehör** folgende Methodenparameter zur Verfügung:

Option	Beschreibung
Auswahl passives Zubehör	Auswahl des oben aufgeführten Zubehörs Das Zubehör wird im Dokument angezeigt. Die Auswahl hat keinen weiteren Einfluss auf die Methodenparameter.

Option	Beschreibung
Messkanäle tauschen	Strahlengänge im Probenraum tauschen. Der Strahlengang für die Probenmessung (M) wird zum Referenzstrahlengang (R) und umgekehrt.

4.6.2 Kassetten-Sipper-System

Methodenparameter

In allen Modulen stehen folgende Methodenparameter zur Verfügung:

Option	Beschreibung
Pumpzeit [s]	Diese Zeit wird benötigt, um die Probe optimal in die Durchflussküvette zu transportieren.
Spülzeit [s]	In dieser Zeit wird die Küvette mit der Spüllösung gespült. **Hinweis:** Die Reihenfolge der Proben und Spüllösung wird in der Methodensequenz festgelegt.
Langsamlauf	Die Pumpgeschwindigkeit ist auf die Hälfte herabgesetzt. Dadurch kann das Entgasen oder Entmischen der Proben reduziert werden. Kleinere Probenvolumina können genauer dosiert werden.
Messkanäle tauschen	Strahlengänge im Probenraum tauschen. Der Strahlengang für die Probenmessung (M) wird zum Referenzstrahlengang (R) und umgekehrt.

Funktionen im Dokumentfenster

Bei Verwendung des Kassetten-Sipper-Systems werden in der Fuktionsleiste des Dokumentfensters folgende Icons zusätzlich angezeigt:

Icon	Beschreibung
Pumpe an / **Pumpe aus**	Pumpe ein- und ausschalten Diese Funktion kann genutzt werden um das System zusätzlich oder nach Ende der Messung zu befüllen, zu spülen oder zu leeren.

Funktionen im Hauptfenster

Die Ermittlung der optimalen Pumpzeit kann mit dem Menübefehl **Gerät** | **Zubehör** | **Pumpzeit optimieren** programmunterstützt erfolgen.

Sehen Sie dazu auch

Pumpzeit des Kassetten-Sipper-Systems optimieren [▶ 138]

4.6.3 Probengeber

Folgende Probengeber stehen für das SPECORD PLUS zur Verfügung:

- APG 49
- APG 64
- APG 116
- APG S

Methodenparameter

In allen Modulen stehen folgende Methodenparameter zur Verfügung:

Option	Beschreibung
Pumpzeit [s]	Diese Zeit wird benötigt, um die Probe optimal in die Durchflussküvette zu transportieren.
Spülzeit [s]	In dieser Zeit wird die Küvette mit der Spüllösung gespült. **Hinweis:** Die Reihenfolge der Proben und Spüllösung wird in der Methodensequenz festgelegt.

Option	Beschreibung
Manueller Start	Messung einer Probe erst durch weiteren Tastendruck starten Diese Option muss aktiviert werden, wenn Mehrfachmessungen probenweise ausgeführt werden.
Messkanäle tauschen	Strahlengänge im Probenraum tauschen. Der Strahlengang für die Probenmessung (M) wird zum Referenzstrahlengang (R) und umgekehrt.
Rührfunktion	Bei Probengebern mit Rührer die Rührfunktion aktivieren
Rührgeschwindigkeit [%]	Rührgeschwindigkeit einstellen Die maximale Rührgeschwindigkeit entspricht 100 %
Rührzeit [s]	In dieser Zeit wird die Probe gerührt, bevor sie angesaugt und in die Küvette transportiert wird.
Test Rührfunktion	Rührer ein- und ausschalten, um die optimale Rührgeschwindigkeit zu ermitteln
Langsamlauf	Die Pumpgeschwindigkeit ist auf die Hälfte herabgesetzt. Dadurch kann das Entgasen oder Entmischen der Proben reduziert werden. Kleinere Probenvolumina können genauer dosiert werden.

Funktionen im Dokumentfenster

Bei Verwendung eines Probengebers werden folgende Icons in der Funktionsleiste des Moduls zusätzlich angezeigt:

Icon	Beschreibung
Pumpe an / **Pumpe aus**	Pumpe ein- und ausschalten Diese Funktion kann genutzt werden um das System zusätzlich oder nach Ende der Messung zu befüllen, zu spülen oder zu leeren.
Kanüle absenken **Kanüle anheben**	Probengeberkanüle in das Probengefäß absenken bzw. hochfahren
Rührer ein **Rührer aus**	Magnetrührer ein- und ausschalten

Funktionen im Hauptfenster

Im Menüpunkt **Gerät** | **Zubehör** des Hauptfensters werden weitere Funktionen für die Justierung des Probengebers freigeschaltet.

Sehen Sie dazu auch

Probengeber APG justieren, einzelne Positionen anfahren und Pumpzeit optimieren [▷ 139]

4.6.4 Küvettenwechsler

Folgende Küvettenwechsler stehen im SPECORD PLUS zur Verfügung:

- Küvettenkarussel
- 6fach-Küvettenwechsler (auch peltiertemperiert)
- 8fach-Küvettenwechlser (auch peltiertemperiert)
- Gleichzeitige Verwendung von zwei 6fach- oder 8fach-Küvettenwechlsern im Mess- und Referenzkanal des SPECORD PLUS
- Kombination eines peltiertemperierten Küvettenwechslers mit dem peltiertemperierten Küvettenhalter

Methodenparameter

In allen Modulen stehen folgende Methodenparameter zur Verfügung:

Option	Beschreibung
Zyklisch für	Nur bei aktivierter zyklischer Messung Reihenfolge der Probenabarbeitung **Probe** Alle Messwiederholungen werden zunächst an einer Probe ausgeführt. Danach wird die nächste Probe im Küvettenwechsler angefahren und die Messungen dort ausgeführt. Auf diese Weise werden alle Proben nacheinander abgearbeitet. **Charge** Zunächst wird in jeder Probe im Küvettenwechsler die erste Messung ausgeführt, danach fährt der Küvettenwechsler zurück auf Position 1 und startet die nächste Messung in jeder Probe usw. bis zur letzten Messwiederholung. **Hinweis**: Wenn eine Sequenz mehr als eine Charge enthält, werden die Chargen nacheinander abgearbeitet.
Manueller Start	Jede Messung einer Probe im Küvettenwechsler muss durch Tastendruck gestartet werden.
Synchron	Nur bei Verwendung von zwei Küvettenwechslern Wenn aktiviert, bewegen sich beide Küvettenwechsler synchron. Zu jeder Probe kann damit eine eigene Referenz mitgeführt werden. Wenn deaktiviert, werden die Küvettenwechsler nacheinander durch die Strahlengänge bewegt (versetzter Betrieb). Auf diese Weise werden beide Küvettenwechsler zur Probenmessung verwendet. Erst werden die Proben im Referenzkanal und anschließend die Proben im Messkanal gemessen. Im versetzten Betrieb werden Mess- und Referenzkanal während der Messung getauscht. Um für diesen Vorgang die jeweiligen Strahlenverhältnisse zu bestimmen, **müssen der erste Platz des Küvettenwechslers im Messkanal und der letzte Platz des Küvettenwechslers im Referenzkanal leer bleiben**. Bei 2 8fach-Küvettenwechslern stehen Ihnen deshalb 14 Messplätze zur Verfügung und bei 2 6fach-Küvettenwechslern 10 Messplätze.

Referenzmessungen bei Kinetik- und Temperaturverläufen

Wenn bei einer chargenweisen Abarbeitung die Messung der Referenz innerhalb der Sequenz vereinbart ist, erfolgt diese nur einmalig bei Start der Sequenz. Alle Probenmessungen werden mit dieser Referenz korrigiert. Sie können zeit- oder temperaturabhängige Veränderungen in der Probenmatrix aufzeichnen oder korrigieren, indem Sie eine Leerwertmessung in der Sequenz vereinbaren.

Funktionen im Hauptmenü

Unter dem Menüpunkt **Gerät | Zubehör** des Hauptfensters sind für Küvettenwechsler folgende Funktionen verfügbar:

- Einzelne Probenpositionen gezielt anfahren
- Küvettenwechsler aus- und einschalten
  Beim Ausschalten wird der Küvettenwechsler in die Parkposition gefahren, um einen leichten Ein- und Ausbau zu ermöglichen und um ihn in der Aufbewahrungsbox zu verpacken.

- Küvettenwechsler justieren
- Zubehör erkennen

Sehen Sie dazu auch

- Küvettenwechsler justieren und einzelne Positionen anfahren [▶ 138]
- Peltiertemperiertes Zubehör [▶ 45]

4.6.5 Peltiertemperiertes Zubehör

Folgende peltiertemperierte Zubehöre stehen für das SPECORD PLUS zur Verfügung:

- Peltiertemperierbarer Küvettenhalter
- 6fach-Küvettenwechsler, peltiertemperiert
- Zwei 6fach-Küvettenwechsler, peltiertemperiert
- 8fach-Küvettenwechsler, peltiertemperiert
- Zwei 8fach-Küvettenwechsler, peltiertemperiert
- 8fach- bzw. 6fach-Küvettenwechsler, peltiertemperiert (im Messkanal) und Küvettenhalter, peltiertemperiert (im Referenzkanal)

Methodenparameter

Mit dem peltiertemperierten Zubehör sind folgende Modi des Temperaturbetriebs möglich:

- **Kein**
- **Konstant**
- **Variabel**

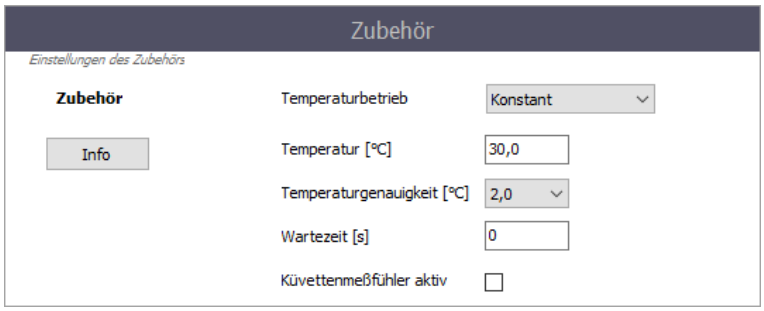
Temperaturmodus Kein

Der Temperaturbetrieb **Kein** ist in den Modulen **Photometrie**, **Spektrum**, **Kinetik** und **Farbmetrik** verfügbar. In diesem Betrieb wird die Temperatur des peltiertemperierten Zubehörs nicht über das Programm ASpect UV geregelt, sondern kann am Temperaturregelgerät direkt vorgegeben werden (siehe auch Bedienungsanleitung " SPECORD PLUS Zubehöre UV/Vis-Spektralphotometer").

Nach einem Klick auf den Button **Info** erscheinen Information über den einstellbaren Temperaturbereich und die aktuellen Temperaturen im Zubehör.

Temperaturmodus Konstant

Der Temperaturbetrieb **Konstant** ist in den Modulen **Photometrie**, **Spektrum**, **Kinetik** und **Farbmetrik** verfügbar. In diesem Temperaturmodus wird das peltiertemperierte Zubehör auf einer konstanten Temperatur gehalten. Die optische Messwertaufnahme (Messung von Transmission oder Absorption) erfolgt 5 s nach Erreichen der Temperatur im Bereich der vereinbarten Temperaturgenauigkeit zuzüglich einer eventuell gewählten Wartezeit.



Option	Beschreibung
Temperaturbetrieb	**Konstant** Eine konstante Temperatur einstellen
Temperatur [°C]	Solltemperatur eingeben
Temperaturgenauigkeit [°C]	Genauigkeit der Temperatursteuerung wählen

Option	Beschreibung
Wartezeit [s]	Wartezeit vom Erreichen der Solltemperatur bis zum Start der optischen Messung eingeben
Küvettenmessfühler aktiv	Beim Start der Messung nach erreichter Solltemperatur im Temperaturregelgerät wird die Küvettentemperatur registriert. Der Messwert (Absorbanz/%T) wird der Küvettentemperatur zugeordnet. Die Temperaturmessung ist damit genauer als die Probenblocktemperatur. Wenn die Option nicht aktiviert ist, wird die Blocktemperatur (Regeltemperatur) erfasst und als Abszissenwert im Modul **Thermometrie** angegeben.
Info	Information über den einstellbaren Temperaturbereich und die aktuellen Temperaturen im Zubehör anzeigen

Temperaturmodus Variabel

Der Temperaturmodus **Variabel** ermöglicht die Aufnahme von temperaturabhängigen Messkurven. Die optische Messwertaufnahme erfolgt jeweils 5 s nach Erreichen der Temperatur im Bereich der vereinbarten Temperaturgenauigkeit zuzüglich einer eventuell gewählten Wartezeit.

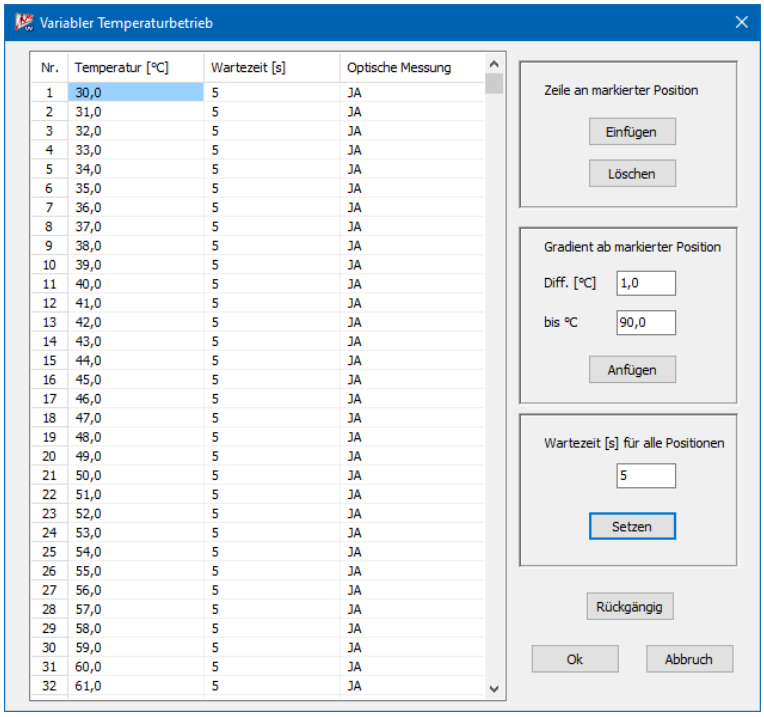
Der Temperaturmodus **Variabel** steht in den Modulen **Thermometrie**, **Spektrum** und **Farbmetrik** zur Verfügung. Im Modul **Thermometrie** erfolgt die Messung an einer Wellenlänge. Im Modul **Spektrum** wird an jeder vorgegebenen Temperaturstufe ein Spektrum aufgenommen. Durch die resultierende Spektrenschar kann ein Schnitt an einer Wellenlänge gelegt und die Schnittkurve im Modul **Thermometrie** ausgewertet werden.

Der Temperaturmodus **Variabel** kann nicht mit einer Kinetikmessung (**Messzeit [s]**) kombiniert werden. Bei Verwendung von peltiertemperierten Küvettenwechslern werden die Proben chargenweise abgearbeitet. Dabei wird die erste Temperatur im Küvettenwechsler eingestellt und in allen Proben der Messwert aufgenommen. Danach wird die nächste Temperatur eingestellt und erneut in allen Proben der Messwert ermittelt. Die Messungen werden fortgesetzt, bis alle abgearbeitet sind.

Option	Beschreibung
Temperaturbetrieb	**Variabel** Aufnahme einer Temperaturkurve an einer festen Wellenlänge (Modul **Thermometrie**) oder einer Spektrenschar (Modul **Spektrum** oder **Farbmetrik**)
Temperaturgenauigkeit [°C]	Genauigkeit der Temperatursteuerung wählen
Küvettenmessfühler aktiv	Beim Start der Messung nach erreichter Solltemperatur im Temperaturregelgerät wird die Küvettentemperatur registriert. Der Messwert (Absorbanz/%T) wird der Küvettentemperatur zugeordnet. Die Temperaturmessung ist damit genauer als die Probenblocktemperatur. Wenn die Option nicht aktiviert ist, wird die Blocktemperatur (Regeltemperatur) erfasst und als Abszissenwert im Modul **Thermometrie** angegeben.
Temp. nach Sequenz	Haltetemperatur nach der optischen Messung aktivieren Diese Temperatur wird nach der letzten optischen Messung angefahren und gehalten.
Temperaturwerte	Mit Klick auf **Einstellen...** das Fenster **Variabler Temperaturbetrieb** zur Eingabe der Temperaturwerte öffnen
Info	Information über den einstellbaren Temperaturbereich und die aktuellen Temperaturen im Zubehör anzeigen

Einstellungen im Fenster Variabler Temperaturbetrieb

Nach einem Klick auf **Einstellen...** in der Methodensequenz erscheint das Fenster **Variabler Temperaturbetrieb**. Die Parameter der Temperaturstufen können in den Tabellenzeilen einzeln editiert oder mit den Kontroll- und Eingabefeldern automatisch festgelegt werden.



Option/Button	Beschreibung
Einfügen	Neuen Temperaturschritt nach der markierten Tabellenzeile einfügen
Löschen	Markierte Tabellenzeile löschen
Gradient ab markierter Position	Temperaturgradienten ab einer markierten Tabellenzeile automatisch erstellen. Beginnend mit der Starttemperatur der markierten Tabellenzeile werden schrittweise weitere Temperaturstufen in die Tabelle eingefügt, bis die Endtemperatur erreicht ist. **Diff. [°C]** Temperaturdifferenz einer Temperaturstufe **bis °C** Endtemperatur des Gradienten **Anfügen** Temperaturgradienten an markierte Position anfügen
Wartezeit [s] für alle Positionen	Wartezeit vom Erreichen der Solltemperatur bis zum Start der optischen Messung Mit Klick auf **Setzen** wird die eingetragene Temperatur in alle Temperaturstufen der Tabelle übertragen. **Hinweis**: Unabhängig von der eingestellten Wartezeit erfolgt die optische Messung erst 5 s nach Erreichen der Temperatur im Bereich der vereinbarten Temperaturgenauigkeit im Block. Die Wartezeit wird zu diesem 5-s-Zeitraum addiert.
Rückgängig	Letzte Aktion rückgängig machen
Optische Messung	**Ja** Am Temperaturschritt eine optische Messung ausführen **Nein** Am Temperaturschritt erfolgt keine optische Messung.

Funktionen im Dokumentfenster

In der Funktionsleiste des Dokumentfensters wird folgendes Icon zusätzlich angezeigt.

Icon	Beschreibung
Setze Temperatur	Temperatur des Zubehörs auf den vorgegebenen Wert (Temperaturmodus **Konstant**) bzw. auf die Starttemperatur der Temperaturkurve (Temperaturmodus **Variabel**) setzen

4.6.6 Integrationskugel

Die Integrationskugel wird für die Messung streuender fester, flüssiger oder pulverförmiger Proben in Transmission, Absorption oder Reflexion verwendet.

Methodenparameter

In den Methodenparametern stehen folgende Messmodi zur Verfügung:

- **Transmission**
- **Absorption** (nicht im Modul **Farbmetrik**)
- **Reflexion**

4.6.7 Scaneinsatz für feste Proben

Der Scaneinsatz für feste Proben dient zur ortsauflösenden Bestimmung der Transmission oder der Absorption kleiner lichtdurchlässiger fester Proben.

Methodenparameter

In allen Modulen stehen folgende Methodenparameter zur Verfügung:

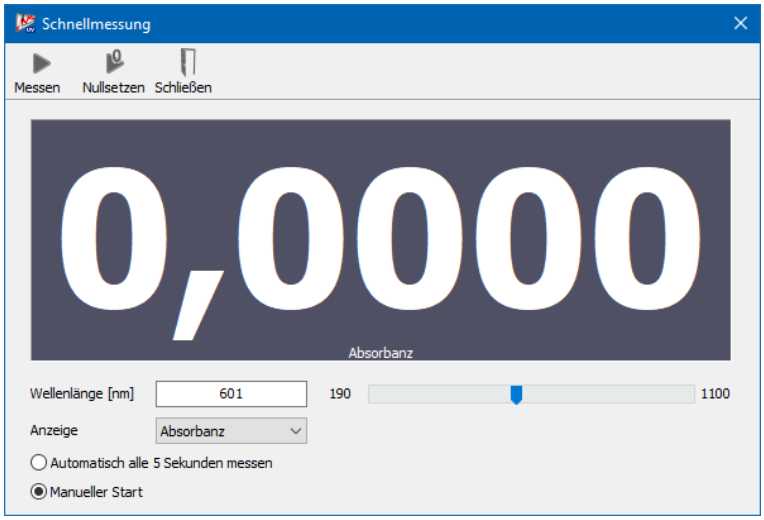
Option/Button	Beschreibung
Beginn	Anfangskoordinate einer Messung
Ende	Endkoordinate einer Messung
Schrittweite	Messpunktabstand auf der Probe
Setzen	Scaneinsatz zur Anfangs- oder Endkoordinate der Messung fahren
Nullte Ordnung	Das Monochromatorgitter auf die Nullte Ordnung einstellen. Das unzerlegte (weiße) Licht der Vis-Lampe geht durch den Probenraum und erleichtert aufgrund seiner guten Sichtbarkeit die Justierung der Probe im Scaneinsatz.

5 Modul Schnellmessung und Online-Messungen

Modul Schnellmessung

Das Modul **Schnellmessung** dient der Bestimmung eines einzelnen Messwertes. Die Daten werden nur auf dem Bildschirm angezeigt und können weder gespeichert noch ausgedruckt werden. Wahlweise kann der Messwert in einer einmaligen Messung oder automatisch fortlaufend ermittelt werden. Bei dieser Messung werden elektrisch angesteuerte Zubehöre nicht unterstützt. Der Küvettenwechsler kann nur als Küvettenhalter genutzt werden. Das Kassetten-Sipper-System oder der Probengeber können nicht verwendet werden.

Aufbau des Fensters Schnellmessung



Option/Icon	Beschreibung
Messen	Messung starten
Nullsetzen	Referenzwert ermitteln Der Referenzwert wird als Basiswert verwendet, d.h. auf nullgesetzt.
Schließen	Fenster **Schnellmessung** verlassen
Wertanzeige	Zeigt den gemessenen Wert an
Wellenlänge [nm]	Die Wellenlänge im Eingabefeld eingeben oder über den Schieberegler einstellen
Anzeige	Anzeige auswählen: **Absorbanz** oder **Transmission [%T]**
Automatisch alle 5 Sekunden messen	Messwert fortlaufend alle 5 Sekunden ermitteln
Manueller Start	Messwert nach Klick auf ▶ ermitteln

Manueller Start

In diesem Modus wählen Sie eine Wellenlänge und starten die Messung per Mausklick.

- Den Menüpunkt **Module | Schnellmessung** wählen.
- Die Wellenlänge im Eingabefeld editieren oder mit dem Schieberegler einstellen.
- Als Werteanzeige die Option **Transmission [%T]** oder **Absorbanz** wählen.
- Die Option **Manueller Start** aktivieren.
- Ggf. Referenzprobe in den Küvettenhalter einsetzen und auf klicken.
  - ✓ Die Referenzmessung erfolgt. In der Anzeige erscheint "0,000" bei Absorptionsmessungen und "100,0" in Transmission.
- Proben in den Küvettenhalter einsetzen und auf klicken.

✓ Die Ergebnisanzeige wird aktualisiert. Messwert ablesen.

- Für weitere Probenmessungen nächste Probe in den Küvettenhalter setzen und auf ▶ klicken.

Kontinuierliche Messung

In diesem Modus wird kontinuierlich ein Messwert im Zeitintervall von 5 s ermittelt.

- Den Menüpunkt **Module** | **Schnellmessung** wählen.
- Die Wellenlänge im Eingabefeld editieren oder mit dem Schieberegler einstellen.
- Als Werteanzeige die Option **Transmission [%T]** oder **Absorbanz** wählen.
- Die Option **Automatisch alle 5 Sekunden messen** aktivieren.
- Ggf. Referenzprobe in den Küvettenhalter einsetzen und auf klicken.

  ✓ Die Referenzmessung erfolgt. In der Anzeige erscheint der Referenzwert.
- Proben in den Küvettenhalter einsetzen. Warten, bis der neue Messwert angezeigt wird, und Messwert ablesen.
- Für die weitere Messung Proben einsetzen und jeweils warten, bis der Messwert aktualisiert wird.

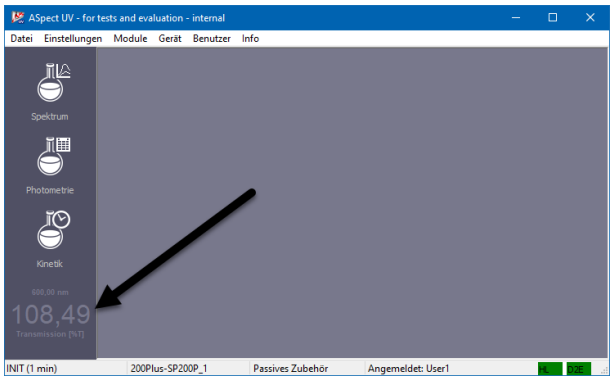
Online-Messung

Bei der Online-Messung werden permanent die Messwerte an der aktuell eingestellten Wellenlänge im Sekundentakt ermittelt und in der Startleiste des Hauptfensters ausgegeben. Die Online-Messwerte werden nach der ersten Messung eingeblendet. Die Online-Messung kann im Fenster **Optionen** | **Allgemein** | **Startleiste** aktiviert werden.

Die Online-Messung kann wie das Modul **Schnellmessung** für eine schnelle Probenwertbestimmung genutzt werden. Der Messwert wird nicht gespeichert und kann nicht gedruckt werden. Um die Online-Messung zu nutzen, müssen Sie in der Schnellmessung die Wellenlänge einstellen und den Referenzwert ermitteln (nullsetzen). Die angezeigte Messgröße richtet sich nach der im aktiven Dokument zuletzt gemessenen Messgröße.

- Das Fenster **Schnellmessung** aktivieren.
- Die Wellenlänge einstellen und auf klicken.
- Das Fenster **Schnellmessung** schließen.
- Proben in den Küvettenhalter einsetzen und die aktuellen Messwerte in der Startleiste ablesen.

  ✓ Die Messwerte werden fortlaufend aktualisiert.



Sehen Sie dazu auch

Startleiste konfigurieren [▶ 141]

6 Modul Photometrie

Das Modul **Photometrie** ermöglicht die Messung von Transmission oder Absorption an ausgewählten Wellenlängen. Die Messungen können Sie quantitativ in einer Kalibration oder Formel auswerten. Zusammen mit der Vorbereitung von Messmethoden und leicht editierbaren Probensequenzen erfüllt das Modul **Photometrie** die Anforderungen der Routineanalytik mit hohem Probendurchsatz.

Modul Photometrie öffnen

- Das Modul **Photometrie** mit einem Klick auf das Icon in der Startleiste öffnen.

- Alternativ den Menüpunkt **Module** | **Photometrie** wählen.
  - ✓ Auf der Arbeitsoberfläche wird ein neues Dokument geöffnet.
- Mit jedem weiteren Klick auf das Icon wird ein weiteres neues Dokument auf der Arbeitsoberfläche geöffnet.

Alle Funktionen der Dokumentfenster des Moduls **Photometrie** sind den Messungen an einzelnen Wellenlängen und der entsprechenden Auswertung zugeordnet. Sie können nun eine Methode erstellen und auf deren Grundlage eine Messung mit Auswertungen starten.

Sehen Sie dazu auch

Grundlegender Aufbau und Funktionen von ASpect UV [▸ 11]

6.1 Methodeneinstellungen im Modul Photometrie

Dieser Abschnitt enthält alle Einstellungen, die für eine Methode im Modul **Photometrie** getroffen werden können.

Tipp

Im Programm ASpect UV sind bereits Methoden für Enzymatik, Wasseranalytik und biochemische Analysen vorinstalliert.

Methode erstellen

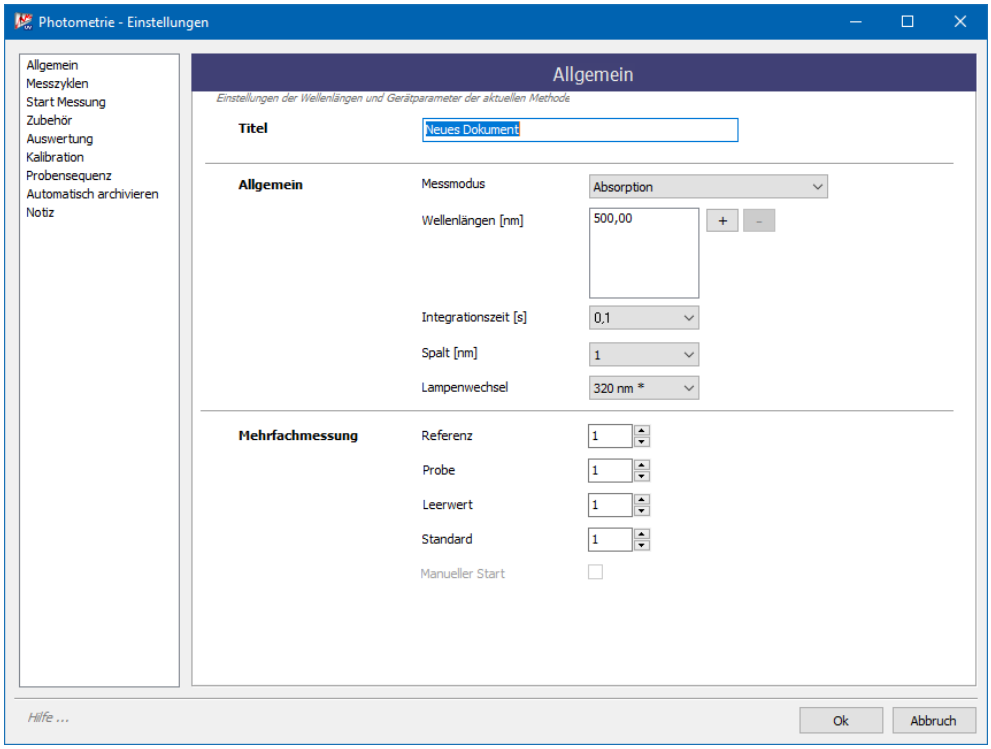
- Im Dokumentfenster mit einem Klick auf **Methode einstellen** das Methodenfenster öffnen.
- Die Einstellungen auf den Seiten des Methodenfensters vornehmen.
- Die Eingabe der Parameter mit Klick auf **Ok** abschließen.
  - ✓ Die Methodenparameter werden auf der linken Seite des Dokumentfensters auf dem Tab **Methode** ausgegeben. Die Icons für den Messstart erscheinen in der Werkzeugleiste des Dokumentfensters.

Sehen Sie dazu auch

Vorinstallierte Methoden [▸ 184]

6.1.1 Photometrie - Einstellungen | Allgemein

Auf der Seite **Allgemein** werden die grundlegenden Messeinstellungen vorgenommen.



Titel

Hier geben Sie den Titel des Dokuments ein, der im Reiter des Dokuments angezeigt wird. Den Titel können Sie später editieren.

Allgemein

In diesem Bereich wählen Sie die Parameter für die optische Messung.

Option	Beschreibung
Messmodus	Folgende Messmodi sind wählbar: ■ **Transmission** ■ **Absorption** ■ **Reflexion** (nur für Reflexionsmesseinsätze und Integrationskugel)
Wellenlängen [nm]	Wellenlängen für die Analyse auswählen: Auf + klicken, im Eingabefeld die gewünschte Wellenlänge eintragen und mit erneutem Klick auf + in die Liste übertragen. Um eine Wellenlänge aus der Liste zu entfernen, Wellenlänge in der Liste markieren und auf - klicken.
Integrationszeit [s]	Zeit für die Aufnahme eines Messpunkts auswählen
Spalt [nm]	Für SPECORD 210/250 PLUS Spektrale Spaltbreite (optische Auflösung) auswählen: 0,2; 0,5; 1; 2; 4 nm **Hinweis**: In älteren SPECORD 210/250 PLUS wurde der Spalt 0,2 nm noch nicht eingebaut. Für diese Geräte steht er nicht zur Auswahl.
Lampenwechsel	Wellenlänge des Wechsels von UV-Lampe auf Vis-Lampe auswählen Der voreingestellte Lampenwechsel bei 320 nm gewährleistet eine optimale Energieverteilung über den gesamten Wellenlängenbereich des Spektrometers. Wenn Sie nur im UV-Bereich oder Vis-Bereich arbeiten, können Sie auch mit den Optionen **nur UV** oder **nur Vis** mit der gewählten Lampe messen.

Mehrfachmessung

Sie können eine Messung mehrfach hintereinander ausführen und den Mittelwert für die weiteren Berechnungen und Analysen verwenden. Bei Messungen mit sehr wenig Energie, z. B bei Proben mit hoher Absorption, kann dieses Verfahren das Signal-Rausch-Verhältnis verbessern und die Messgenauigkeit erhöhen.

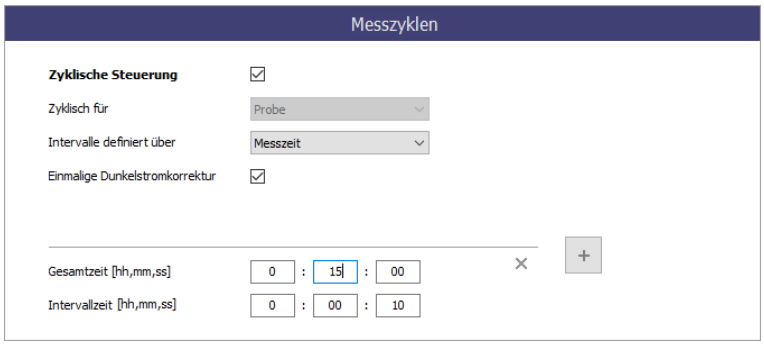
Option	Beschreibung
Mehrfachmessung	Bei Bedarf für die Probentypen **Referenz**, **Leerwert**, **Probe** und **Standard** die Anzahl der Messwiederholungen eingeben Wenn die Option **Manueller Start** aktiviert ist, erfolgt für jede Einzelmessung innerhalb einer Wiederholung die Aufforderung zum Start.

Sehen Sie dazu auch

Dokumententitel bearbeiten [▶ 24]

6.1.2 Photometrie - Einstellungen | Messzyklen

Auf der Seite **Messzyklen** vereinbaren Sie zeitgestaffelte Messwiederholungen (Kinetikmessungen) in einer Probe. Für jede Probe wird dabei in jedem Zyklus ein Messwert aufgenommen. Wenn Sie auf der Seite **Allgemein** die Messung an mehreren Wellenlängen definiert haben, werden die Messpunkte für jede Wellenlänge aufgenommen. Die Messdaten können Sie als CSV-Datei (Messwert/Zeit) exportieren.



Parameter für die Kinetikmessungen

Option	Beschreibung
Zyklische Steuerung	Mit Aktivierung die Eingaben für zyklische Messungen freischalten
Zyklisch für	Nur bei Verwendung von Küvettenwechslern oder APG **Probe** Die gesamte reaktionskinetische Messung wird an einer Probe ausgeführt und anschließend die Messung in der nächsten Probe gestartet. Auf diese Weise werden nacheinander alle Proben in der Sequenz abgearbeitet. Die Messung eignet sich für eine schnelle Reaktionskinetik. Wenn die Reaktion jeweils unmittelbar vor der Messung gestartet werden soll, muss auf der Seite **Start/Stopp Messung** die Option **Manueller Start** aktiviert werden. **Charge** In diesem Modus erfolgen die Probenmessungen gestaffelt. Innerhalb eines Intervalls werden alle Proben der Sequenz, beginnend mit der 1. Probe, gemessen. Anschließend beginnt das nächste Intervall erneut mit der Messung der 1. Probe. Auf diese Weise wird die Messung bis zum letzten Intervall fortgesetzt. Es wird jeweils eine Charge des Küvettenwechslers/APG gemessen. Sind alle Messungen für diese Charge (entweder proben- oder chargenweise) abgearbeitet, werden die Proben im Zubehör ausgetauscht und die Messung der nächsten Charge wird gestartet.

Option	Beschreibung
Intervalle definiert über	**Messpunkte** Für die Messung müssen die Anzahl der Messpunkte/Messwiederholungen und die Intervallzeit definiert werden. Die resultierende Gesamtmesszeit wird automatisch berechnet. **Messzeit** Für die Messung müssen die Intervallzeit und eine Gesamtmesszeit definiert werden. Die resultierende Anzahl der Messpunkte wird automatisch berechnet.
Einmalige Dunkelstromkorrektur	In der Voreinstellung ist diese Option aktiviert. Dabei wird vor der ersten Messung der Dunkelstrom ermittelt und die Messwerte damit korrigiert. Wenn die Option deaktiviert ist, erfolgt vor jeder Messung eine Dunkelstromkorrektur.
+	Zeitabschnitt einfügen Bei zeitgesteuerten zyklischen Messungen können mehrere Zeitabschnitte mit jeweils unterschiedlichen Intervallzeiten festgelegt werden.

Nähere Informationen zu den Einstellungen der Kinetikmessung finden Sie im Modul **Kinetik**.

Sehen Sie dazu auch

Kinetik - Einstellungen | Messzyklen [▶ 90]

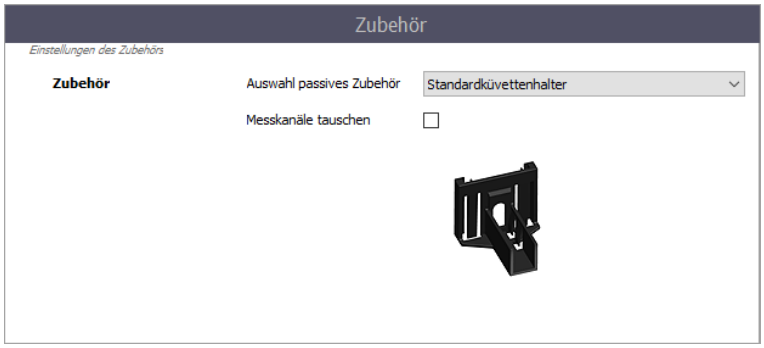
6.1.3 Photometrie - Einstellungen | Start Messung

Den Messstart einer Probe definieren Sie auf der Seite **Start Messung**. Folgende Startoptionen stehen zur Verfügung:

Option	Beschreibung
Autom. ohne Wartezeit	Die Messung beginnt sofort nach Klick auf oder .
Autom. mit Wartezeit	Nach Klick auf oder beginnt die Messung erst nach Ablauf der Wartezeit.
Manuell ohne Wartezeit	Nach Klick auf oder erscheint eine Rückfrage zum Start der Messung. Bei Beantwortung mit **Ja** beginnt die Messung sofort.
Manuell mit Wartezeit	Nach Klick auf oder erscheint eine Rückfrage zum Start der Messung. Bei Beantwortung mit **Ja** läuft zunächst die Wartezeit ab und danach startet die Messung.
Wartezeit	Zeitverzögerung für Startoptionen mit Wartezeit

6.1.4 Photometrie - Einstellungen | Zubehör

Die Parameter auf der Seite **Zubehör** hängen vom installierten Zubehör ab.



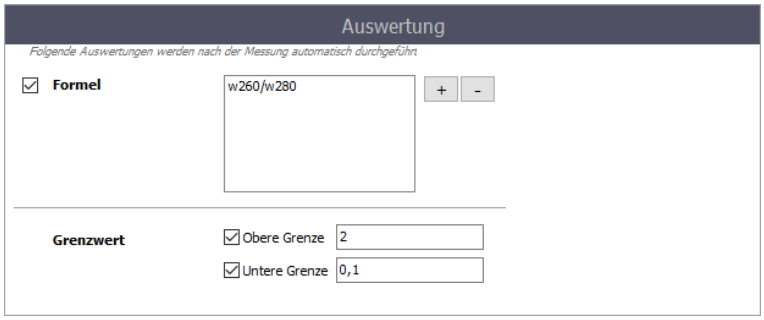
Sehen Sie dazu auch

Zubehöre verwenden [▶ 41]

6.1.5 Photometrie - Einstellungen | Auswertung

Auf der Seite **Auswertung** werden folgende Einstellungen vorgenommen:

- Eingabe von Formeln
- Eingabe eines Grenzwerts für die Messergebnisse



Formel

Sie können die Messwerte in einer Formel verknüpfen und bspw. eine Konzentrationsanalyse auf Grundlage der Multiplikation der Messwerte mit einem Faktor ausführen.

Grenzwert

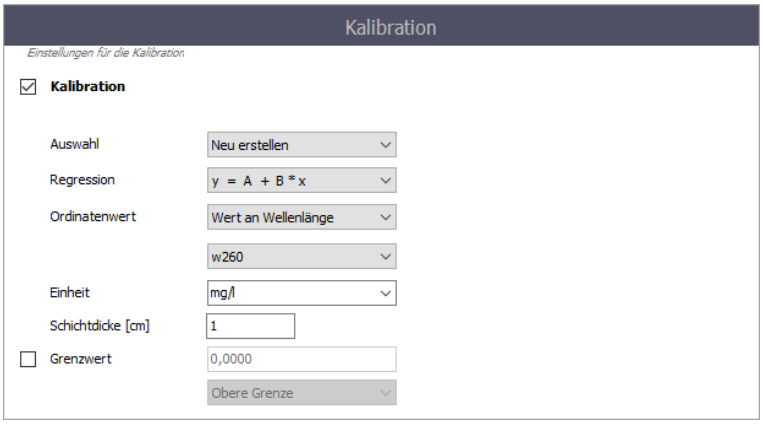
Sie können einen oberen und einen unteren Grenzwert aktivieren und eingeben. Die Messwerte die größer oder kleiner als der Grenzwert sind, werden in der Ergebnistabelle mit einem "!" gekennzeichnet.

Sehen Sie dazu auch

Formeln verwenden [▶ 37]

6.1.6 Photometrie - Einstellungen | Kalibration

Auf der Seite **Kalibration** können Sie Auswerteparameter für eine quantitative Analyse mit Kalibration definieren.



Für Konzentrationsbestimmungen über eine Kalibration mit Standards aktivieren Sie die Option **Kalibration** und nehmen folgende Einstellungen vor:

Option	Beschreibung
Auswahl	**Neu erstellen** Kalibration innerhalb der folgenden Messserie aufnehmen In der Probensequenz müssen Sie die Standardproben und deren Konzentration definieren. **Aus Datei laden** Kalibrierparameter aus einer vorhandenen Methode laden
Regression	Regressionstyp der Kalibrierfunktion $y = B * x$ $y = A + B * x$ $y = A + B * x + C * x^2$
Ordinatenwert	Ordinatenwert für die Kalibrierfunktion **Messwert an Wellenlänge** Einen Messwert an einer der Wellenlängen für die Kalibration im Listenfeld auswählen. Die Wellenlängen werden auf der Seite **Allgemein** festgelegt. **Formel** Das Ergebnis einer Formelberechnung für die weitere Kalibration verwenden. Mit einem Klick auf ... erscheint der Formeleditor. **Hinweis**: Die auf der Seite **Kalibration** verwendete Formel ist unabhängig von einer eventuell auf der Seite **Auswertung** eingegebenen Formel.
Einheit	Einheit des Analysenergebnisses
Schichtdicke	Schichtdicke der Küvette Dieser Wert dient nur zur Information und wird mit den Methodenparametern gespeichert.
Grenzwert	Einen oberen oder unteren Grenzwert für das Analysenergebnis festlegen Ergebnisse, die oberhalb bzw. unterhalb dieses Grenzwertes liegen, werden in der Ergebnistabelle mit "!" gekennzeichnet.

Sehen Sie dazu auch

Formeln verwenden [▸ 37]

6.1.7 Photometrie - Einstellungen | Probensequenz

Auf der Seite **Probensequenz** können Sie die Reihenfolge der Proben für eine folgende Messung bestimmen, die Sie mit dem Icon im Dokumentfenster starten können. Eine Probensequenz können Sie auch direkt vor einer Messung erstellen.

Anforderung an die Probensequenz

- Die Aktivierung der Kalibration erfordert eine Eingabe einer Sequenz mit Standardproben.
- Bei Verwendung von Küvettenwechslern und Probengebern werden die Proben den Probenplätzen im Zubehör zugeordnet.
- Wenn die Probensequenz leer ist, erscheint beim Messstart der Probensequenz zunächst das Fenster **Sequenz einstellen**. Das Fenster kann erst verlassen werden, wenn mindestens eine Probe definiert ist.

Sehen Sie dazu auch

Probensequenzen [▶ 30]

6.1.8 Photometrie - Einstellungen | Automatisch archivieren

Sie können die Messdaten und deren Auswertung automatisch speichern, exportieren und drucken. So können Sie Ihre Prozesse zur Archivierung der Daten vereinheitlichen und sicherstellen, dass Daten nicht verlorengehen. Auf der Seite **Automatisch archivieren** wählen Sie dazu die Zieldateien und Reportvorlagen. Zusätzlich müssen Sie im Fenster **Optionen** die automatische Archivierung programmweit aktivieren und den Zeitpunkt für die einzelnen Archivierungsfunktionen wählen.

Sehen Sie dazu auch

Messdaten automatisch archivieren [▶ 29]

6.1.9 Photometrie - Einstellungen | Notiz

Auf der Seite **Notiz** können Sie optional eine Notiz zur Methode eingeben.

6.2 Messungen im Modul Photometrie ausführen

Voraussetzung für einen Messstart ist, dass im Dokumentfenster eine Methode neu erstellt oder geladen wurde. Die Messung kann mit einer in der Methode hinterlegten Probensequenz oder als Einzelmessung gestartet werden.

Für die Messungen werden folgende Icons eingeblendet:

Icon	Beschreibung
Probe messen	Einzelne Probenmessung unabhängig von der eingestellten Probensequenz starten
Sequenz messen	Probensequenz starten Wenn Sie in den Messparametern keine Probensequenz hinterlegt haben, erscheint nach Klick auf dieses Icon das Fenster **Sequenz einstellen**. Das Fenster können Sie erst verlassen, wenn Sie mindestens eine Probe definiert haben.
Referenz	Referenz messen

Icon	Beschreibung
	Eine separate Referenzmessung ist nötig, wenn die Probensequenz nicht mit einer Referenzmessung beginnt oder keine Referenz, passend zu den aktuellen Methodenparametern, verfügbar ist.
Stopp	Laufende Messung stoppen und nicht fortsetzen
Sequenz unterbrechen	Messung unterbrechen und zu einem späteren Zeitpunkt fortsetzen Die laufende Probenmessung wird fertig abgearbeitet. Die noch ausstehende Probensequenz wird anschließend angezeigt und kann editiert werden.
	Für Kassetten-Sipper-System und Probengeber APG verfügbar: Pumpe ein- bzw. ausschalten und Probe transportieren bzw. Transport stoppen
	Für Probengeber APG verfügbar: Probenkanüle absenken bzw. hochfahren
	Für Probengeber APG mit Rührfunktion verfügbar: Rührer ein- bzw. ausschalten
	Temperatur in einem peltiertemperierten Zubehör einstellen

Referenz messen

Wenn keine Referenz an erster Stelle in der Probensequenz steht, muss die Referenz separat aufgenommen werden.

- Referenz im Probenraum platzieren.
- Auf **Referenz** klicken und Abfrage zur Referenzmessung bestätigen.
  - ✓ Die Referenzmessung wird ausgeführt. Alle folgenden Messungen werden mit dieser Referenz korrigiert, bis die Messparameter durch eine neue Methodeneinstellung geändert werden oder die nächste Referenzmessung erfolgt.

Erste Sequenz starten

Mit Start der Probensequenz werden die Proben in der Reihenfolge entsprechend der Probentabelle abgearbeitet.

- Die erste Probe der Sequenz im Probenraum platzieren bzw. Küvettenwechsler/APG mit Proben bestücken.
- Auf **Sequenz messen** klicken.
- Den weiteren Bildschirmaufforderungen zum Einsetzen der Proben und Start von Probenmessungen folgen.
  - ✓ Die Probensequenz wird abgearbeitet. Die Messwerte und Auswertungen werden im Dokumentfenster angezeigt.

Sequenz unterbrechen oder stoppen

Eine laufende Messung können Sie unterbrechen und fortführen oder endgültig stoppen.

- Auf **Stopp** klicken, um die Messung zu stoppen.
  - ✓ Die Messung der Sequenz wird gestoppt und kann nicht fortgesetzt werden. Bis zu diesem Zeitpunkt aufgenommene Messdaten bleiben erhalten und können weiter bearbeitet werden.
- Auf **Sequenz unterbrechen** klicken, um eine Messung zu unterbrechen und später fortzusetzen.
  - ✓ Die aktuelle Probenmessung wird beendet und danach die Abarbeitung unterbrochen. Die Messpause können Sie nutzen, um die laufende Probensequenz anzusehen und zu editieren.

Nächste Sequenz starten

Nach Abarbeitung der ersten Probensequenz können Sie die Sequenz weitere Male starten oder nacheditieren. Dies ist auch möglich, wenn das Dokument bereits gespeichert und zur Anzeige der Ergebnisse erneut geöffnet wurde.

- Auf klicken.
  Das Fenster **Sequenz einstellen** mit der in der Methode hinterlegten Sequenz erscheint.
- Bei Bedarf eine neue Sequenz zusammenstellen.
- Die Einstellungen im Fenster **Sequenz einstellen** mit Klick auf **Ok** bestätigen.
- Den weiteren Bildschirmaufforderungen zum Einsetzen der Proben und Start von Probenmessungen folgen.
  - ✓ Die aktuelle Sequenz wird abgearbeitet und die Daten an die vorhandene Messwerttabelle und Auswertungen angehängt.

Einzelmessungen ausführen

Sie können unabhängig von der eingestellten Sequenz einzelne Proben des Probentyps **Probe** messen und an die Messwerttabelle und Auswertungen anhängen.

- Probe im Probenraum platzieren.
- Auf **Probe messen** klicken.
- Den weiteren Bildschirmaufforderungen zum Messstart folgen.
  - ✓ Die Messung erfolgt und die Daten werden an vorhandene Messwerte und Auswertungen angehängt.

Tipp

Wenn Messungen anderer Probentypen angehängt werden sollen, klicken Sie auf **Sequenz messen** und geben Sie eine Sequenz mit den entsprechenden Proben ein.

Proben nachmessen

Sie können Ausreißer einer Messung nachmessen und damit stark abweichende Werte einer Messserie durch neue Werte ersetzen. Eine Nachmessung von Proben wird stets im Audit Trail protokolliert. Für das Nachmessen einer Probe müssen Sie auf das Arbeitsblatt **Messung** wechseln.

- Die Probe im Probenraum platzieren.
- Auf die Zeile der nachzumessenden Probe mit der rechten Maustaste klicken. Bei Mehrfachmessungen können Sie einen einzelnen Wert durch Klicken mit der rechten Maustaste auswählen.
- Im Kontextmenü den Menüpunkt **Probe nachmessen** wählen.
- Weiteren Bildschirmaufforderungen zum Messstart folgen.
  - ✓ Die Messung wird ausgeführt und der Messwert in der Probentabelle ersetzt. Die vorhandenen Auswertungen werden aktualisiert.

HINWEIS

Wenn im Dokument bereits weitere Arbeitsblätter neben dem Arbeitsblatt **Messung** angelegt sind, werden diese bei einer Nachmessung nicht aktualisiert.
Bei Verwendung von Küvettenwechsler oder APG muss die nachzumessende Probe auf die gleiche Position im Zubehör gesetzt werden. Die Position im Zubehör kann in der Probentabelle auf dem Arbeitsblatt angezeigt werden.
Zeitzyklische Messungen können nicht nachgemessen werden.

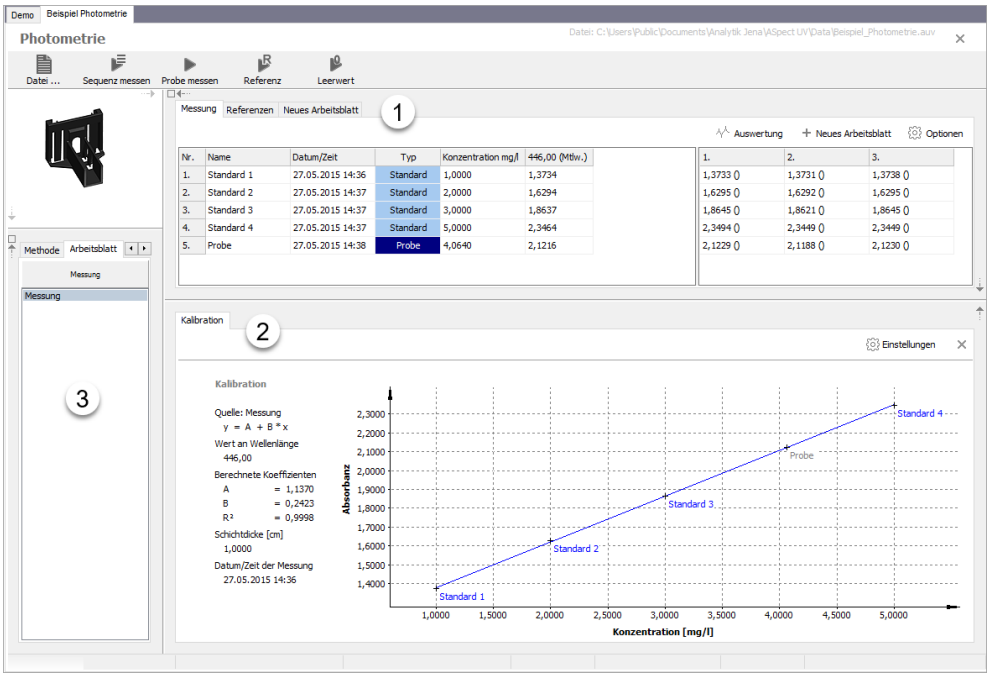
Sehen Sie dazu auch

Probensequenzen erstellen und editieren [▸ 33]

6.3 Ergebnisse im Modul Photometrie anzeigen, auswerten und bearbeiten

In diesem Abschnitt werden die Besonderheiten der Ergebnisanzeige und Auswertung im Modul **Photometrie** erläutert.

Dokumentfenster Photometrie mit Messwerten und quantitativer Auswertung



Nr.	Beschreibung
1	Arbeitsblätter mit Messdaten, Referenzdaten und weiteren Auswertungen
2	Tabs mit Auswertungen zum aktiven Arbeitsblatt
3	Tabs mit Informationen zu Methodeneinstellungen und mathematischen Auswertungen auf den Arbeitsblättern

Arbeitsblatt Messung

Auf dem Arbeitsblatt **Messung** ist die Probentabelle mit den Messdaten im oberen Teil angeordnet. Der untere Teil des Arbeitsblatts enthält die Datenauswertungen, die schon in der Methode festgelegt wurden, jeweils auf separaten Tabellenblättern. Diese Auswertungen können Sie ergänzen und editieren.

Probentabelle

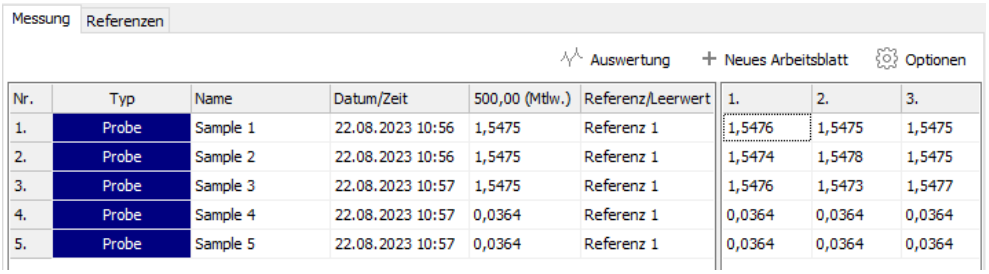
Die Anzeige der Probentabelle kann frei konfiguriert werden. Nach einem Rechtsklick auf den Kopf der Tabelle können im Kontextmenü folgende Parameter gewählt werden:

- Nummer in der Sequenzreihenfolge
- Position im Zubehör bei Verwendung von Küvettenwechsler oder Probengeber
- Charge bei Verwendung von Küvettenwechsler oder Probengeber
- Probenbezeichnung
- Probentyp
- Datum und Zeitpunkt der Messung
- Messwert bzw. Mittelwert bei Mehrfachmessungen
- Standardabweichung bei Mehrfachmessungen
- Referenz oder Leerwert, mit dem die Probe korrigiert wurde
- Temperatur bei Methoden mit peltiertemperierten Zubehör
- Notiz
- Probenkonzentration bei Konzentrationsbestimmungen mit Kalibration
- Verdünnung und Einwaage
  Diese Eingaben werden nur bei Konzentrationsbestimmungen mit Kalibration berücksichtigt.
- Probenspezifische Variablen A – H für die Berechnungen in Formeln

Per Drag&Drop kann die Reihenfolge der Spalten in der Tabelle verändert werden.

Probentabelle von Mehrfachmessungen

Bei Mehrfachmessungen wird in der Probentabelle der Mittelwert angezeigt und für weitere Auswertungen verwendet. Die Einzelmessungen sind daneben in einer separaten Tabelle aufgeführt.



Nr.	Typ	Name	Datum/Zeit	500,00 (Mtlw.)	Referenz/Leerwert	1.	2.	3.
1.	Probe	Sample 1	22.08.2023 10:56	1,5475	Referenz 1	1,5476	1,5475	1,5475
2.	Probe	Sample 2	22.08.2023 10:56	1,5475	Referenz 1	1,5474	1,5478	1,5475
3.	Probe	Sample 3	22.08.2023 10:57	1,5475	Referenz 1	1,5476	1,5473	1,5477
4.	Probe	Sample 4	22.08.2023 10:57	0,0364	Referenz 1	0,0364	0,0364	0,0364
5.	Probe	Sample 5	22.08.2023 10:57	0,0364	Referenz 1	0,0364	0,0364	0,0364

Arbeitsblatt Referenz

Auf dem Arbeitsblatt **Referenz** werden die Referenzwerte aufgelistet.

Neues Arbeitsblatt

Sie können im Dokumentfenster weitere Arbeitsblätter erzeugen und auf ihnen weitere Auswertungen vornehmen. Auf diese Weise können Sie in einem Dokument (Datei) verschiedene Auswertungen nebeneinander anlegen. Das Arbeitsblatt **Neues Arbeitsblatt** wird nach einem Klick auf den Menüpunkt + **Neues Arbeitsblatt** auf dem Arbeitsblatt **Messung** angelegt. Die unbearbeiteten, originalen Messdaten werden zunächst in das neue Arbeitsblatt kopiert und können dann bearbeitet werden.

6.3.1 Probentabelle im Modul Photometrie editieren

Probentabelle editieren

Sie können folgende Werte der Probentabelle nachträglich editieren:

- Probenbezeichnung
- Notiz
- Verdünnung und Einwaage
  Diese Eingaben werden nur bei Konzentrationsbestimmungen mit Kalibration berücksichtigt.
- Probenspezifische Variablen A – H für die Berechnungen in Formeln

▶ Auf die Tabellenzelle klicken und den Wert editieren.

✓ Die Änderungen werden im Audit Trail protokolliert. Vorhandene Auswertungen werden neu berechnet und aktualisiert.

Referenz neu zuweisen

Standardmäßig werden Proben immer mit vorangegangen Referenzen oder Leerwerten korrigiert. Wenn Sie mehrere Referenzen/Leerwerte in der Probentabelle haben, können Sie Proben auch eine der anderen Referenzen/Leerwerte zuweisen und auf diese Weise die Proben neu korrigieren.

▶ In der Zeile der Probe einen Rechtsklick in der Spalte **Referenz/Leerwert** ausführen und im Kontextmenü die neue Referenz wählen.

✓ Die Referenz wird auf die Probe angewendet. In der Zelle **Referenz/Leerwert** steht der Name der Referenz.

Proben markieren

Sie können Proben in der Probentabelle markieren und damit fett hervorheben.

▶ In der Probentabelle einen Rechtsklick auf eine Probe ausführen.

▶ Im Kontextmenü den Punkt **Mehrere Proben markieren** wählen.

▶ Im Auswahlfenster die Kontrollkästchen der Proben aktivieren.

✓ Die gewählten Proben werden in der Probentabelle mit fetter Schrift markiert und in der Anzeige der Kalibrierkurve dicker hervorgehoben.

Hinweis: Alternativ können auch einzelne Proben direkt markiert bzw. deren Markierung entfernt werden. Dafür im Kontextmenü den Punkt **Markieren** bzw. **Markierung entfernen** wählen.

Proben ausblenden

Sie können Proben in der Probentabelle ausblenden. Die ausgeblendete Probe wird bei der Analyse nicht berücksichtigt, jedoch nicht aus dem Datensatz gelöscht. Eine ausgeblendete Probe können Sie wieder einblenden.

- In der Probentabelle einen Rechtsklick auf eine Probe ausführen.
- Im Kontextmenü den Punkt **Mehrere Proben Ein-/Ausblenden** wählen.
- Im Auswahlfenster nur die Kontrollkästchen aktivieren, deren Proben angezeigt und analysiert werden sollen.
  - ✓ Die Analysenergebnisse werden neu berechnet. Die ausgeblendeten Proben werden in der Probentabelle mit hellgrauer Schrift markiert.

Hinweis: Alternativ kann auch eine einzelne Probe aus- oder eingeblendet werden. Dafür im Kontextmenü den Punkt **Ausblenden** bzw. **Einblenden** wählen.

6.3.2 Photometriedaten auswerten

Die in der Methode angebotenen Datenauswertungen können Sie auch nachträglich vornehmen. Die Funktionen sind im Menü **Auswertung** zusammengefasst, das auf jedem Arbeitsblatt zur Verfügung steht. Die Auswertungen beziehen sich immer auf die Messwerte des jeweiligen Arbeitsblatts. Wenn die Messwerte mit mathematischen Funktionen bearbeitet werden, wird die Auswertung auf diesem Arbeitsblatt entsprechend angepasst.

Die Auswertungen werden im unteren Teil des Arbeitsblatts auf einem eigenen Tabellenblatt ausgegeben.

Folgende Funktionen stehen im Modul **Photometrie** in der Methode für die Auswertung zur Verfügung und können nachträglich angewendet oder editiert werden:

- **Formel**
- **Kalibration**
- **Grenzwert**

Auswertung editieren

Bei vorhandenen Auswertungen können Sie die Auswerteparameter editieren.

- Auf dem Tabellenblatt der Auswertung auf **Einstellungen** klicken und im Dialogfenster die Auswerteparameter ändern.
  - ✓ Die Auswertung wird aktualisiert.

Auswertung löschen

Nichtbenötigte Auswertungen können Sie löschen.

- Auf dem Tabellenblatt der Auswertungen rechts oben auf ✕ klicken.
  - ✓ Die Auswertung wird vom Arbeitsblatt entfernt.

Formel

Mit der Funktion **Formel** können Sie Messwerte einer oder mehrerer Proben in einer Formel verknüpfen.

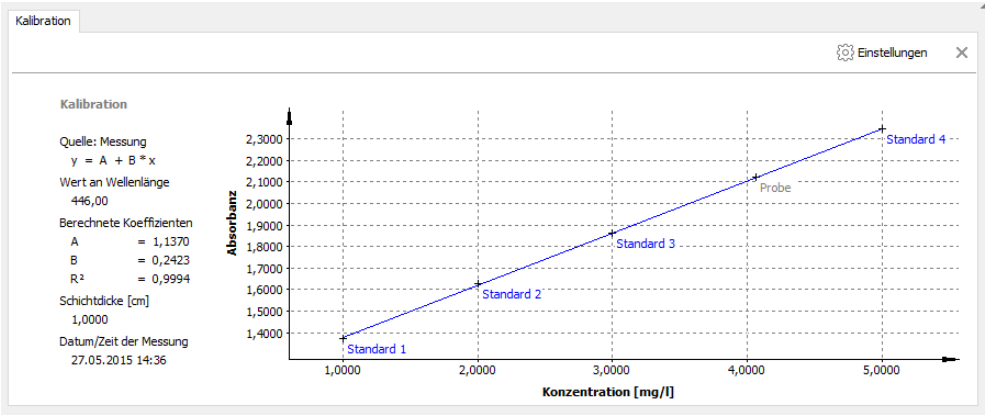
- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Formel** wählen.
- Auf + klicken und die Formel mit dem Formeleditor erstellen.
- Bei Bedarf auf die gleiche Weise weitere Formeln hinzufügen.
  - ✓ Die Ergebnisse werden auf dem Tab **Formel** angezeigt.

Kalibration

Die Funktion **Kalibration** ist verfügbar, wenn ein Dokument keine eigene Kalibration mit Standards enthält. Mit dieser Funktion können Sie nachträglich die Kalibrierdaten aus anderen Dateien laden und damit eine quantitative Analyse der Messwerte ausführen. Dabei werden nur die Kalibrierparameter und nicht die Standards geladen.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Kalibration** wählen.
- Die Option **Kalibration** aktivieren.

- Auf **Öffnen** klicken und Dokument mit der Kalibrierkurve auswählen.
  - ✓ Das Tabellenblatt **Kalibration** mit der aktuellen Kalibrierkurve und den berechneten Kalibrierparametern wird angezeigt. Die Ergebnisse der Konzentrationsanalyse mit Kalibration werden direkt in die Probentabelle eingetragen. Konzentrationen, die außerhalb des kalibrierten Bereichs liegen, werden in Klammern gesetzt.



Das Tabellenblatt **Kalibration** enthält folgende Informationen:

- Quelle der Kalibrierkurve (in diesem Dokument gemessen oder aus einer Datei geladen)
- Regressionsmodell
- Analysenwellenlänge bzw. verwendete Formel der Kalibration
- Regressionskoeffizienten A, B und C, soweit im Regressionsmodell berechnet
- Bestimmtheitsmaß R^2
- Schichtdicke der Küvette (nur informativ, wird nicht in der Berechnung berücksichtigt)
- Datum und Zeitpunkt der Messung

Grenzwert

Mit der Funktion **Grenzwert** können Sie Messwerte identifizieren, die ober- oder unterhalb eines festgelegten Werts liegen.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Grenzwert** wählen.
- Im Eingabefeld **Grenzwert** den Wert eingeben.
- In der Liste die Option **Obere Grenze** oder **Untere Grenze** wählen.
  - ✓ Auf dem Tabellenblatt **Grenzwert** werden die Proben aufgelistet, die unter- oder oberhalb des vorgegebenen Werts liegen. Zusätzlich werden die Werte in der Probentabelle fett und mit einem "!" gekennzeichnet.

Sehen Sie dazu auch

Formeln verwenden [▶ 37]

6.3.3 Photometriedaten mathematisch bearbeiten

Sie können mathematische Funktionen, z. B die Addition einer Konstanten, auf die Messdaten anwenden. Die Messdaten und vorhandene Auswertungen auf einem Arbeitsblatt werden daraufhin neu berechnet und aktualisiert. Die mathematischen Operationen können Sie aufeinanderfolgend im gleichen Arbeitsblatt anwenden.

HINWEIS

Sollten die Messdaten auf dem Arbeitsblatt **Messung** verändert werden, z. B. durch Nachmessen oder Deaktivieren einer Probe, werden die Daten auf dem weiteren Arbeitsblättern nicht aktualisiert.

Folgende Funktionen stehen Ihnen im Menü **Auswertung** zur Verfügung:

- Addition eines Offsets
- Multiplikation mit einem Faktor
- Werte in Transmission [%T] bzw. Absorption konvertieren

Datenbearbeitung rückgängig machen

Das Protokoll über die ausgeführten Operationen finden Sie auf der linken Seite des Dokuments auf dem Tab **Arbeitsblatt**. Die Operationen sind dort der Reihe nach aufgelistet. Mit einem Klick auf die entsprechende Operation wird der Bearbeitungsschritt angezeigt. Auf diesem Tab können Sie Operationen rückgängig machen.

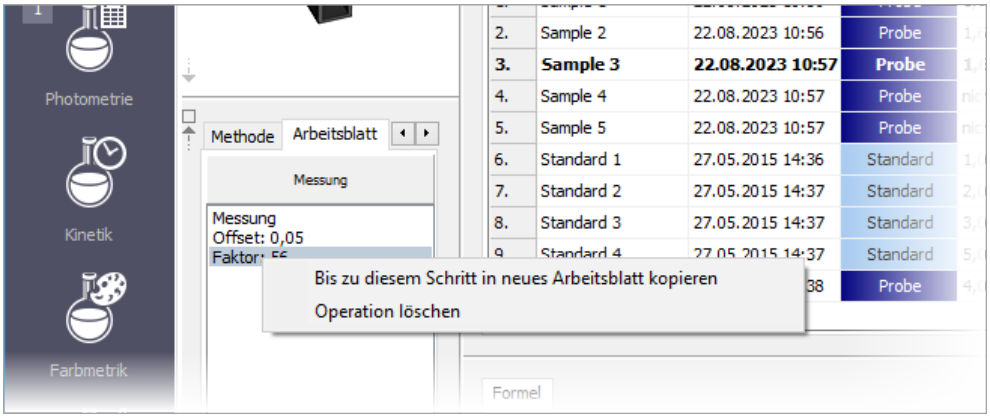
▶ Mit rechter Maustaste auf die letzte Operation klicken, die rückgängig zu machen ist.

▶ Im Kontextmenü eine der beiden Optionen auswählen:

– **Bis zu diesem Schritt in neues Arbeitsblatt kopieren**
Ein neues Arbeitsblatt wird geöffnet und die Daten mit der Änderungshistorie bis zur gewählten Operation dorthin kopiert. Im vorherigen Arbeitsblatt bleiben alle Operationen erhalten.

– **Operation löschen**
Alle Schritte inklusive der gewählten Operation werden im aktuellen Arbeitsblatt gelöscht.

✓ Die Operationen werden entsprechend der gewählten Option in ein neues Arbeitsblatt kopiert oder rückgängig gemacht.



Offset

Mit dieser Funktion wird eine Konstante zu den Messwerten addiert. Der Wert der Konstanten kann sowohl positiv als auch negativ sein. Auf diese Weise lassen sich Störgrößen simulieren oder kompensieren.

▶ Auf einem neuen Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Offset** wählen.

▶ Im Feld **Offset** den Wert eingeben.

✓ Die Messwerte und Auswertungen werden neu berechnet und die Anzeigen aktualisiert.

Faktor

Mit dieser Funktion werden die Messwerte mit einer Konstanten multipliziert. Die Multiplikation eines Absorptionswerts mit einer Konstanten entspricht theoretisch einer Veränderung der Schichtdicke oder der Konzentration der Probe.

▶ Auf einem neuen Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Faktor** wählen.

▶ Im Feld **Faktor** den Wert eingeben.

✓ Die Messwerte und Auswertungen werden neu berechnet und die Anzeigen aktualisiert.

Konvertieren in Transmission[%T] / Konvertieren in Absorbanz

Diese Funktionen ermöglich die Umwandlung der Messwerte von Absorbanz in Transmission [%T] und umgekehrt.

- Auf einem neuen Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Konvertieren in Transmission[%T]** oder **Konvertieren in Absorbanz** wählen.

  ✓ Die Messwerte werden konvertiert und die Anzeigen aktualisiert.

6.4 Beispielmessung im Modul Photometrie

Im Beispiel wird die Konzentration in 3 Proben mit der Formel "c = A(446 nm) * 24,3" bestimmt. Für die Messung wird der Standardküvettenhalter verwendet. Als Proben können die Graufilter des Hellma Standardfiltersatzes verwendet werden.

Folgende Schritte müssen ausgeführt werden:

1. Dokument im Modul anlegen.
2. Methode öffnen und Parameter eingeben.
3. Messung starten.

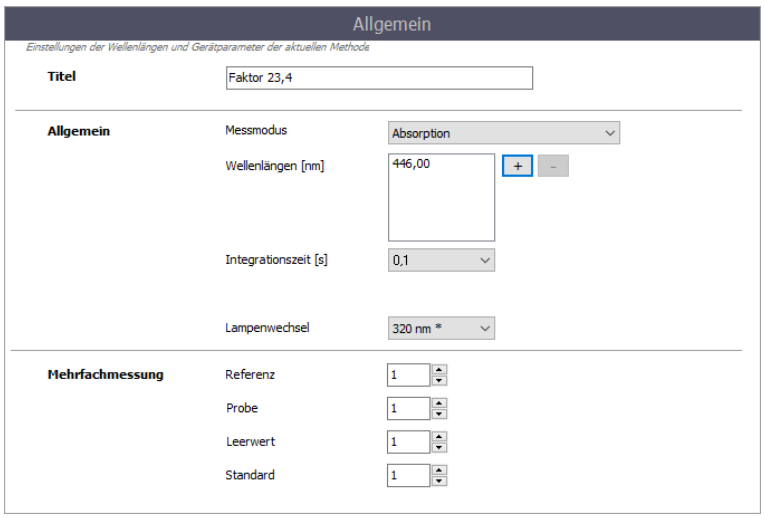
Dokument anlegen

- Den Menüpunkt **Module** | **Photometrie** wählen oder auf das Icon in der Startleiste klicken.

Methodenparameter festlegen

- Im Dokumentfenster auf **Methode einstellen** klicken.
- Auf den Seiten des Methodenfensters **Photometrie - Einstellungen** die Parameter entsprechend den Screenshots eingeben (siehe unten).
- Parameter im Methodenfenster mit einem Klick auf **Ok** bestätigen und in das Dokumentfenster zurückkehren.

Seite Allgemein



Wellenlänge 446 nm eingeben:

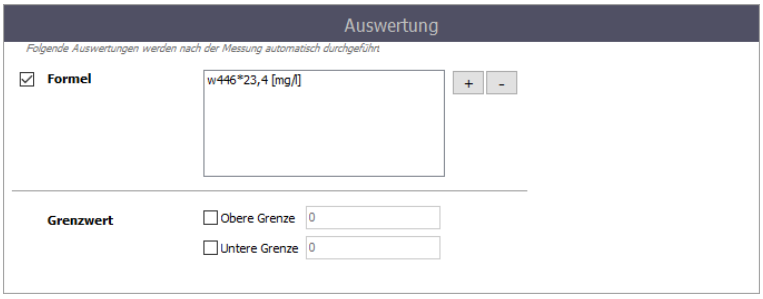
- Doppelklick auf den voreingestellten Wert "500" ausführen.
- Im Eingabefeld den Wert "446" eintragen und mit Klick auf + in die Liste übertragen.

Hinweis: Die Spalteinstellung gibt es nur für die SPECORD 210/250 Plus.

Seiten Messzyklen, Start Messung, Zubehör

Keine Einträge vornehmen.

Seite Auswertung



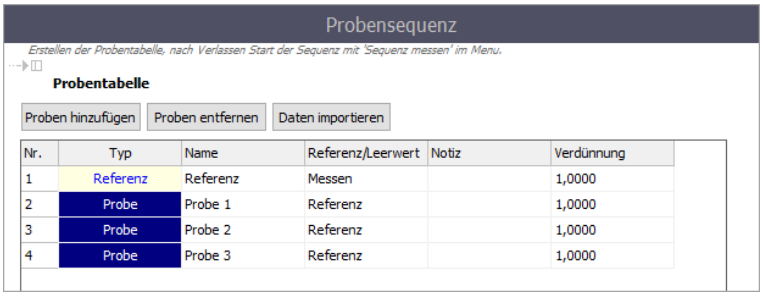
Formel "w446 * 24,3" eingeben:

- Auf + klicken. Der Formeleditor erscheint.
- Auf **w446** klicken.
- Auf "*"klicken, an das Ende der Formel im Editorfeld klicken und anschließend Wert "24,3" eingeben.
- Im Feld Einheit der Ergebnisse "mg/l" eingeben. Mit Klick auf **Ok** die Einträge bestätigen.

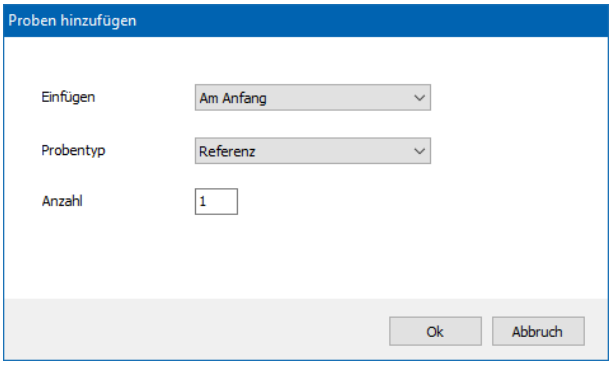
Seite **Kalibration**

Keine Einträge vornehmen.

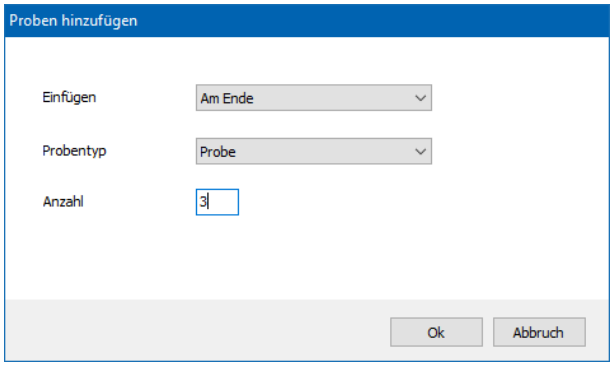
Seite Probensequenz



- Auf **Proben hinzufügen** klicken und eine Referenz an den Anfang der Probentabelle setzen:



- Noch einmal auf **Proben hinzufügen** klicken und 3 Proben an das Ende der Probentabelle anfügen:



- In der ersten Zeile der Probentabelle im Feld **Name** "Referenz" eingeben und mit der Enter-Taste bestätigen.
- In der zweiten Zeile als Namen "Probe 1" eingeben und mit der Enter-Taste bestätigen.
- Mit gedrückter Maustaste die drei aufeinanderfolgenden Namensfelder der Proben, inklusive des "Probe 1"-Feldes, markieren.
- Mit rechter Maustaste auf die Markierung klicken und im Kontextmenü den Befehl **Unten aufsteigend ausfüllen** wählen.

Seite Automatisch archivieren

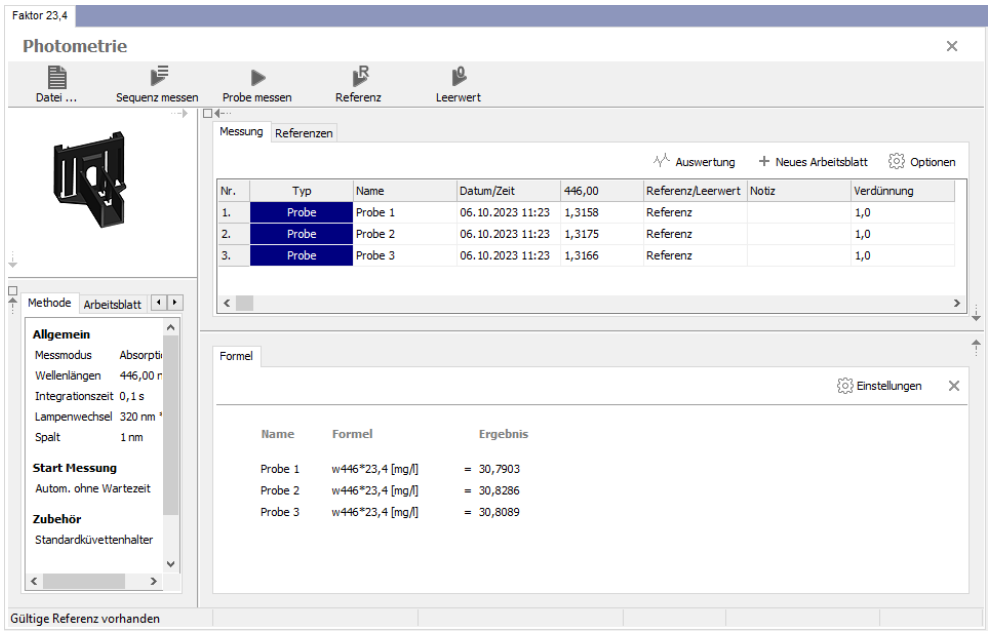
Keinen Eintrag vornehmen.

Seite Notiz

Den Text "Beispiel für eine Konzentrationsanalyse mit Faktor" eingeben.

Messung ausführen

- Im Dokumentfenster auf klicken.
  Die Startinformation zur Messung der Referenz erscheint.
- Referenzprobe einsetzen und zum Start der Messung auf **Ja** klicken.
- Die Referenzmessung erfolgt. Aufforderung zur Messung der Probe 1 erscheint.
- Probe 1 einsetzen und zum Start der Messung auf **Ja** klicken.
- Probe 2 und Probe 3 auf die gleiche Weise messen.
  - ✓ Die Messergebnisse werden in der Probentabelle des Arbeitsblattes **Messung** angezeigt. Die Ergebnisse der Formelberechnung werden auf dem Tab **Formel** im unteren Teil des Arbeitsblattes ausgegeben.



7 Modul Spektrum

Im Modul **Spektrum** erfolgt die Aufnahme von Spektren und deren Auswertung. Das Modul enthält folgende Funktionen:

- Quantitative Auswertung mit Kalibrierfunktion
- Auswertung von Messwerten an definierten Wellenlängen des Spektrums
- Umfangreiche mathematische Datenbehandlung der Spektren
- Automatische Peaksuche
- Schnitte durch eine Spektrenschar als Ergebnis einer Kinetikmessung oder einer Messung mit peltiertemperiertem Zubehör

Modul **Spektrum** öffnen

- Das Modul **Spektrum** mit einem Klick auf das Icon in der Startleiste des Hauptfensters öffnen.

- Alternativ den Menüpunkt **Module** | **Spektrum** wählen.
  - ✓ Auf der Arbeitsoberfläche wird ein neues Dokument geöffnet.
- Mit jedem weiteren Klick auf das Icon wird ein weiteres neues Dokument auf der Arbeitsoberfläche geöffnet.

Alle Funktionen der Dokumentfenster des Moduls **Spektrum** sind den Messungen von Spektren und deren Auswertungen zugeordnet. Sie können nun eine Methode erstellen und auf deren Grundlage eine Messung mit Auswertungen starten.

7.1 Methodeneinstellung im Modul Spektrum

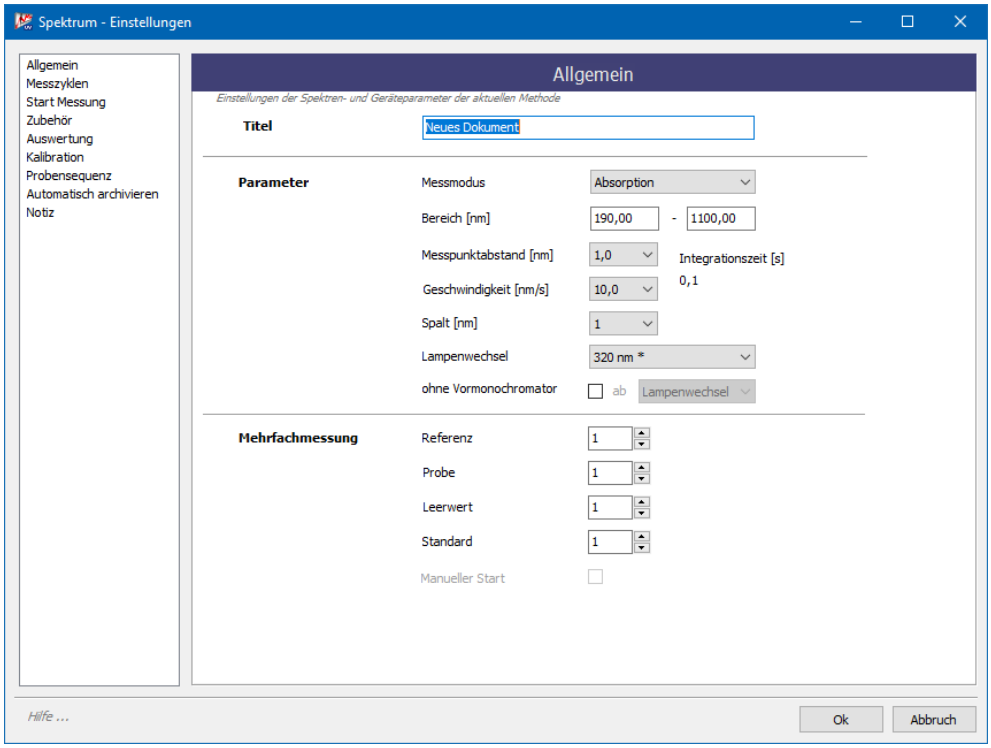
Dieser Abschnitt enthält alle Einstellungen die für eine Methode im Modul **Spektrum** getroffen werden können.

Methode erstellen

- Im Dokumentfenster mit einem Klick auf **Methode einstellen** das Methodenfenster öffnen.
- Die Einstellungen auf den Seiten des Methodenfensters vornehmen.
- Die Eingabe der Parameter mit Klick auf **Ok** abschließen.
  - ✓ Die Methodenparameter werden auf der linken Seite des Dokumentfensters auf dem Tab **Methode** ausgegeben. Die Icons für den Messstart erscheinen in der Werkzeugleiste des Dokumentfensters.

7.1.1 Spektrum - Einstellungen | Allgemein

Im Fenster **Spektrum - Einstellungen** | **Allgemein** werden die grundlegenden Messeinstellungen vorgenommen.



Titel

Hier geben Sie den Titel des Dokuments ein, der im Reiter des Dokuments angezeigt wird. Den Titel können Sie später editieren.

Parameter

In diesem Bereich wählen Sie die Parameter für die optische Messung.

Option	Beschreibung
Messmodus	Folgende Messmodi sind wählbar: ■ **Transmission** ■ **Absorption** ■ **Reflexion** (nur für Reflexionsmesseinsätze und Integrationskugel)
Bereich [nm]	Wellenlängenbereich für die Messung in den Eingabefeldern eingeben
Messpunktabstand [nm]	Messpunktabstand wählen
Geschwindigkeit [nm/s]	Messgeschwindigkeit wählen
Integrationszeit	Zeit für die Aufnahme eines Messpunkts Dieser Wert wird automatisch berechnet.
Spalt [nm]	Für SPECORD 210/250 PLUS Spektrale Spaltbreite (optische Auflösung) auswählen: 0,2; 0,5; 1; 2; 4 nm **Hinweis**: In älteren SPECORD 210/250 PLUS wurde der Spalt 0,2 nm noch nicht eingebaut. Für diese Geräte steht er nicht zur Auswahl.
Lampenwechsel	Wellenlänge des Wechsels von UV-Lampe auf Vis-Lampe auswählen Der voreingestellte Lampenwechsel bei 320 nm gewährleistet eine optimale Energieverteilung über den gesamten Wellenlängenbereich des Spektrometers. Wenn Sie nur im UV-Bereich oder Vis-Bereich arbeiten, können Sie auch mit den Optionen **nur UV** oder **nur Vis** mit der gewählten Lampe messen.

Mehrfachmessung

Sie können eine Messung mehrfach hintereinander ausführen und den Mittelwert für die weiteren Berechnungen und Analysen verwenden. Bei Messungen mit sehr wenig Energie, z. B bei Proben mit hoher Absorption, kann dieses Verfahren das Signal-Rausch-Verhältnis verbessern und die Messgenauigkeit erhöhen.

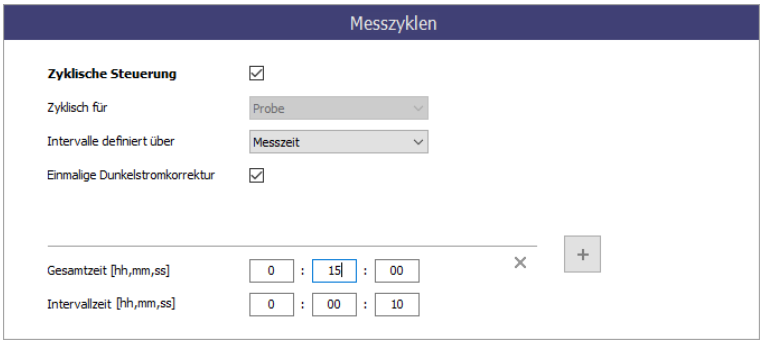
Option	Beschreibung
Mehrfachmessung	Bei Bedarf für die Probentypen **Referenz**, **Leerwert**, **Probe** und **Standard** die Anzahl der Messwiederholungen eingeben Wenn die Option **Manueller Start** aktiviert ist, erfolgt für jede Einzelmessung innerhalb einer Wiederholung die Aufforderung zum Start.

Sehen Sie dazu auch

Dokumententitel bearbeiten [▶ 24]

7.1.2 Spektrum - Einstellungen | Messzyklen

Auf der Seite **Messzyklen** definieren Sie zeitgestaffelte Messwiederholungen (Kinetikmessungen) in einer Probe. Im Ergebnis der Messung entsteht für jede Probe eine Spektrenschar, durch die an definierten Wellenlängen Schnitte gelegt werden. Die resultierenden Kinetikspektren (Änderung der Absorption/Transmission über die Zeit) können im Modul **Kinetik** weiter ausgewertet werden.



Option	Beschreibung
Zyklische Steuerung	Mit Aktivierung die Eingaben für zyklische Messungen freischalten
Zyklisch für	Nur bei Verwendung von Küvettenwechslern oder APG **Probe** Die gesamte reaktionskinetische Messung wird an einer Probe ausgeführt und anschließend die Messung in der nächsten Probe gestartet. Auf diese Weise werden nacheinander alle Proben in der Sequenz abgearbeitet. Die Messung eignet sich für eine schnelle Reaktionskinetik. Wenn die Reaktion jeweils unmittelbar vor der Messung gestartet werden soll, muss auf der Seite **Start/Stopp Messung** die Option **Manueller Start** aktiviert werden. **Charge** In diesem Modus erfolgen die Probenmessungen gestaffelt. Innerhalb eines Intervalls werden alle Proben der Sequenz, beginnend mit der 1. Probe, gemessen. Anschließend beginnt das nächste Intervall erneut mit der Messung der 1. Probe. Auf diese Weise wird die Messung bis zum letzten Intervall fortgesetzt. Es wird jeweils eine Charge des Küvettenwechslers/APG gemessen. Sind alle Messungen für diese Charge (entweder proben- oder chargenweise) abgearbeitet, werden die Proben im Zubehör ausgetauscht und die Messung der nächsten Charge wird gestartet.

Option	Beschreibung
Intervalle definiert über	**Messpunkte** Für die Messung müssen die Anzahl der Messpunkte/Messwiederholungen und die Intervallzeit definiert werden. Die resultierende Gesamtmesszeit wird automatisch berechnet. **Messzeit** Für die Messung müssen die Intervallzeit und eine Gesamtmesszeit definiert werden. Die resultierende Anzahl der Messpunkte wird automatisch berechnet.
Einmalige Dunkelstromkorrektur	In der Voreinstellung ist diese Option aktiviert. Dabei wird vor der ersten Messung der Dunkelstrom ermittelt und die Messwerte damit korrigiert. Wenn die Option deaktiviert ist, erfolgt vor jeder Messung eine Dunkelstromkorrektur.
+	Zeitabschnitt einfügen Bei zeitgesteuerten zyklischen Messungen können mehrere Zeitabschnitte mit jeweils unterschiedlichen Intervallzeiten festgelegt werden.

Nähere Informationen zu den Einstellungen der Kinetikmessung finden Sie im Modul **Kinetik**.

Sehen Sie dazu auch

Kinetik - Einstellungen | Messzyklen [▶ 90]

7.1.3 Spektrum - Einstellungen | Start Messung

Den Messstart einer Probe definieren Sie auf der Seite **Start Messung**. Folgende Startoptionen stehen zur Verfügung:

Option	Beschreibung
Autom. ohne Wartezeit	Die Messung beginnt sofort nach Klick auf oder .
Autom. mit Wartezeit	Nach Klick auf oder beginnt die Messung erst nach Ablauf der Wartezeit.
Manuell ohne Wartezeit	Nach Klick auf oder erscheint eine Rückfrage zum Start der Messung. Bei Beantwortung mit **Ja** beginnt die Messung sofort.
Manuell mit Wartezeit	Nach Klick auf oder erscheint eine Rückfrage zum Start der Messung. Bei Beantwortung mit **Ja** läuft zunächst die Wartezeit ab und danach startet die Messung.
Wartezeit	Zeitverzögerung für Startoptionen mit Wartezeit

7.1.4 Spektrum - Einstellungen | Zubehör

Die Parameter im Fenster **Spektrum - Einstellungen** | **Zubehör** hängen vom installierten Zubehör ab.

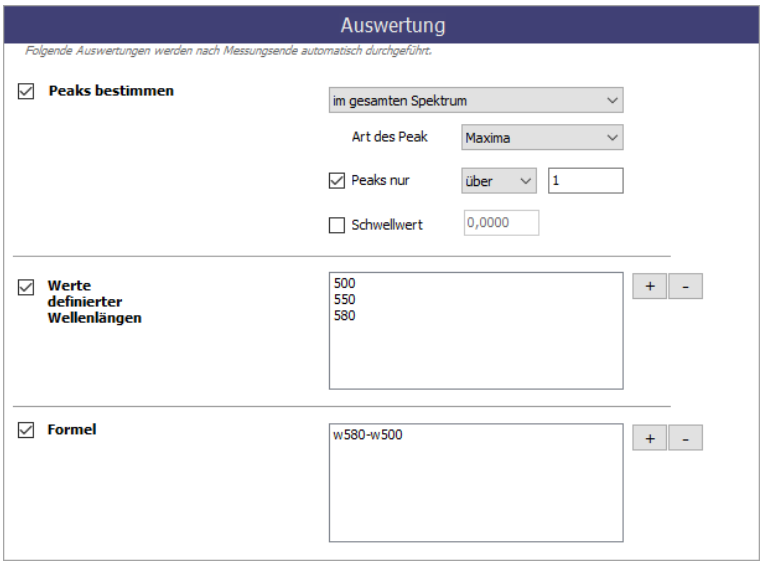
Sehen Sie dazu auch

Zubehöre verwenden [▶ 41]

7.1.5 Spektrum - Einstellungen | Auswertung

Im Fenster **Spektrum - Einstellungen** | **Auswertung** können Sie folgende Analysen aktivieren:

- Bestimmung von Peaks
- Anzeige der Messwerte an ausgewählten Wellenlängen
- Eingabe von Formeln



Peaks bestimmen

Mit Aktivieren des Kontrollkästchens **Peaks bestimmen** werden Extremwerte nach vorgegebenen Kriterien automatisch gesucht. Die Peaks werden in der grafischen Anzeige der Messkurve gekennzeichnet und auf einem gesonderten Tab im Auswertungsbereich ausgegeben.

Option	Beschreibung
Auswahlliste	**im gesamten Spektrum** Alle Peaks im Messbereich suchen **in definierten Teilbereichen** Peaks in definierten Spektrenbereichen suchen
Art des Peak	Art der gesuchten Peaks wählen: **Minima**, **Maxima** oder **Minima und Maxima**
Peaks nur	Absolute Grenze für die Anzeige der Peaks Peaks werden nur angezeigt, wenn sie über bzw. unter dem eingegebenen Ordinatenwert liegen.
Schwellwert	Differenz zwischen Peakhöhe und dem benachbarten darauffolgenden lokalen Maximum/Minimum Peaks werden nur angezeigt, wenn sie den eingegebenen Schwellwert überschreiten (Maximum) oder unterschreiten (Minimum).

Werte definierter Wellenlängen

Sie können Messwerte an definierten Wellenlängen des Spektrums auswählen. Diese Messwerte werden in der Probentabelle in den Auswertungen des Dokumentfensters angezeigt.

- Das Kontrollkästchen **Werte definierter Wellenlängen** aktivieren.
- Auf + klicken, im Eingabefeld die Wellenlänge innerhalb des Spektralbereichs wählen und mit erneutem Klick auf + in die Liste übertragen.

Formel

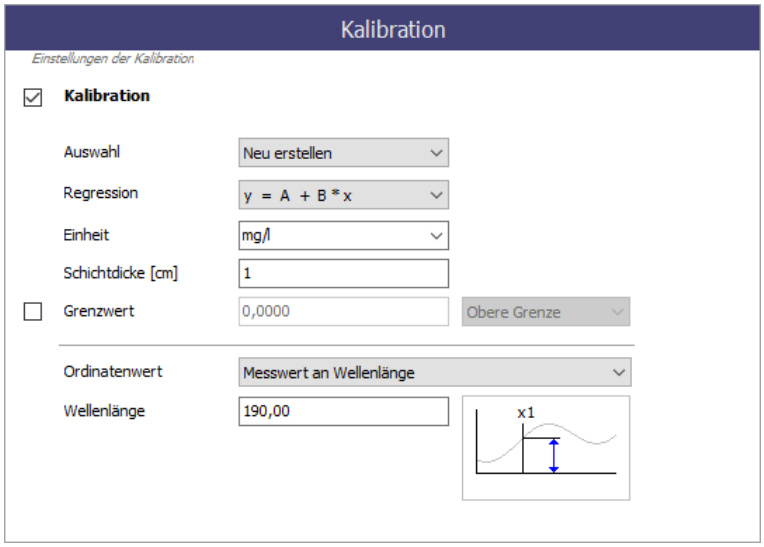
Sie können die Messwerte einer oder mehrerer Proben in einer Formel verknüpfen. Dadurch sind komplexe Auswertungen der Spektren möglich.

Sehen Sie dazu auch

Formeln verwenden [▶ 37]

7.1.6 Spektrum - Einstellungen | Kalibration

Auf der Seite **Kalibration** können Sie Auswerteparameter für eine quantitative Analyse mit Kalibration definieren.



Für Konzentrationsbestimmungen über eine Kalibration mit Standards aktivieren Sie die Option **Kalibration** und nehmen folgende Einstellungen vor:

Option	Beschreibung
Auswahl	**Neu erstellen** Kalibration innerhalb der folgenden Messserie aufnehmen In der Probensequenz müssen Sie die Standardproben und deren Konzentration definieren. **Aus Datei laden** Kalibrierparameter aus einer vorhandenen Methode laden
Regression	Regressionstyp der Kalibrierfunktion y = B * x y = A + B * x $y = A + B * x + C * x^2$
Einheit	Einheit des Analysenergebnisses
Schichtdicke	Schichtdicke der Küvette Dieser Wert dient nur zur Information und wird mit den Methodenparametern gespeichert.
Grenzwert	Einen oberen oder unteren Grenzwert für das Analysenergebnis festlegen Ergebnisse, die oberhalb bzw. unterhalb dieses Grenzwertes liegen, werden in der Ergebnistabelle mit "!" gekennzeichnet.

Das Modul **Spektrum** kann verschiedene Werte aus dem Spektrum zur Kalibration heranziehen:

Option	Beschreibung
Messwert an Wellenlänge	Messwert an einer ausgewählten Wellenlänge
Formel	Ergebnis einer Formelberechnung

Option	Beschreibung
	Mit einem Klick auf ... erscheint der Formeleditor. Als Funktionsargument stehen die auf der Seite **Auswertung** gewählten Peaks in definierten Teilbereichen oder Werte definierter Wellenlängen zur Verfügung.
Maximum zwischen x1 und x2	Automatisch ermitteltes Peakmaximum zwischen **Wellenlänge 1** und **Wellenlänge 2**
Fläche	Peakfläche zwischen **Wellenlänge 1** und **Wellenlänge 2** Bei Aktivierung der Option **Korrektur** erfolgt eine Basislinienkorrektur des Peaks.
Korrigierte Bande	Basislinienkorrigierte Peakhöhe **Korrigierte Bande x** Wellenlänge des Peaks eingeben **Wellenlänge 1** und **Wellenlänge 2** Wellenlängen, zwischen denen die Basislinienkorrektur erfolgt, eingeben
Ableitung	1. bis 4. Ableitung des Spektrums zwischen 2 Wellenlängen **Wellenlänge 1** und **Wellenlänge 2** Wellenlängenbereich für die Analyse der Ableitung **Ordnung** Ordnung der Ableitung **Anzahl der Stützstellen** Anzahl Stützstellen für die Ableitung mit integriertem Glättungsfilter **Bereich** Wert für die Kalibration (**von 0 bis Maximum**, **von 0 bis Minimum** oder **von Min. bis Max.**)

7.1.7 Spektrum - Einstellungen | Probensequenz

Auf der Seite **Probensequenz** können Sie die Reihenfolge der Proben für eine folgende Messung bestimmen, die Sie mit dem Icon im Dokumentfenster starten können. Eine Probensequenz können Sie auch direkt vor einer Messung erstellen.

Anforderung an die Probensequenz

- Die Aktivierung der Kalibration erfordert eine Eingabe einer Sequenz mit Standardproben.
- Bei Verwendung von Küvettenwechslern und Probengebern werden die Proben den Probenplätzen im Zubehör zugeordnet.
- Wenn die Probensequenz leer ist, erscheint beim Messstart der Probensequenz zunächst das Fenster **Sequenz einstellen**. Das Fenster kann erst verlassen werden, wenn mindestens eine Probe definiert ist.

Sehen Sie dazu auch

Probensequenzen [▶ 30]

7.1.8 Spektrum - Einstellungen | Automatisch archivieren

Sie können die Messdaten und deren Auswertung automatisch speichern, exportieren und drucken. So können Sie Ihre Prozesse zur Archivierung der Daten vereinheitlichen und sicherstellen, dass Daten nicht verlorengehen. Auf der Seite **Automatisch archivieren** wählen Sie dazu die Zieldateien und Reportvorlagen. Zusätzlich müssen Sie im Fenster **Optionen** die automatische Archivierung programmweit aktivieren und den Zeitpunkt für die einzelnen Archivierungsfunktionen wählen.

Sehen Sie dazu auch

Messdaten automatisch archivieren [▶ 29]

7.1.9 Spektrum - Einstellungen | Notiz

Auf der Seite **Notiz** können Sie optional eine Notiz zur Methode eingeben.

7.2 Messungen im Modul Spektrum ausführen

Voraussetzung für einen Messstart ist, dass im Dokumentfenster eine Methode neu erstellt oder geladen wurde. Die Messung kann mit einer in der Methode hinterlegten Probensequenz oder als Einzelmessung gestartet werden.

Für die Messungen werden folgende Icons eingeblendet:

Icon	Beschreibung
Sequenz messen	Probensequenz starten Wenn Sie in den Messparametern keine Probensequenz hinterlegt haben, erscheint nach Klick auf dieses Icon das Fenster **Sequenz einstellen**. Das Fenster können Sie erst verlassen, wenn Sie mindestens eine Probe definiert haben.
Probe messen	Einzelne Probenmessung unabhängig von der eingestellten Probensequenz starten
Referenz	Referenz messen Eine separate Referenzmessung ist nötig, wenn die Probensequenz nicht mit einer Referenzmessung beginnt oder keine Referenz, passend zu den aktuellen Methodenparametern, verfügbar ist.
Stopp	Laufende Messung stoppen und nicht fortsetzen
Sequenz unterbrechen	Messung unterbrechen und zu einem späteren Zeitpunkt fortsetzen Die laufende Probenmessung wird fertig abgearbeitet. Die noch ausstehende Probensequenz wird anschließend angezeigt und kann editiert werden.
	Für Kassetten-Sipper-System und Probengeber APG verfügbar: Pumpe ein- bzw. ausschalten und Probe transportieren bzw. Transport stoppen
	Für Probengeber APG verfügbar: Probenkanüle absenken bzw. hochfahren
	Für Probengeber APG mit Rührfunktion verfügbar: Rührer ein- bzw. ausschalten

Referenz messen

Wenn keine Referenz an erster Stelle in der Probensequenz steht, muss die Referenz separat aufgenommen werden.

- Referenz im Probenraum platzieren.
- Auf **Referenz** klicken und Abfrage zur Referenzmessung bestätigen.
  - ✓ Die Referenzmessung wird ausgeführt. Alle folgenden Messungen werden mit dieser Referenz korrigiert, bis die Messparameter durch eine neue Methodeneinstellung geändert werden oder die nächste Referenzmessung erfolgt.

Erste Sequenz starten

Mit Start der Probensequenz werden die Proben in der Reihenfolge entsprechend der Probentabelle abgearbeitet.

- Die erste Probe der Sequenz im Probenraum platzieren bzw. Küvettenwechsler/APG mit Proben bestücken.
- Auf **Sequenz messen** klicken.
- Den weiteren Bildschirmaufforderungen zum Einsetzen der Proben und Start von Probenmessungen folgen.
  - ✓ Die Probensequenz wird abgearbeitet. Die Messwerte und Auswertungen werden im Dokumentfenster angezeigt.

Sequenz unterbrechen oder stoppen

Eine laufende Messung können Sie unterbrechen und fortführen oder endgültig stoppen.

- Auf **Stopp** klicken, um die Messung zu stoppen.
  - ✓ Die Messung der Sequenz wird gestoppt und kann nicht fortgesetzt werden. Bis zu diesem Zeitpunkt aufgenommene Messdaten bleiben erhalten und können weiter bearbeitet werden.
- Auf **Sequenz unterbrechen** klicken, um eine Messung zu unterbrechen und später fortzusetzen.
  - ✓ Die aktuelle Probenmessung wird beendet und danach die Abarbeitung unterbrochen. Die Messpause können Sie nutzen, um die laufende Probensequenz anzusehen und zu editieren.

Nächste Sequenz starten

Nach Abarbeitung der ersten Probensequenz können Sie die Sequenz weitere Male starten oder nacheditieren. Dies ist auch möglich, wenn das Dokument bereits gespeichert und zur Anzeige der Ergebnisse erneut geöffnet wurde.

- Auf klicken.
  Das Fenster **Sequenz einstellen** mit der in der Methode hinterlegten Sequenz erscheint.
- Bei Bedarf eine neue Sequenz zusammenstellen.
- Die Einstellungen im Fenster **Sequenz einstellen** mit Klick auf **Ok** bestätigen.
- Den weiteren Bildschirmaufforderungen zum Einsetzen der Proben und Start von Probenmessungen folgen.
  - ✓ Die aktuelle Sequenz wird abgearbeitet und die Daten an die vorhandene Messwerttabelle und Auswertungen angehängt.

Einzelmessungen ausführen

Sie können unabhängig von der eingestellten Sequenz einzelne Proben des Probentyps **Probe** messen und an die Messwerttabelle und Auswertungen anhängen.

- Probe im Probenraum platzieren.
- Auf **Probe messen** klicken.
- Den weiteren Bildschirmaufforderungen zum Messstart folgen.
  - ✓ Die Messung erfolgt und die Daten werden an vorhandene Messwerte und Auswertungen angehängt.

Tipp

Wenn Messungen anderer Probentypen angehängt werden sollen, klicken Sie auf **Sequenz messen** und geben Sie eine Sequenz mit den entsprechenden Proben ein.

Proben nachmessen

Sie können Ausreißer einer Messung nachmessen und damit stark abweichende Werte einer Messserie durch neue Werte ersetzen. Eine Nachmessung von Proben wird stets im Audit Trail protokolliert. Für das Nachmessen einer Probe müssen Sie auf das Arbeitsblatt **Messung** wechseln.

- Die Probe im Probenraum platzieren.
- Auf die Zeile der nachzumessenden Probe mit der rechten Maustaste klicken. Bei Mehrfachmessungen können Sie einen einzelnen Wert durch Klicken mit der rechten Maustaste auswählen.
- Im Kontextmenü den Menüpunkt **Probe nachmessen** wählen.
- Weiteren Bildschirmaufforderungen zum Messstart folgen.

  ✓ Die Messung wird ausgeführt und der Messwert in der Probentabelle ersetzt. Die vorhandenen Auswertungen werden aktualisiert.

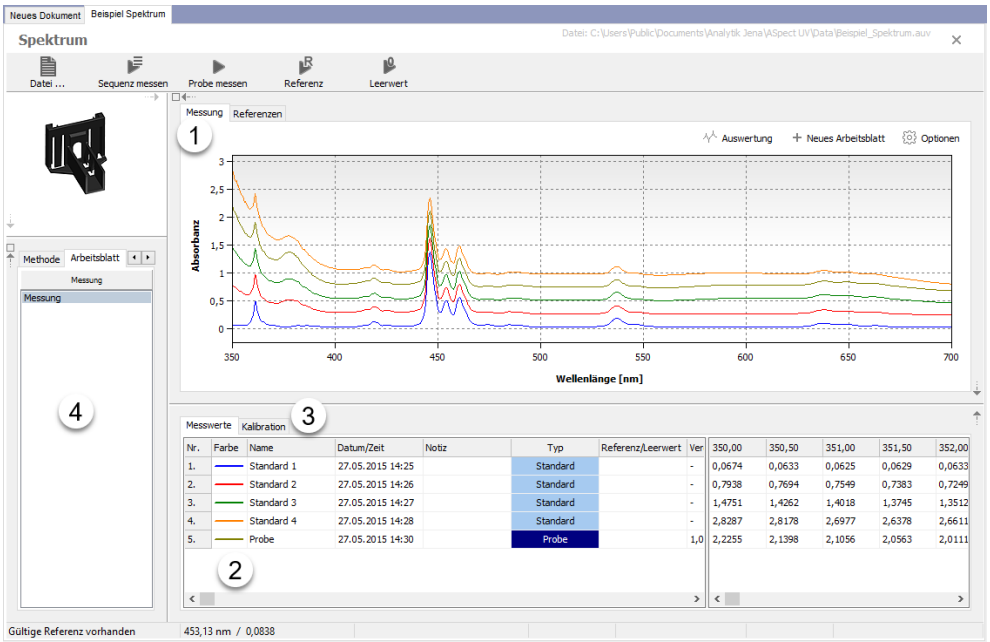
HINWEIS

Wenn im Dokument bereits weitere Arbeitsblätter neben dem Arbeitsblatt **Messung** angelegt sind, werden diese bei einer Nachmessung nicht aktualisiert.
Bei Verwendung von Küvettenwechsler oder APG muss die nachzumessende Probe auf die gleiche Position im Zubehör gesetzt werden. Die Position im Zubehör kann in der Probentabelle auf dem Arbeitsblatt angezeigt werden.
Zeitzyklische Messungen können nicht nachgemessen werden.

7.3 Ergebnisse im Modul Spektrum anzeigen, auswerten und bearbeiten

In diesem Abschnitt werden die Besonderheiten der Ergebnisanzeige und Auswertung im Modul Spektrum erläutert.

Dokumentfenster im Modul Spektrum mit mehreren Spektren



Nr.	Beschreibung
1	Arbeitsblätter mit der Anzeige der Proben- und Referenzspektren und weitere Auswertungen
2	Tab **Messwerte** mit den Einzelmesswerten der Proben

Nr.	Beschreibung
3	Tab mit Datenauswertungen
4	Tab mit Informationen zu Methodeneinstellungen und mathematischen Datenbehandlungen auf den Arbeitsblättern

Arbeitsblatt Messung

Das Arbeitsblatt **Messung** enthält die Messdaten. In der oberen Hälfte des Arbeitsblatts werden die Spektren angezeigt.

Auf dem Tab **Messwerte** in der unteren Hälfte des Arbeitsblatts sind die Probentabelle mit der Reihenfolge der Messungen und die Tabelle mit den digitalen Messwerten angeordnet. Die weiteren Tabs enthalten Datenauswertungen, die schon in der Methode festgelegt wurden. Diese Auswertungen können Sie ergänzen und editieren.

Probentabelle

Die Anzeige der Probentabelle kann frei konfiguriert werden. Nach einem Rechtsklick auf den Kopf der Tabelle können im Kontextmenü folgende Parameter gewählt werden:

- Nummer in der Sequenzreihenfolge
- Position im Zubehör bei Verwendung von Küvettenwechsler oder Probengeber
- Farbe der Messkurve im Chart
- Charge bei Verwendung von Küvettenwechsler oder Probengeber
- Probenbezeichnung
- Probentyp
- Datum und Zeitpunkt der Messung
- Temperatur bei Methoden mit peltiertemperierten Zubehör
- Notiz
- Probenkonzentration bei Konzentrationsbestimmungen mit Kalibration
- Verdünnung und Einwaage
  Diese Eingaben werden nur bei Konzentrationsbestimmungen mit Kalibration berücksichtigt.
- Probenspezifische Variablen A – H für die Berechnungen in Formeln

Per Drag&Drop kann die Reihenfolge der Spalten in der Tabelle verändert werden. Die Einzelmessungen für jede Probe sind daneben in einer separaten Tabelle aufgeführt.

Arbeitsblatt Referenz

Auf dem Arbeitsblatt **Referenz** werden die Referenzwerte aufgelistet.

Neues Arbeitsblatt

Sie können im Dokumentfenster weitere Arbeitsblätter erzeugen und auf ihnen weitere Auswertungen vornehmen. Auf diese Weise können Sie in einem Dokument (Datei) verschiedene Auswertungen nebeneinander anlegen. Das Arbeitsblatt **Neues Arbeitsblatt** wird nach einem Klick auf den Menüpunkt + **Neues Arbeitsblatt** auf dem Arbeitsblatt **Messung** angelegt. Die unbearbeiteten, originalen Messdaten werden zunächst in das neue Arbeitsblatt kopiert und können dann bearbeitet werden.

Sehen Sie dazu auch

Spektren und Messkurven auf dem Arbeitsblatt anzeigen [▶ 19]

7.3.1 Anzeigeoptionen für die Ergebnisse im Modul Spektrum

Für die grafische Anzeige im Modul **Spektrum** sind folgende Funktionen verfügbar:

- Kurve skalieren
- Kurve mit Text versehen (Textbox)
- Kurve/Probe markieren
- Kurvenfarbe ändern
- Kurve ausblenden (Probe deaktivieren)

Sehen Sie dazu auch

Spektren und Messkurven auf dem Arbeitsblatt anzeigen [▶ 19]

7.3.2 Spektrendaten auswerten

Die in der Methode angebotenen Datenauswertungen können Sie auch nachträglich vornehmen. Die Funktionen sind im Menü **Auswertung** zusammengefasst, das auf jedem Arbeitsblatt zur Verfügung steht. Die Auswertungen beziehen sich immer auf die Messwerte des jeweiligen Arbeitsblatts. Wenn die Messwerte mit mathematischen Funktionen bearbeitet werden, wird die Auswertung auf diesem Arbeitsblatt entsprechend angepasst.

Die Auswertungen werden im unteren Teil des Arbeitsblatts auf einem eigenen Tabellenblatt ausgegeben.

Folgende Auswertungen stehen Ihnen im Modul **Spektrum** zur Verfügung:
- Automatische Peaksuche
- Messwerte an definierten Wellenlängen tabellarisch anzeigen
- Messwerte in einer Funktion/Formel verwenden
- Kalibierdaten für eine Konzentrationsanalyse laden

Auswertung editieren

Bei vorhandenen Auswertungen können Sie die Auswerteparameter editieren.

- Auf dem Tabellenblatt der Auswertung auf **Einstellungen** klicken und im Dialogfenster die Auswerteparameter ändern.
  - ✓ Die Auswertung wird aktualisiert.

Auswertung löschen

Nichtbenötigte Auswertungen können Sie löschen.

- Auf dem Tabellenblatt der Auswertungen rechts oben auf ✕ klicken.
  - ✓ Die Auswertung wird vom Arbeitsblatt entfernt.

Peakliste

Mit der Funktion **Peakliste** können Sie eine automatische Peaksuche starten.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Peakliste** wählen.
- Im Fenster **Einstellungen Peakliste** folgende Optionen auswählen.

Option	Beschreibung
Auswahlliste	**im gesamten Spektrum** Alle Peaks im Messbereich suchen **in definierten Teilbereichen** Peaks in definierten Spektrenbereichen suchen
Art des Peak	Art der gesuchten Peaks wählen: **Minima**, **Maxima** oder **Minima und Maxima**
Peaks nur	Absolute Grenze für die Anzeige der Peaks Peaks werden nur angezeigt, wenn sie über bzw. unter dem eingegebenen Ordinatenwert liegen.
Schwellwert	Differenz zwischen Peakhöhe und dem benachbarten darauffolgenden lokalen Maximum/Minimum Peaks werden nur angezeigt, wenn sie den eingegebenen Schwellwert überschreiten (Maximum) oder unterschreiten (Minimum).

- Die Auswahl mit Klick auf **Ok** bestätigen.
  - ✓ Die Peakliste wird angezeigt.

Werte definierter Wellenlängen

Mit der Funktion **Werte def. Wellenlängen** werden Messwerte an ausgewählten Wellenlängen in einer Tabelle zusammengefasst.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Werte def. Wellenlängen** wählen.
- Auf + klicken, im Eingabefeld die gewünschte Wellenlänge eintragen und mit erneutem Klick auf + in die Liste übertragen.

✓ Die Wertetabelle wird angezeigt.

Formel

Mit der Funktion **Formel** können Sie Messwerte einer oder mehrerer Proben in einer Formel verknüpfen.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Formel** wählen.
- Auf + klicken und die Formel mit dem Formeleditor erstellen.
- Bei Bedarf auf die gleiche Weise weitere Formeln hinzufügen.

✓ Die Ergebnisse werden auf dem Tab **Formel** angezeigt.

Kalibration

Die Funktion **Kalibration** ist verfügbar, wenn ein Dokument keine eigene Kalibration mit Standards enthält. Mit dieser Funktion können Sie nachträglich die Kalibrierdaten aus anderen Dateien laden und damit eine quantitative Analyse der Messwerte ausführen. Dabei werden nur die Kalibrierparameter und nicht die Standards geladen.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Kalibration** wählen.
- Die Option **Kalibration** aktivieren.
- Auf **Öffnen** klicken und Dokument mit der Kalibrierkurve auswählen.

✓ Das Tabellenblatt **Kalibration** mit der aktuellen Kalibrierkurve und den berechneten Kalibrierparametern wird angezeigt. Die Ergebnisse der Konzentrationsanalyse mit Kalibration werden direkt in die Probentabelle eingetragen. Konzentrationen, die außerhalb des kalibrierten Bereichs liegen, werden in Klammern gesetzt.

Das Tabellenblatt **Kalibration** enthält folgende Informationen:
- Quelle der Kalibrierkurve (in diesem Dokument gemessen oder aus einer Datei geladen)
- Regressionsmodell
- Analysenwellenlänge bzw. verwendete Formel der Kalibration
- Regressionskoeffizienten A, B und C, soweit im Regressionsmodell berechnet
- Bestimmtheitsmaß R^2
- Schichtdicke der Küvette (nur informativ, wird nicht in der Berechnung berücksichtigt)

Sehen Sie dazu auch

Formeln verwenden [▶ 37]

7.3.3 Spektrendaten mathematisch bearbeiten

Sie können mathematische Funktionen, z. B die Addition einer Konstanten, auf die Messdaten anwenden. Die Messdaten und vorhandene Auswertungen auf einem Arbeitsblatt werden daraufhin neu berechnet und aktualisiert. Die mathematischen Operationen können Sie aufeinanderfolgend im gleichen Arbeitsblatt anwenden.

HINWEIS

Sollten die Messdaten auf dem Arbeitsblatt **Messung** verändert werden, z. B. durch Nachmessen oder Deaktivieren einer Probe, werden die Daten auf dem weiteren Arbeitsblättern nicht aktualisiert.

Folgende Funktionen stehen im Modul **Spektrum** für die mathematische Bearbeitung zur Verfügung:
- Zuschneiden
- Zeitschnitt
- Temperaturschnitt

- Offset
- Faktor
- Glätten
- Ableiten
- Normieren
- Interpolieren
- Basislinienkorrektur
- Autom. Basislinienkorrektur
- Konvertieren in Transmission[%T] / Konvertieren in Absorbanz
- Mittelwertspektrum
- Spektrenformel

Datenbearbeitung rückgängig machen

Das Protokoll über die ausgeführten Operationen finden Sie auf der linken Seite des Dokuments auf dem Tab **Arbeitsblatt**. Die Operationen sind dort der Reihe nach aufgelistet. Mit einem Klick auf die entsprechende Operation wird der Bearbeitungsschritt angezeigt. Auf diesem Tab können Sie Operationen rückgängig machen.

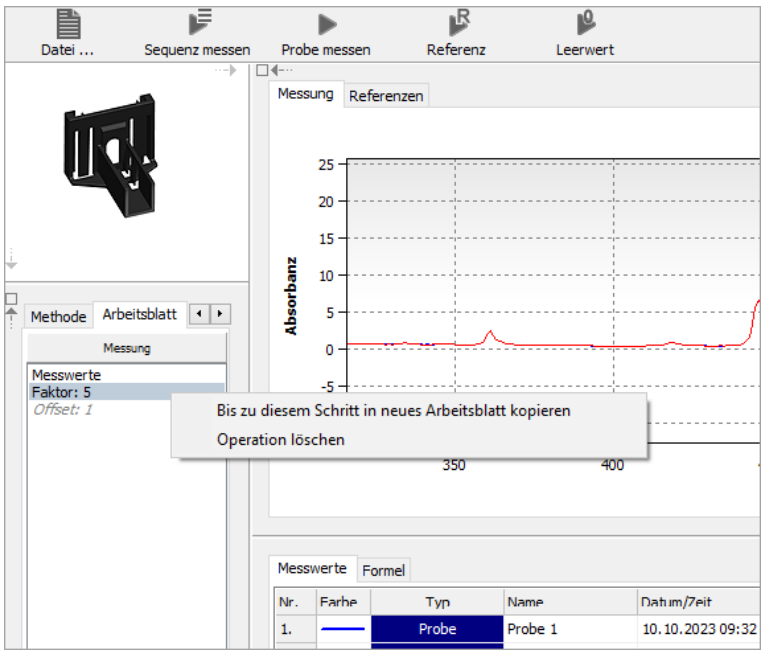
▶ Mit rechter Maustaste auf die letzte Operation klicken, die rückgängig zu machen ist.

▶ Im Kontextmenü eine der beiden Optionen auswählen:

– **Bis zu diesem Schritt in neues Arbeitsblatt kopieren**
Ein neues Arbeitsblatt wird geöffnet und die Daten mit der Änderungshistorie bis zur gewählten Operation dorthin kopiert. Im vorherigen Arbeitsblatt bleiben alle Operationen erhalten.

– **Operation löschen**
Alle Schritte inklusive der gewählten Operation werden im aktuellen Arbeitsblatt gelöscht.

✓ Die Operationen werden entsprechend der gewählten Option in ein neues Arbeitsblatt kopiert oder rückgängig gemacht.



Zuschneiden

Mit dieser Funktion wählen Sie einen Kurvenausschnitt für die Anzeige und weitere Bearbeitung/Auswertung aus. Die Werte außerhalb des gewählten Bereichs werden nicht mehr berücksichtigt.

▶ Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Zuschneiden** wählen.

✓ Der Cursor wandelt sich in eine senkrechte Linie mit der Bezeichnung "Range".

- Auf die linke oder rechte Begrenzung des auszuschneidenden Abszissenbereichs klicken und mit gedrückt gehaltener Maustaste den Cursor bis zur anderen Begrenzung ziehen. Dann die Maustaste loslassen.
- Alternativ im Fenster **Zuschneiden** in den Feldern **Beginn** und **Ende:** die Bereichsgrenzen eingeben.
- Die Eingabe im Fenster **Zuschneiden** mit Klick auf **Ok** bestätigen.
  - ✓ Die Kurvendarstellung wird aktualisiert. Sichtbar ist nur noch der ausgewählte Bereich der Messkurve.

Zeitschnitt

Wenn Sie in den Methodeneinstellungen eine zeitgesteuerte Intervallmessunge definieren, entsteht eine dreidimensionale Spektrenschar mit den Koordinaten Wellenlänge, Absorbanz bzw. Transmission [%T] und Zeit. Mit dieser Funktion wird durch die Kurvenschar an einer definierten Wellenlänge ein Schnitt gelegt. Das Ergebnis ist eine Kurve mit der zeitaufgelösten Änderung des Messwertes an der gewählten Wellenlänge. Diese Kinetikkurve wird in einem neuen Dokumentfenster des Moduls **Kinetik** angezeigt und kann dort ausgewertet werden.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Zeitschnitt** wählen.
- Im Eingabefeld den Punkt auf der X-Achse (hier Wellenlänge) eingeben oder mit dem Cursor auf entsprechende Wellenlänge im Spektrum klicken.
  - ✓ Die resultierende Kinetikkurve wird in einem neuen Dokument des Moduls **Kinetik** angezeigt.

Temperaturschnitt

Wenn Sie in den Methodeneinstellungen eine Spektrenmessung mit peltiertemperiertem Zubehör im Temperaturmodus **Variabel** definieren, entsteht eine dreidimensionale Spektrenschar mit den Koordinaten Wellenlänge, Absorbanz bzw. Transmission [%T] und Temperatur. Mit dieser Funktion wird an einer ausgewählten Wellenlänge ein Schnitt durch die Spektrenschar gelegt. Das Ergebnis ist eine Temperaturkurve, bei der die Absorbanz bzw. Transmission gegenüber der Temperatur aufgetragen ist. Die Temperaturkurve wird in einem neuen Dokumentfenster des Moduls **Thermometrie** angezeigt und kann dort ausgewertet werden.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Temperaturschnitt** wählen.
- Im Eingabefeld den Punkt auf der X-Achse (hier Wellenlänge) eingeben oder mit dem Cursor auf entsprechende Wellenlänge im Spektrum klicken.
  - ✓ Die Temperaturkurve wird in einem neuen Dokument des Moduls **Thermometrie** angezeigt.

Offset

Mit dieser Funktion wird eine Konstante zu den Messwerten addiert. Der Wert der Konstanten kann sowohl positiv als auch negativ sein. Auf diese Weise lassen sich Störgrößen simulieren oder kompensieren.

- Auf einem neuen Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Offset** wählen.
- Im Feld **Offset** den Wert eingeben.
  - ✓ Die Messwerte und Auswertungen werden neu berechnet und die Anzeigen aktualisiert.

Faktor

Mit dieser Funktion werden die Messwerte mit einer Konstanten multipliziert. Die Multiplikation eines Absorptionswerts mit einer Konstanten entspricht theoretisch einer Veränderung der Schichtdicke oder der Konzentration der Probe.

- Auf einem neuen Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Faktor** wählen.
- Im Feld **Faktor** den Wert eingeben.
  - ✓ Die Messwerte und Auswertungen werden neu berechnet und die Anzeigen aktualisiert.

Glätten

Mit dieser Funktion wird die Kurve nach dem Verfahren Savitzky-Golay geglättet.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Glätten** wählen.
- In der Dropdown-Liste **Stützstellen** die Anzahl zu betrachtender Punkte für die Glättung nach Savitzky-Golay auswählen.
  - ✓ Die Kurve wird neu berechnet und die Anzeige aktualisiert.

Ableiten

Mit dieser Funktion wird für die Messkurve die Ableitung der 1. bis 4. Ordnung mit integrierter konstanter Glättung über 5 Punkte und variabler Anzahl Stützstellen für den Ableitungsfilter (n Punkte) nach Savitzky-Golay berechnet. Die abgeleitete Kurve kann Untergrundsignale, die die Messung überlagern, unterdrücken und die spezifischen Absorptionen deutlicher hervorheben.

Eine Kurve kann mehrfach abgeleitet werden. Der Algorithmus ist jedoch jedem Ableitungstyp spezifisch angepasst, deshalb ergeben sich dementsprechend bei der vierten Ableitung nicht die gleichen Ordinatenwerte wie bei viermaliger Bildung der ersten Ableitung. Für die quantitative Analyse ist daher immer dasselbe Verfahren anzuwenden.

Die Ableitung insbesondere höherer Ordnung führt immer zum "Aufrauen" der Messkurve. Wählen Sie deshalb in Abhängigkeit von der Breite der Messkurvenstruktur immer eine möglichst hohe Anzahl Stützstellen. Mitunter ist ein vorheriges Glätten zur Unterdrückung des statistischen Rauschens empfohlen. Beachten Sie, dass sich der Wertebereich entsprechend der gewählten Anzahl Stützstellen (n) um die Anzahl Werte (n-1)/2+2 an beiden Spektrenenden verringert. Zum Abmindern dieses Effekts können Sie vorher eine Interpolation ausführen.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Ableiten** wählen.
- In der Liste **Ableiten** die Ordnung der Ableitung auswählen.
- In der Liste **Stützstellen** die Zahl der für die Ableitung mit integriertem Glättungsfilter zu verwendenden Stützstellen auswählen.
  - ✓ Die Ableitung wird berechnet und die Anzeige aktualisiert. Im Audit Trail wird die Ordnung der Ableitung und die Anzahl Stützstellen dokumentiert.

Normieren

Mit dieser Funktion können Spektren gespreizt oder gestaucht werden, sodass an einer bestimmten Wellenlänge bzw. einem Peak ein vorgegebener Ordinatenwert erreicht wird. Dazu werden alle Messwerte mit einem Normierungsfaktor multipliziert, der für den Ordinatenwert an der Wellenlänge oder dem Peak ermittelt wurde.

Ausführung - Normierung an einer Wellenlänge

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Normieren** | **Ein Punkt** wählen.
  Der Cursor wandelt sich in eine durchgehende senkrechte Linie mit der Bezeichnung "W".
- In der Grafik auf die gewünschte Wellenlänge klicken.
- Im Feld **Punkt (x):** die Wellenlänge ggf. editieren und im Feld **Wert der Normierung** den gewünschten Ordinatenwert eingeben.
  - ✓ Der Normierungsfaktor wird ermittelt und jeder Messwert des Spektrums mit diesem Faktor multipliziert. Die Messwerte und die Spektrenanzeige auf dem Arbeitsblatt werden aktualisiert.

Ausführung - Normierung an einem Peak

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Normieren** | **Maximum im Bereich** wählen.
  Der Cursor wandelt sich in eine senkrechte Linie mit der Bezeichnung "Range".
- Auf die linke oder rechte Begrenzung des Peaks klicken und mit gedrückt gehaltener Maustaste den Cursor bis zur anderen Begrenzung ziehen.

- In den Feldern **Startpunkt (x):** und **Endpunkt (x):** die Wellenlängen der Peakgrenzen editieren und im Feld **Wert der Normierung** den gewünschten Ordinatenwert eingeben.
  - ✓ Der Peak und der dazugehörige Normierungsfaktor werden ermittelt und jeder Messwert des Spektrums mit diesem Faktor multipliziert. Die Messwerte und die Spektrenanzeige auf dem Arbeitsblatt werden aktualisiert.

Interpolieren

Diese Funktion berechnet weitere Messwerte zwischen den vorhandenen Messwerten des Spektrums. Die Funktion kann bspw. zur Gewinnung von Zwischenwerten für eine genauere Peakbestimmung verwendet werden. Die Interpolation erfolgt wahlweise linear oder mit kubischem Spline.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Interpolieren** wählen.
- In der Liste **Berechnung** den Berechnungstyp wählen.
- Im Feld **Messpunktabstand** den neuen Messpunktabstand eingeben. Der neue Messpunktabstand muss kleiner als der ursprüngliche sein.
  - ✓ Das Spektrum wird neu berechnet und die Anzeige aktualisiert.

Mittelwertspektrum

Diese Funktion berechnet aus einer Kurvenschar das Mittelwertspektrum.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Mittelwertspektrum** wählen.
  - ✓ Das Mittelwertspektrum wird berechnet und die Anzeige aktualisiert.

Basislinienkorrektur

Mit dieser Funktion kann ein ansteigender oder abfallender linearer Untergrund einer Bande korrigiert werden. Die lineare Funktion des Untergrundes wird durch zwei Punkte im Grafen bestimmt.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Basislinienkorrektur** wählen.
  Der Cursor wandelt sich in eine senkrechte Linie mit der Bezeichnung "Range".
- Mit der Maus auf den ersten Punkt im Spektrum klicken, mit gedrückter Maustaste den Cursor zum zweiten Punkt ziehen und loslassen.
- Im Eingabefenster die beiden Punkte (Startpunkt und Endpunkt) für die lineare Funktion editieren und mit Klick auf **Ok** bestätigen.

Automatische Basislinienkorrektur

Bei der automatischen Basislinienkorrektur wird ein ansteigender oder abfallender linearer Untergrund einer Bande automatisch korrigiert. Die lineare Funktion des Untergrundes wird dabei durch die Minima auf beiden Seiten des Peaks gelegt.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Automatische Basislinienkorrektur** wählen.
  - ✓ Das Spektrum wird neu berechnet und die Anzeige aktualisiert.

Konvertieren in Transmission[%T] / Absorbanz

Diese Funktion konvertiert ein Spektrum von Absorbanz in Transmission und umgekehrt.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Konvertieren in Transmission[%T]** (**Absorbanz**) wählen.
  - ✓ Das Spektrum wird konvertiert und die Anzeige aktualisiert.

Spektrenformel

Mit dieser Funktion können Sie die Spektren verschiedener Proben in einem Dokument arithmetisch verknüpfen, z. B. um durch Addition der Spektren zweier (oder mehrerer) bekannter Substanzen ein Gesamtspektrum zu Vergleichszwecken zu erzeugen.

Voraussetzung für die Verknüpfung der Spektren untereinander ist, dass die Spektren zusammen in einem Fenster überlagert sind. Spektren aus verschiedenen Dateien können mit Kopieren / Einfügen in einem neuen Fenster zusammengeführt werden.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt Auswertung | Spektrenformel wählen.
- Die Funktion im Formeleditor eingeben. Die Spektren können als Argumente in der Liste Auswahl Spektrum gewählt und mit einem Klick auf in die Formel eingefügt werden. Die Spektren sind entsprechend ihrer Reihenfolge auf dem Arbeitsblatt Messwerte nummeriert.
  ✓ Das Ergebnis wird berechnet und die Anzeige aktualisiert.

Sehen Sie dazu auch

- Spektren aus verschiedenen Dokumenten zusammenführen [▸ 85]
- Formeln verwenden [▸ 37]

7.3.4 Spektren aus verschiedenen Dokumenten zusammenführen

Mit den Funktionen **Kopieren** und **Einfügen** können Sie Spektren aus verschiedenen Dokumenten in einem neuen Dokument zusammenführen und bearbeiten. Die Spektren können unterschiedliche Wellenlängenbereiche und Messpunktabstände besitzen.

- Im Modul **Spektrum** alle Dateien öffnen, in denen sich die benötigten Spektren befinden (z.B. Spektrum1.auv und Spektrum2.auv).
- Mit einem Klick auf ein neues Dokument öffnen.
- Im ersten Dokument (Spektrum1.auv) alle Spektren markieren, die kopiert werden sollen, und den Menüpunkt **Datei ...** | **Kopieren** wählen.
- Zum neuen Dokument wechseln und dort das Spektrum mit dem Menüpunkt **Datei ...** | **Einfügen** einfügen.
- Aus dem zweiten Dokument (Spektrum2.auv) auf die gleiche Weise die benötigten Spektren in das neue Dokument kopieren.
  ✓ Die Spektren im neuen Dokument können nun bearbeitet werden.

7.4 Beispielmessung im Modul Spektrum

Als Beispiel dient eine Spektrenmessung im Bereich von 300 ... 900 nm. Der Holmiumoxidfilter aus dem Standardfiltersatz von Hellma kann, falls vorhanden, als Probe verwendet werden. Die Messung erfolgt mit dem Standardküvettenhalter.

Folgende Schritte müssen ausgeführt werden:

1. Dokument im Modul anlegen.
2. Methode öffnen und Parameter eingeben.
3. Messung starten.

Dokument anlegen

- Den Menüpunkt **Module** | **Spektrum** oder auf das Icon in der Startleiste klicken.

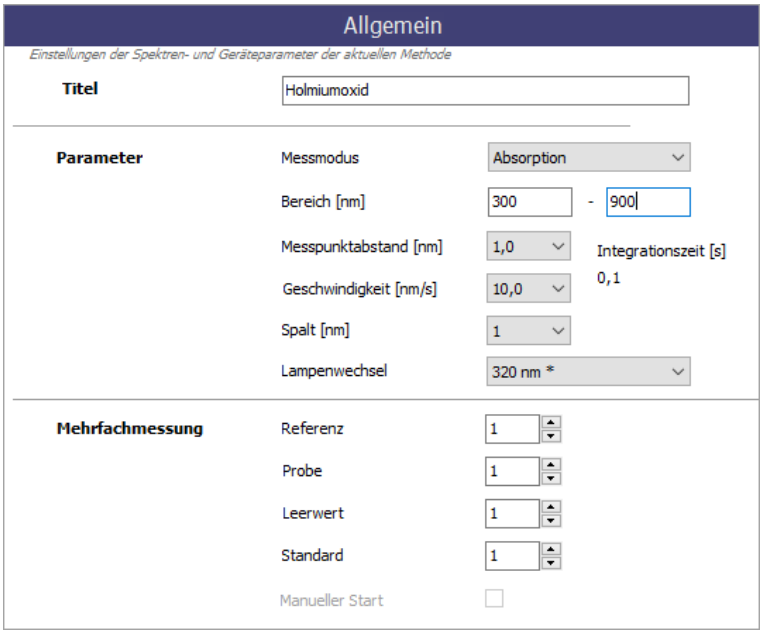
Methodenparameter festlegen

- Im Dokumentfenster auf **Methode einstellen** klicken.
- Auf den Seiten des Methodenfensters **Spektrum - Einstellungen** die Parameter eingeben (siehe unten).
- Parametereingabe mit einem Klick auf **Ok** bestätigen und in das Dokumentfenster zurückkehren.

Parametereinträge

Nehmen Sie die Einträge entsprechend den Screenshots vor.

Seite Allgemein



Seite Messzyklen

Keine Einträge vornehmen.

Seite Start Messung

Keine Einträge vornehmen.

Seite Zubehör

Keine Einträge vornehmen.

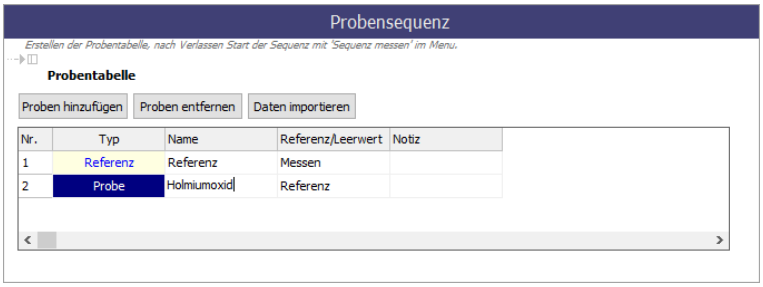
Seite Auswertung

Keine Einträge vornehmen.

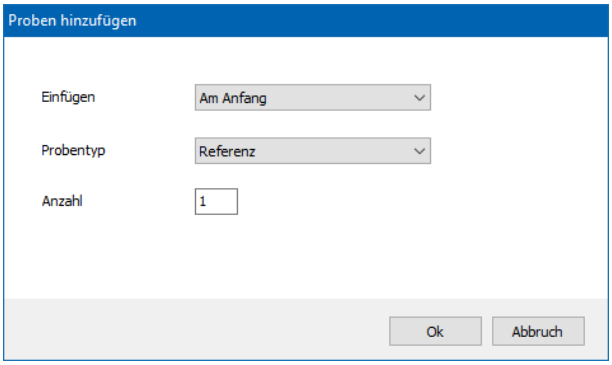
Seite Kalibration

Keine Einträge vornehmen.

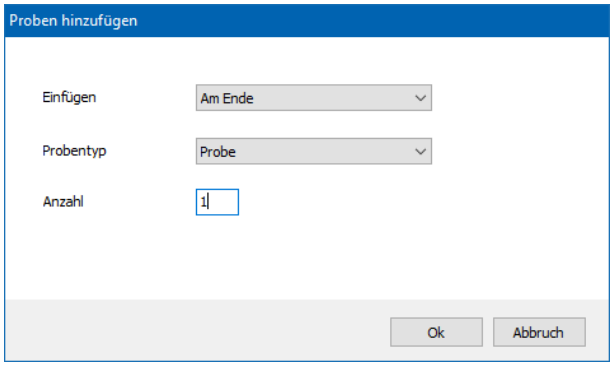
Seite Probensequenz



- Auf **Proben hinzufügen** klicken und eine Referenz an den Anfang der Probentabelle setzen:



- Noch einmal auf **Proben hinzufügen** klicken und eine Probe an das Ende der Probentabelle anfügen:



- In der ersten Zeile der Probentabelle im Feld **Name** "Referenz" eingeben und mit der ENTER-Taste bestätigen.
- In der zweiten Zeile der Probentabelle als Namen "Holmiumoxid" eingeben und mit der ENTER-Taste bestätigen.

Seite Automatisch archivieren

Keinen Eintrag vornehmen.

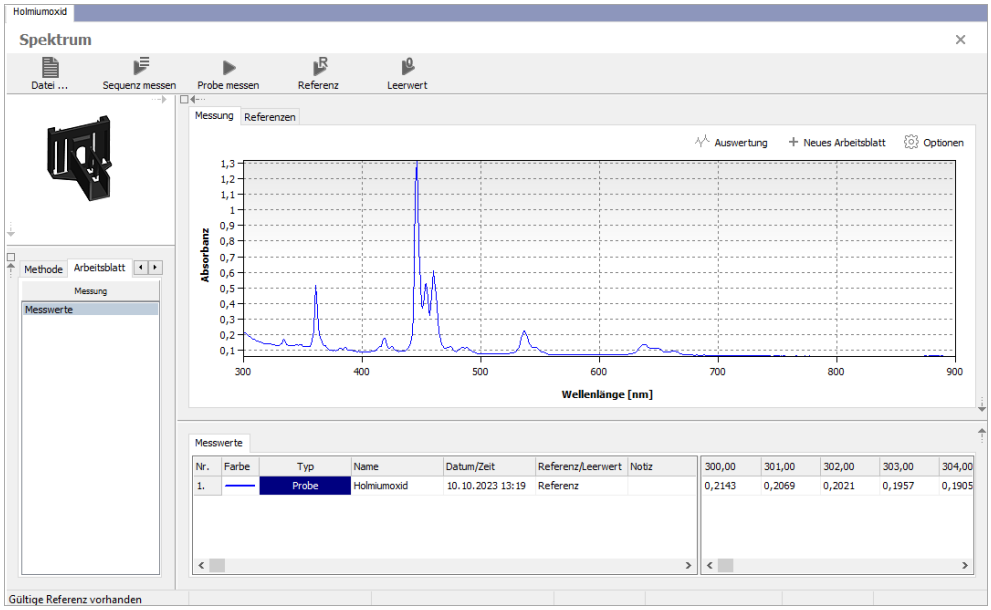
Seite Notiz

"Beispiel für Spektren-Scan" eingeben.

Messung ausführen

- Im Dokumentfenster auf klicken.
  Die Startinformation zur Messung der Referenz erscheint.
- Referenzprobe einsetzen und zum Start der Messung auf **Ja** klicken.
- Die Referenzmessung erfolgt. Aufforderung zur Messung der Probe 1 erscheint.
- Probe 1 einsetzen und zum Start der Messung auf **Ja** klicken.

Das Spektrum und die Messwerte werden auf dem Arbeitsblatt **Messung** ausgegeben.



8 Modul Kinetik

Im Modul **Kinetik** werden zeitabhängige Änderungen der Messwerte an einer Wellenlänge aufgenommen und ausgewertet.

Modul **Kinetik** öffnen

- Das Modul **Kinetik** mit einem Klick auf das Icon in der Startleiste öffnen.

- Alternativ den Menüpunkt **Module** | **Kinetik** wählen.
  - ✓ Auf der Arbeitsoberfläche wird ein neues Dokument geöffnet.
- Mit jedem weiteren Klick auf das Icon wird ein weiteres neues Dokument auf der Arbeitsoberfläche geöffnet.

Alle Funktionen der Dokumentfenster im Modul **Kinetik** sind den Kinetikmessungen an einer einzelnen Wellenlänge und der entsprechenden Auswertung zugeordnet. Sie können nun eine Methode erstellen und auf deren Grundlage eine Messung mit Auswertungen starten.

8.1 Methodeneinstellung im Modul Kinetik

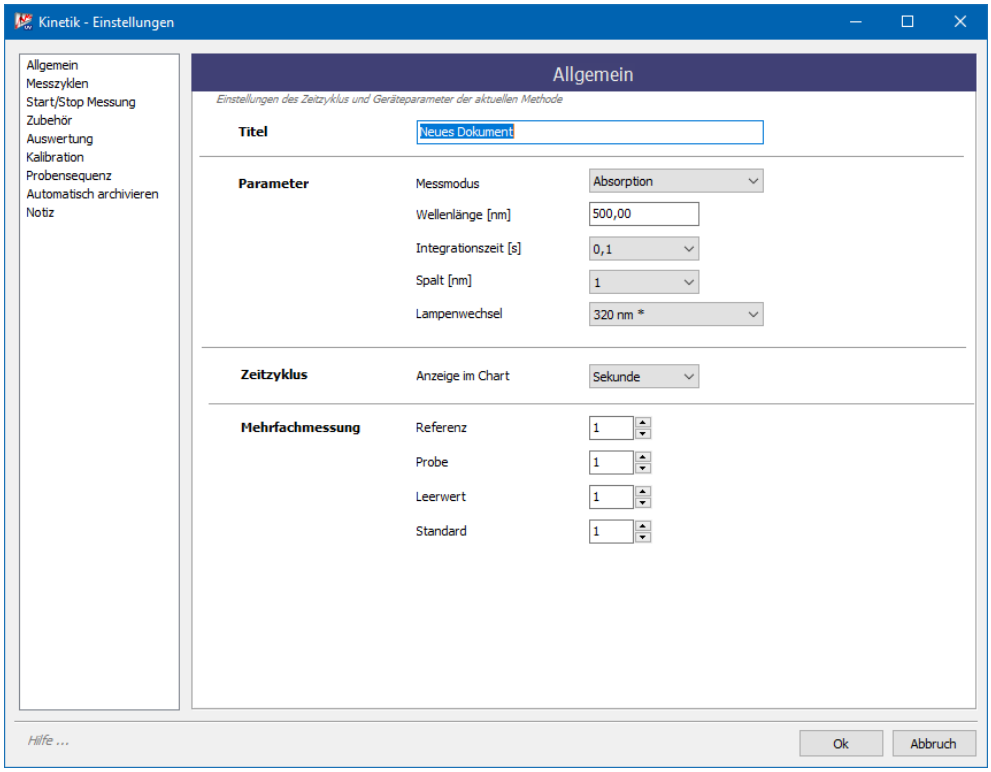
Dieser Abschnitt enthält alle Einstellungen, die für eine Methode im Modul **Kinetik** getroffen werden können.

Methode erstellen

- Im Dokumentfenster mit einem Klick auf **Methode einstellen** das Methodenfenster öffnen.
- Die Einstellungen auf den Seiten des Methodenfensters vornehmen.
- Die Eingabe der Parameter mit Klick auf **Ok** abschließen.
  - ✓ Die Methodenparameter werden auf der linken Seite des Dokumentfensters auf dem Tab **Methode** ausgegeben. Die Icons für den Messstart erscheinen in der Werkzeugleiste des Dokumentfensters.

8.1.1 Kinetik - Einstellungen | Allgemein

Auf der Seite **Allgemein** werden die grundlegenden Messeinstellungen vorgenommen.



Titel

Hier geben Sie den Titel des Dokuments ein, der im Reiter des Dokuments angezeigt wird. Den Titel können Sie später editieren.

Parameter

In diesem Bereich wählen Sie die Parameter für die optische Messung.

Option	Beschreibung
Messmodus	Folgende Messmodi sind wählbar: ■ **Transmission** ■ **Absorption**
Wellenlänge [nm]	Wellenlänge für die Analyse eingeben
Integrationszeit [s]	Zeit für die Aufnahme eines Messpunkts auswählen
Spalt [nm]	Für SPECORD 210/250 PLUS Spektrale Spaltbreite (optische Auflösung) auswählen: 0,2; 0,5; 1; 2; 4 nm **Hinweis**: In älteren SPECORD 210/250 PLUS wurde der Spalt 0,2 nm noch nicht eingebaut. Für diese Geräte steht er nicht zur Auswahl.
Lampenwechsel	Wellenlänge des Wechsels von UV-Lampe auf Vis-Lampe auswählen Der voreingestellte Lampenwechsel bei 320 nm gewährleistet eine optimale Energieverteilung über den gesamten Wellenlängenbereich des Spektrometers. Wenn Sie nur im UV-Bereich oder Vis-Bereich arbeiten, können Sie auch mit den Optionen **nur UV** oder **nur Vis** mit der gewählten Lampe messen.

Zeitzyklus

Option	Beschreibung
Einheit der X-Achse	Zeiteinheit für die X-Achse der Kinetikkurve wählen

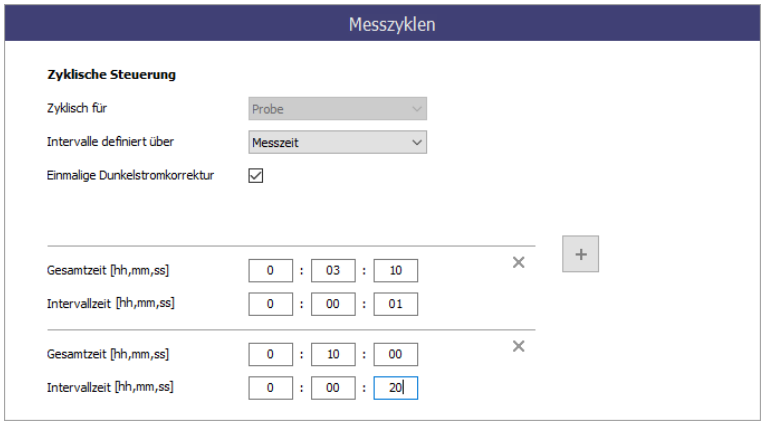
Mehrfachmessung

Sie können zu jedem Messzeitpunkt der zeitzyklischen Messung zusätzlich eine Messwiederholung definieren. In den weiteren Auswertungen wird immer der Mittelwert der Messwiederholung verwendet.

Option	Beschreibung
Mehrfachmessung	Bei Bedarf für die Probentypen **Referenz**, **Leerwert**, **Probe** und **Standard** die Anzahl Messwiederholungen eingeben.

8.1.2 Kinetik - Einstellungen | Messzyklen

Auf der Seite **Messzyklen** definieren Sie die Parameter für die Kinetikmessung.



Parameter für die Kinetikmessung

Option	Beschreibung
Zyklisch für	Nur bei Verwendung von Küvettenwechslern oder APG **Probe** Die gesamte reaktionskinetische Messung wird an einer Probe ausgeführt und anschließend die Messung in der nächsten Probe gestartet. Auf diese Weise werden nacheinander alle Proben in der Sequenz abgearbeitet. Die Messung eignet sich für eine schnelle Reaktionskinetik. Wenn die Reaktion jeweils unmittelbar vor der Messung gestartet werden soll, muss auf der Seite **Start/Stopp Messung** die Option **Manueller Start** aktiviert werden. **Charge** In diesem Modus erfolgen die Probenmessungen gestaffelt. Innerhalb eines Intervalls werden alle Proben der Sequenz, beginnend mit der 1. Probe, gemessen. Anschließend beginnt das nächste Intervall erneut mit der Messung der 1. Probe. Auf diese Weise wird die Messung bis zum letzten Intervall fortgesetzt. Es wird jeweils eine Charge des Küvettenwechslers/APG gemessen. Sind alle Messungen für diese Charge (entweder proben- oder chargenweise) abgearbeitet, werden die Proben im Zubehör ausgetauscht und die Messung der nächsten Charge wird gestartet.
Intervalle definiert über	**Messpunkte** Für die Messung müssen die Anzahl der Messpunkte/Messwiederholungen und die Intervallzeit definiert werden. Die resultierende Gesamtmesszeit wird automatisch berechnet. **Messzeit** Für die Messung müssen die Intervallzeit und eine Gesamtmesszeit definiert werden. Die resultierende Anzahl der Messpunkte wird automatisch berechnet.
Einmalige Dunkelstromkorrektur	In der Voreinstellung ist diese Option aktiviert. Dabei wird vor der ersten Messung der Dunkelstrom ermittelt und die Messwerte damit korrigiert. Wenn die Option deaktiviert ist, erfolgt vor jeder Messung eine Dunkelstromkorrektur.

Option	Beschreibung
+	Zeitabschnitt einfügen Bei zeitgesteuerten zyklischen Messungen können mehrere Zeitabschnitte mit jeweils unterschiedlichen Intervallzeiten festgelegt werden.

Einstellungen für zyklische Messungen über die Gesamtmesszeit

In dieser Einstellung geben Sie für die Kinetikmessung die Gesamtmesszeit und die Intervallzeiten ein.

- In der Liste **Intervalle definiert über** die Option **Messzeit** wählen.
- In der Liste **Zeitabstände für** die Option **Intervalle** wählen.
- Auf + klicken.
  - ✓ Der erste Zeitabschnitt wird eingefügt.
- Im Parameter **Gesamtzeit** die Gesamtmesszeit eintragen.
- Im Parameter **Intervallzeit** die Zeit zwischen 2 aufeinanderfolgenden Messungen eintragen.
  - ✓ Der erste Zeitabschnitt ist definiert.
- Bei Bedarf erneut auf + klicken und weitere Zeitabschnitte anfügen.

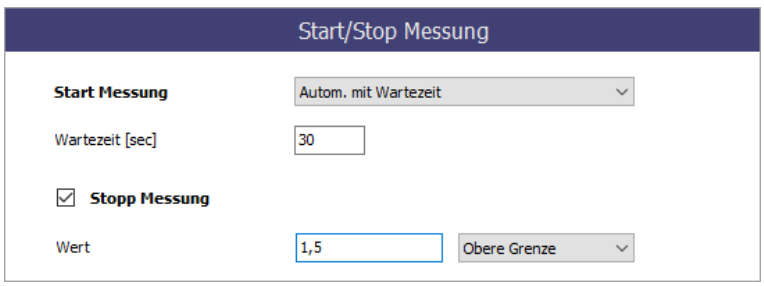
Einstellungen für zyklische Messungen über die Anzahl Messpunkte

Hier definieren Sie die Kinetikmessung über die Eingabe der Anzahl an Messpunkten und der Intervallzeit.

- In der Liste **Intervalle definiert über** die Option **Messpunkte** wählen.
- In der Liste Zeitabstände für die Option **Intervalle** wählen.
- Auf + klicken.
  - ✓ Der erste Zeitabschnitt wird eingefügt.
- Im Parameter **Messpunkte** die Anzahl Messwiederholungen eintragen. Bei der Messung wird ein Messpunkt mehr als die eingegebene Anzahl erzeugt, weil bereits zum Start der Messung ein Messpunkt erzeugt wird.
- Im Parameter **Intervallzeit** die Zeit zwischen 2 aufeinanderfolgenden Messungen eintragen.
  - ✓ Der erste Zeitabschnitt ist definiert.
- Bei Bedarf erneut auf + klicken und weitere Zeitabschnitte anfügen.

8.1.3 Kinetik - Einstellungen | Start/Stopp Messung

Den Messstart einer Probe definieren Sie auf der Seite **Start/Stopp Messung**.



Option	Beschreibung
Autom. ohne Wartezeit	Die Messung beginnt sofort nach Klick auf oder .
Autom. mit Wartezeit	Nach Klick auf oder beginnt die Messung erst nach Ablauf der Wartezeit.

Option	Beschreibung
Manuell ohne Wartezeit	Nach Klick auf oder erscheint eine Rückfrage zum Start der Messung. Bei Beantwortung mit **Ja** beginnt die Messung sofort.
Manuell mit Wartezeit	Nach Klick auf oder erscheint eine Rückfrage zum Start der Messung. Bei Beantwortung mit **Ja** läuft zunächst die Wartezeit ab und danach startet die Messung.
Wartezeit	Zeitverzögerung für Startoptionen mit Wartezeit

Optional kann ein Abbruchkriterium für die Kinetikmessungen gewählt werden.

Option	Beschreibung
Stopp Messung	**Wert** Bei Erreichen dieses Grenzwertes stoppt die Messung. Die Einheit richtet sich nach dem auf der Seite **Allgemein** ausgewähltem Messmodus. **Obere Grenze/Untere Grenze** Je nach erwarteten Kurvenverlauf muss eine der Grenzoptionen ausgewählt werden.

8.1.4 Kinetik - Einstellungen | Zubehör

Die Parameter auf der Seite **Zubehör** hängen vom installierten Zubehör ab.

Sehen Sie dazu auch

Zubehöre verwenden [▸ 41]

8.1.5 Kinetik - Einstellungen | Auswertung

Auf der Seite **Auswertung** können folgende Messwertauswertungen definiert werden:
- Messwerte an definierten Zeitpunkten bestimmen
- Berechnung von Formeln

Werte def. Zeiten

Messwerte an ausgewählten Zeitpunkten werden in der Probentabelle angezeigt und können zur Auswertung in einer Formel oder in der Kalibration herangezogen werden.

- Zur Auswahl der Messwerte die Option **Werte def. Zeiten** aktivieren.
- Auf + klicken und in den Eingabefeldern die gewünschte Zeit eintragen. Mit Klick auf + in die Liste übertragen.
- Zum Löschen den Wert in der Liste markieren und auf - klicken.

Formel

Sie können die Messwerte einer oder mehrerer Proben in einer Formel verknüpfen.

Sehen Sie dazu auch

Formeln verwenden [▸ 37]

8.1.6 Kinetik - Einstellungen | Kalibration

Auf der Seite **Kalibration** können Sie eine Auswertung mit einer Kalibration vereinbaren.

Für die Kalibration mit Standards aktivieren Sie die Option **Kalibration** und nehmen Sie folgende Einstellungen vor:

Option	Beschreibung
Auswahl	**Neu erstellen** Kalibration innerhalb der folgenden Messserie aufnehmen In der Probensequenz müssen Sie die Standardproben und deren Konzentration definieren. **Aus Datei laden** Kalibrierparameter aus einer vorhandenen Methode laden
Regression	Regressionstyp der Kalibrierfunktion $y = B * x$ $y = A + B * x$ $y = A + B * x + C * x^2$
Einheit	Einheit des Analysenergebnisses
Schichtdicke	Schichtdicke der Küvette Dieser Wert dient nur zur Information und wird mit den Methodenparametern gespeichert.
Grenzwert	Einen oberen oder unteren Grenzwert für das Analysenergebnis festlegen Ergebnisse, die oberhalb bzw. unterhalb dieses Grenzwertes liegen, werden in der Ergebnistabelle mit "!" gekennzeichnet.

Das Modul **Kinetik** kann verschiedene Werte aus der zeitaufgelösten Messkurve zur Kalibration heranziehen:

Option	Beschreibung
Anstieg	Anstieg der gesamten Kinetikkurve vom Start- bis zum Endzeitpunkt der Messung Der Bereich kann nach der Messung eingegrenzt werden.
Maximum zwischen t1 und t2	Maximum des Kinetik-Charts zwischen den Zeitpunkten **Zeit Beginn** und **Zeit Ende**
Formel	Ergebnis einer Formelberechnung Mit einem Klick auf ... erscheint der Formeleditor.
Lineweaver-Burk	Reziproke Reaktionsgeschwindigkeit 1/v

Sehen Sie dazu auch

Formeln verwenden [▶ 37]

8.1.7 Kinetik - Einstellungen | Probensequenz

Auf der Seite **Probensequenz** können Sie die Reihenfolge der Proben für eine folgende Messung bestimmen, die Sie mit dem Icon im Dokumentfenster starten können. Eine Probensequenz können Sie auch direkt vor einer Messung erstellen.

Anforderung an die Probensequenz

- Die Aktivierung der Kalibration erfordert eine Eingabe einer Sequenz mit Standardproben.
- Bei Verwendung von Küvettenwechslern und Probengebern werden die Proben den Probenplätzen im Zubehör zugeordnet.
- Wenn die Probensequenz leer ist, erscheint beim Messstart der Probensequenz zunächst das Fenster **Sequenz einstellen**. Das Fenster kann erst verlassen werden, wenn mindestens eine Probe definiert ist.

Sehen Sie dazu auch

Probensequenzen [▶ 30]

8.1.8 Kinetik - Einstellungen | Automatisch archivieren

Sie können die Messdaten und deren Auswertung automatisch speichern, exportieren und drucken. So können Sie Ihre Prozesse zur Archivierung der Daten vereinheitlichen und sicherstellen, dass Daten nicht verlorengehen. Auf der Seite **Automatisch archivieren** wählen Sie dazu die Zieldateien und Reportvorlagen. Zusätzlich müssen Sie im Fenster **Optionen** die automatische Archivierung programmweit aktivieren und den Zeitpunkt für die einzelnen Archivierungsfunktionen wählen.

Sehen Sie dazu auch

Messdaten automatisch archivieren [▶ 29]

8.1.9 Kinetik - Einstellungen | Notiz

Auf der Seite **Notiz** können Sie optional eine Notiz zur Methode eingeben.

8.2 Messungen im Modul Kinetik ausführen

Voraussetzung für einen Messstart ist, dass im Dokumentfenster eine Methode neu erstellt oder geladen wurde. Die Messung kann mit einer in der Methode hinterlegten Probensequenz oder als Einzelmessung gestartet werden.

Für die Messungen werden folgende Icons eingeblendet:

Icon	Beschreibung
Sequenz messen	Probensequenz starten Wenn Sie in den Messparametern keine Probensequenz hinterlegt haben, erscheint nach Klick auf dieses Icon das Fenster **Sequenz einstellen**. Das Fenster können Sie erst verlassen, wenn Sie mindestens eine Probe definiert haben.
Probe messen	Einzelne Probenmessung unabhängig von der eingestellten Probensequenz starten
Referenz	Referenz messen

Icon	Beschreibung
	Eine separate Referenzmessung ist nötig, wenn die Probensequenz nicht mit einer Referenzmessung beginnt oder keine Referenz, passend zu den aktuellen Methodenparametern, verfügbar ist.
Sequenz unterbrechen	Messung unterbrechen und zu einem späteren Zeitpunkt fortsetzen Die laufende Probenmessung wird fertig abgearbeitet. Die noch ausstehende Probensequenz wird anschließend angezeigt und kann editiert werden.
Pause	Die Messung stoppt sofort und kann mit **Weiter** fortgesetzt werden. Die Pause können Sie nutzen, um einer Probe eine Reagenz zuzusetzen.
Stopp	Laufende Messung stoppen und nicht fortsetzen
	Für Kassetten-Sipper-System und Probengeber APG verfügbar: Pumpe ein- bzw. ausschalten und Probe transportieren bzw. Transport stoppen
	Für Probengeber APG verfügbar: Probenkanüle absenken bzw. hochfahren
	Für Probengeber APG mit Rührfunktion verfügbar: Rührer ein- bzw. ausschalten

Referenz messen

Wenn keine Referenz an erster Stelle in der Probensequenz steht, muss die Referenz separat aufgenommen werden.

- Referenz im Probenraum platzieren.
- Auf **Referenz** klicken und Abfrage zur Referenzmessung bestätigen.
  - ✓ Die Referenzmessung wird ausgeführt. Alle folgenden Messungen werden mit dieser Referenz korrigiert, bis die Messparameter durch eine neue Methodeneinstellung geändert werden oder die nächste Referenzmessung erfolgt.

Erste Sequenz starten

Mit Start der Probensequenz werden die Proben in der Reihenfolge entsprechend der Probentabelle abgearbeitet.

- Die erste Probe der Sequenz im Probenraum platzieren bzw. Küvettenwechsler/APG mit Proben bestücken.
- Auf **Sequenz messen** klicken.
- Den weiteren Bildschirmaufforderungen zum Einsetzen der Proben und Start von Probenmessungen folgen.
  - ✓ Die Probensequenz wird abgearbeitet. Die Messwerte und Auswertungen werden im Dokumentfenster angezeigt.

Sequenz unterbrechen oder stoppen

Eine laufende Messung können Sie unterbrechen und fortführen oder endgültig stoppen.

- Auf **Stopp** klicken, um die Messung zu stoppen.
  - ✓ Die Messung der Sequenz wird gestoppt und kann nicht fortgesetzt werden. Bis zu diesem Zeitpunkt aufgenommene Messdaten bleiben erhalten und können weiter bearbeitet werden.
- Auf **Sequenz unterbrechen** klicken, um eine Messung zu unterbrechen und später fortzusetzen.
  - ✓ Der aktuelle Messschritt wird beendet und danach die Abarbeitung unterbrochen. Die Messpause können Sie nutzen, um die laufende Probensequenz anzusehen und zu editieren.

- Mit **Pause** können Sie eine laufende Probenmessung sofort unterbrechen, z. B. um einer Probe Reagenzien zuzusetzen. Mit Klick auf **Weiter** setzen Sie die Probenmessung fort.

Nächste Sequenz starten

Nach Abarbeitung der ersten Probensequenz können Sie die Sequenz weitere Male starten oder nacheditieren. Dies ist auch möglich, wenn das Dokument bereits gespeichert und zur Anzeige der Ergebnisse erneut geöffnet wurde.

- Auf klicken.
  Das Fenster **Sequenz einstellen** mit der in der Methode hinterlegten Sequenz erscheint.
- Bei Bedarf eine neue Sequenz zusammenstellen.
- Die Einstellungen im Fenster **Sequenz einstellen** mit Klick auf **Ok** bestätigen.
- Den weiteren Bildschirmaufforderungen zum Einsetzen der Proben und Start von Probenmessungen folgen.
  - ✓ Die aktuelle Sequenz wird abgearbeitet und die Daten an die vorhandene Messwerttabelle und Auswertungen angehängt.

Einzelmessungen ausführen

Sie können unabhängig von der eingestellten Sequenz einzelne Proben des Probentyps **Probe** messen und an die Messwerttabelle und Auswertungen anhängen.

- Probe im Probenraum platzieren.
- Auf **Probe messen** klicken.
- Den weiteren Bildschirmaufforderungen zum Messstart folgen.
  - ✓ Die Messung erfolgt und die Daten werden an vorhandene Messwerte und Auswertungen angehängt.

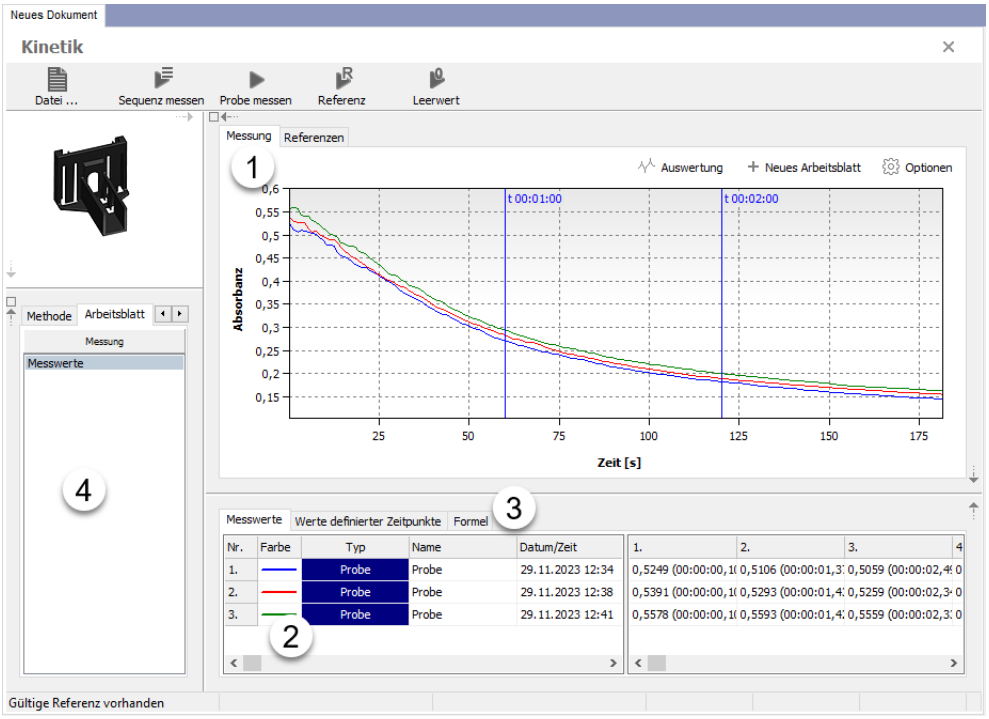
Tipp

Wenn Messungen anderer Probentypen angehängt werden sollen, klicken Sie auf **Sequenz messen** und geben Sie eine Sequenz mit den entsprechenden Proben ein.

8.3 Ergebnisse im Modul Kinetik anzeigen, auswerten und bearbeiten

In diesem Abschnitt werden nur die Besonderheiten der Ergebnisanzeige und Auswertung im Modul **Kinetik** erläutert.

Dokumentfenster im Modul Kinetik mit mehreren Kinetikkurven



Nr.	Beschreibung
1	Arbeitsblätter mit der Anzeige der Proben- und Referenzspektren und weitere Auswertungen
2	Tab **Messwerte** mit den Einzelmesswerten der Proben
3	Tabs mit Datenauswertungen
4	Tab mit Informationen zu Methodeneinstellungen und mathematischen Datenbehandlungen auf den Arbeitsblättern

Arbeitsblatt Messung

Das Arbeitsblatt **Messung** enthält die Messdaten. In der oberen Hälfte des Arbeitsblatts werden die Spektren angezeigt.

Auf dem Tab **Messwerte** in der unteren Hälfte des Arbeitsblatts sind die Probentabelle mit der Reihenfolge der Messungen und die Tabelle mit den digitalen Messwerten angeordnet. Die weiteren Tabs enthalten Datenauswertungen, die schon in der Methode festgelegt wurden. Diese Auswertungen können Sie ergänzen und editieren.

Zeitanzeige der Kinetikkurve

Die Anzeige der x-Koordinate der Kinetikkurve kann zwischen Stunden, Minuten und Sekunden gewechselt werden.

- Menüpunkt **Optionen** | **Einheit der X-Achse** wählen und im Untermenü die Einheit aktivieren.

  ✓ Die Anzeige der Kinetikkurve und der Anstieg werden aktualisiert.

Neues Arbeitsblatt

Sie können im Dokumentfenster weitere Arbeitsblätter erzeugen und auf ihnen weitere Auswertungen vornehmen. Auf diese Weise können Sie in einem Dokument (Datei) verschiedene Auswertungen nebeneinander anlegen. Das Arbeitsblatt **Neues Arbeitsblatt** wird nach einem Klick auf den Menüpunkt + **Neues Arbeitsblatt** auf dem Arbeitsblatt **Messung** angelegt. Die unbearbeiteten, originalen Messdaten werden zunächst in das neue Arbeitsblatt kopiert und können dann bearbeitet werden.

Probentabelle

Die Anzeige der Probentabelle kann frei konfiguriert werden. Nach einem Rechtsklick auf den Kopf der Tabelle können im Kontextmenü folgende Parameter gewählt werden:

- Nummer in der Sequenzreihenfolge
- Position im Zubehör bei Verwendung von Küvettenwechsler oder Probengeber
- Farbe der Messkurve im Chart
- Charge bei Verwendung von Küvettenwechsler oder Probengeber

- Probenbezeichnung
- Probentyp
- Datum und Zeitpunkt der Messung
- Anstieg
- Absolutwert (y-Achsenabschnitt der linearen Regressionsfunktion)
- Bereichsgrenzen des Anstiegs
- Bestimmtheitsmaß
- Temperatur bei Methoden mit peltiertemperierten Zubehör
- Notiz
- Probenkonzentration bei Konzentrationsbestimmungen mit Kalibration
- Verdünnung und Einwaage
  Diese Eingaben werden nur bei Konzentrationsbestimmungen mit Kalibration berücksichtigt.
- Probenspezifische Variablen A – H für die Berechnungen in Formeln

Per Drag&Drop kann die Reihenfolge der Spalten in der Tabelle verändert werden.

Die Einzelmessungen für jede Probe sind daneben in einer separaten Tabelle aufgeführt.

Sehen Sie dazu auch

Spektren und Messkurven auf dem Arbeitsblatt anzeigen [▷ 19]

8.3.1 Kinetikkurven auswerten

Die in der Methode angebotenen Datenauswertungen können Sie auch nachträglich vornehmen. Die Funktionen sind im Menü **Auswertung** zusammengefasst, das auf jedem Arbeitsblatt zur Verfügung steht. Die Auswertungen beziehen sich immer auf die Messwerte des jeweiligen Arbeitsblatts. Wenn die Messwerte mit mathematischen Funktionen bearbeitet werden, wird die Auswertung auf diesem Arbeitsblatt entsprechend angepasst.

Die Auswertungen werden im unteren Teil des Arbeitsblatts auf einem eigenen Tabellenblatt ausgegeben.

Auswertung editieren

Bei vorhandenen Auswertungen können Sie die Auswerteparameter editieren.

▶ Auf dem Tabellenblatt der Auswertung auf **Einstellungen** klicken und im Dialogfenster die Auswerteparameter ändern.

✓ Die Auswertung wird aktualisiert.

Auswertung löschen

Nichtbenötigte Auswertungen können Sie löschen.

▶ Auf dem Tabellenblatt der Auswertungen rechts oben auf ✕ klicken.

✓ Die Auswertung wird vom Arbeitsblatt entfernt.

Bereich der Anstiegsberechnung

Die Anstiegsberechnung erfolgt zunächst über die gesamte Kinetikkurve. Nach Ende der Messung können Sie diesen Bereich eingrenzen und nur einen Ausschnitt der Reaktionskinetik, idealerweise den lineare Teil, für die Berechnung heranziehen.

▶ Wenn der Anstieg nur für einzelne Proben berechnet wird, auf dem Arbeitsblatt diese Proben markieren.

▶ Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Bereich der Anstiegsberechnung** wählen.

▶ Zeitpunkte für den Beginn und Ende des linearen Bereichs eingeben.

▶ In der Liste die Proben wählen, für die der Anstieg berechnet wird:
Für alle Messungen: Die Berechnung wird für alle Proben ausgeführt.
Nur für markierte Messungen: Die Berechnung wird nur für die vorher markierten Proben ausgeführt.

✓ Die Werte **Anstieg** und **Absolutwert** werden in der Messwerttabelle aktualisiert. Eventuelle Auswertungen werden ebenfalls nachberechnet.

Werte an def. Zeiten

Mit der Funktion **Werte an def. Zeiten** werden Messwerte zu ausgewählten Zeiten in einer Tabelle zusammengefasst.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Werte an def. Zeiten** wählen.
- Auf + klicken, in den Eingabefeldern den Messzeitpunkt wählen und mit erneutem Klick auf + in die Liste übertragen.

✓ Die Wertetabelle wird angezeigt.

Formel

Mit der Funktion **Formel** können Sie Messwerte einer oder mehrerer Proben in einer Formel verknüpfen.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Formel** wählen.
- Auf + klicken und die Formel mit dem Formeleditor erstellen.
- Bei Bedarf auf die gleiche Weise weitere Formeln hinzufügen.

✓ Die Ergebnisse werden auf dem Tab **Formel** angezeigt.

Kalibration

Die Funktion **Kalibration** ist verfügbar, wenn ein Dokument keine eigene Kalibration mit Standards enthält. Mit dieser Funktion können Sie nachträglich die Kalibrierdaten aus anderen Dateien laden und damit eine quantitative Analyse der Messwerte ausführen. Dabei werden nur die Kalibrierparameter und nicht die Standards geladen.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Kalibration** wählen.
- Die Option **Kalibration** aktivieren.
- Auf **Öffnen** klicken und Dokument mit der Kalibrierkurve auswählen.

✓ Das Tabellenblatt **Kalibration** mit der aktuellen Kalibrierkurve und den berechneten Kalibrierparametern wird angezeigt. Die Ergebnisse der Konzentrationsanalyse mit Kalibration werden direkt in die Probentabelle eingetragen. Konzentrationen, die außerhalb des kalibrierten Bereichs liegen, werden in Klammern gesetzt.

Das Tabellenblatt **Kalibration** enthält folgende Informationen:

- Quelle der Kalibrierkurve (in diesem Dokument gemessen oder aus einer Datei geladen)
- Regressionsmodell
- Analysenwellenlänge bzw. verwendete Formel der Kalibration
- Regressionskoeffizienten A, B und C, soweit im Regressionsmodell berechnet
- Bestimmtheitsmaß R^2
- Schichtdicke der Küvette (nur informativ, wird nicht in der Berechnung berücksichtigt)

8.3.2 Kinetikdaten mathematisch bearbeiten

Sie können folgende mathematische Operationen auf eine Kinetikkurve anwenden:
- Zuschneiden
- Glätten

Die Messdaten und vorhandene Auswertungen auf einem Arbeitsblatt werden daraufhin neu berechnet und aktualisiert. Die mathematischen Operationen können Sie aufeinanderfolgend im gleichen Arbeitsblatt anwenden.

Datenbearbeitung rückgängig machen

Das Protokoll über die ausgeführten Operationen finden Sie auf der linken Seite des Dokuments auf dem Tab **Arbeitsblatt**. Die Operationen sind dort der Reihe nach aufgelistet. Mit einem Klick auf die entsprechende Operation wird der Bearbeitungsschritt angezeigt. Auf diesem Tab können Sie Operationen rückgängig machen.

▶ Mit rechter Maustaste auf die letzte Operation klicken, die rückgängig zu machen ist.

▶ Im Kontextmenü eine der beiden Optionen auswählen:

– **Bis zu diesem Schritt in neues Arbeitsblatt kopieren**
Ein neues Arbeitsblatt wird geöffnet und die Daten mit der Änderungshistorie bis zur gewählten Operation dorthin kopiert. Im vorherigen Arbeitsblatt bleiben alle Operationen erhalten.

– **Operation löschen**
Alle Schritte inklusive der gewählten Operation werden im aktuellen Arbeitsblatt gelöscht.

✓ Die Operationen werden entsprechend der gewählten Option in ein neues Arbeitsblatt kopiert oder rückgängig gemacht.

Zuschneiden

Mit dieser Funktion wählen Sie einen Kurvenausschnitt für die Anzeige und weitere Bearbeitung/Auswertung aus. Die Werte außerhalb des gewählten Bereichs werden nicht mehr berücksichtigt.

▶ Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Zuschneiden** wählen.

✓ Der Cursor wandelt sich in eine senkrechte Linie mit der Bezeichnung "Range".

▶ Auf die linke oder rechte Begrenzung des auszuschneidenden Abszissenbereichs klicken und mit gedrückt gehaltener Maustaste den Cursor bis zur anderen Begrenzung ziehen. Dann die Maustaste loslassen.

▶ Alternativ im Fenster **Zuschneiden** in den Feldern **Beginn** und **Ende:** die Bereichsgrenzen eingeben.

▶ Die Eingabe im Fenster **Zuschneiden** mit Klick auf **Ok** bestätigen.

✓ Die Kurvendarstellung wird aktualisiert. Sichtbar ist nur noch der ausgewählte Bereich der Messkurve.

Glätten

Mit dieser Funktion wird die Kurve nach dem Verfahren Savitzky-Golay geglättet.

▶ Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Glätten** wählen.

▶ In der Dropdown-Liste **Stützstellen** die Anzahl zu betrachtender Punkte für die Glättung nach Savitzky-Golay auswählen.

✓ Die Kurve wird neu berechnet und die Anzeige aktualisiert.

8.4 Beispielmessung im Modul Kinetik

Als Beispiel dient eine Kinetikmessung bei 500 nm über einen Zeitraum von 30 s. Die Beispielmessung kann mit leerem Probenraum erfolgen.

Folgende Schritte müssen ausgeführt werden:

1. Dokument im Modul anlegen.
2. Methode öffnen und Parameter eingeben.
3. Messung starten.

Dokument anlegen

- Den Menüpunkt **Module** | **Kinetik** wählen oder auf das Icon in der Startleiste klicken.

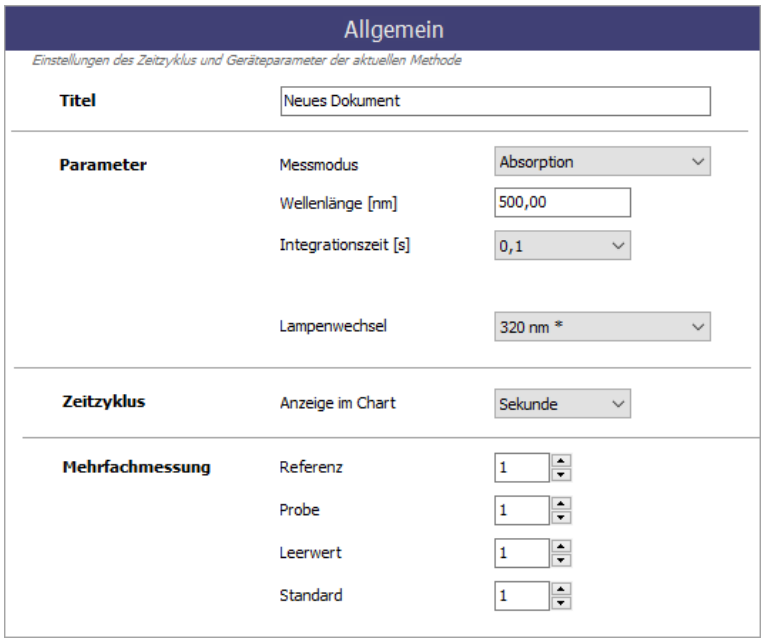
Methodenparameter festlegen

- Im Dokumentfenster auf **Methode einstellen** klicken.
- Auf den Seiten im Methodenfenster **Kinetik - Einstellungen** die Parameter eingeben (siehe unten).
- Parameter im Methodenfenster mit einem Klick auf **Ok** bestätigen und in das Dokumentfenster zurückkehren.

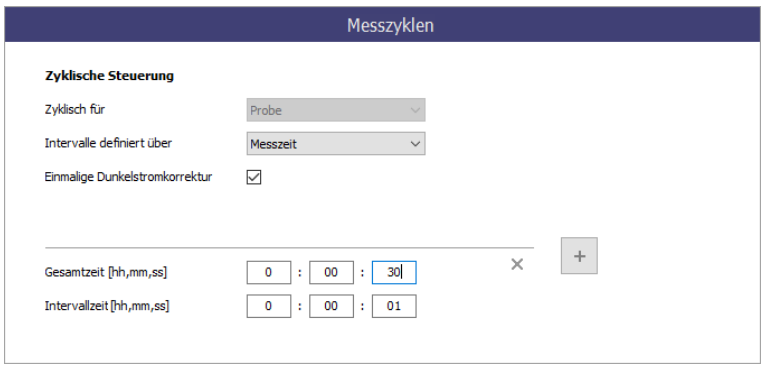
Parametereinträge

Nehmen Sie die Einträge entsprechend den Screenshots vor.

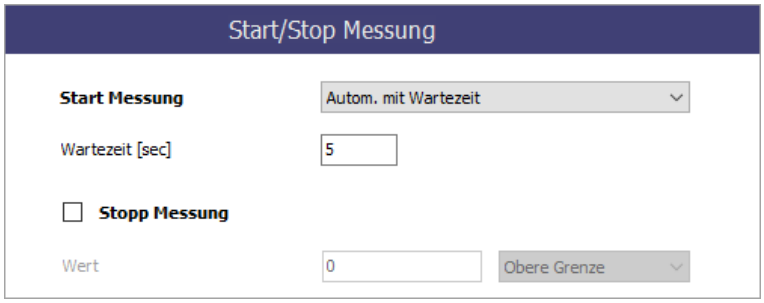
Seite Allgemein



Seite Messzyklen



Seite Start/Stopp Messung



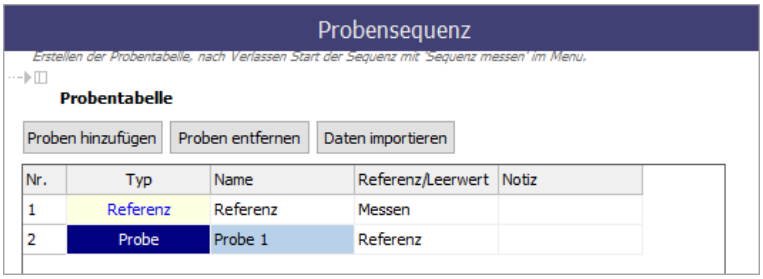
Seite Auswertung

Keine Einträge vornehmen.

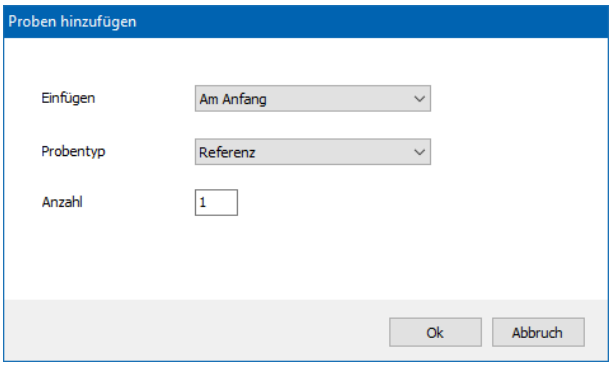
Seite Kalibration

Keine Einträge vornehmen.

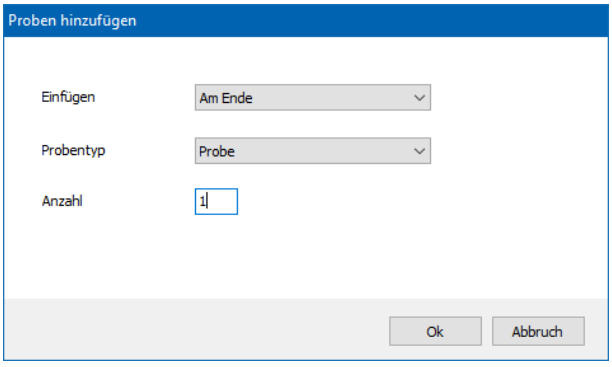
Seite Probensequenz



- Auf **Proben hinzufügen** klicken und Referenz an den Anfang der Probentabelle setzen:



- Noch einmal auf **Proben hinzufügen** klicken und eine Probe an das Ende der Probentabelle anfügen:



- In der ersten Zeile der Probentabelle als Namen "Referenz" eingeben und mit der Enter-Taste bestätigen.
- In der zweiten Zeile der Probentabelle als Namen "Probe 1" eingeben und mit der Enter-Taste bestätigen.

Seite Automatisch archivieren

Keinen Eintrag vornehmen.

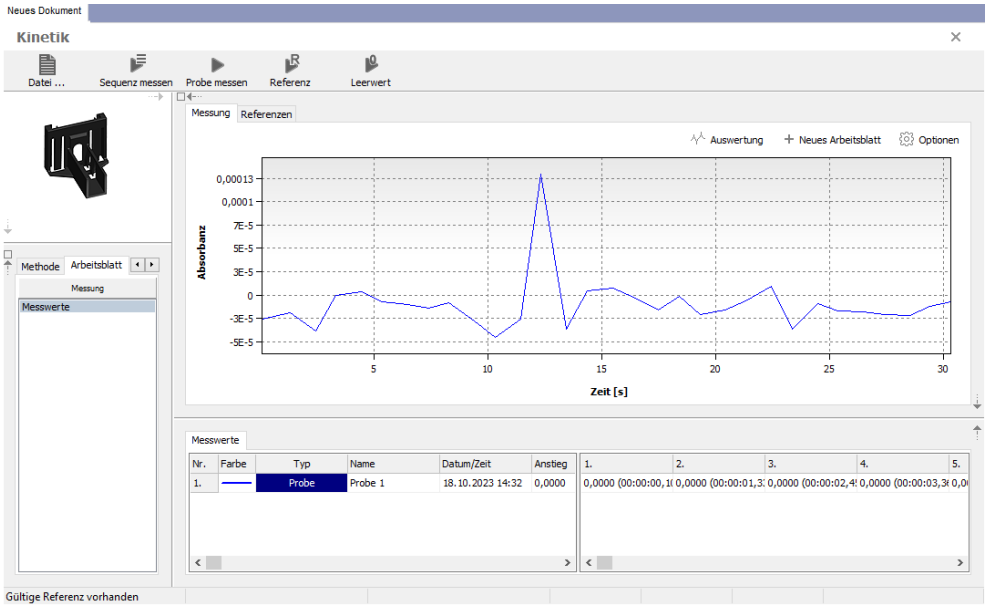
Seite Notiz

Keinen Eintrag vornehmen.

Messung ausführen

- Im Dokumentfenster auf klicken.
  Die Startinformation zur Messung der Referenz erscheint.
- Referenzprobe einsetzen und zum Start der Messung auf **Ja** klicken.
- Die Referenzmessung erfolgt. Aufforderung zur Messung der Probe 1 erscheint.
- Probe 1 einsetzen und zum Start der Messung auf **Ja** klicken.

Die Kinetikkurve und die Messwerte werden auf dem Arbeitsblatt **Messung** ausgegeben.


Neues Dokument
Kinetik
Datei ...
Sequenz messen
Probe messen
Referenz
Leerwert
Messung
Referenzen
Auswertung
Neues Arbeitsblatt
Optionen
0,00013
0,0001
7E-5
5E-5
3E-5
0
-3E-5
-5E-5
Absorbanz
5
10
15
20
25
30
Zeit [s]
Methode
Arbeitsblatt
Messung
Messwerte
Messwerte
Nr.
Farbe
Typ
Name
Datum/Zeit
Anstieg
1.
2.
3.
4.
5.
1.
Probe
Probe 1
18.10.2023 14:32
0,0000
Gültige Referenz vorhanden

9 Modul Thermometrie

Im Modul **Thermometrie** können Sie temperaturaufgelöste Messkurven mit einem peltiertemperierten Zubehör aufnehmen und auswerten. Folgende Auswertungen stehen zur Verfügung:

- DNA-Schmelzpunkt bestimmen
- Bestimmung von Peaks
- Ausgabe der Messwerte an ausgewählten Temperaturen
- Verknüpfung der Messwerte in einer Formel

Modul Thermometrie öffnen

- Das Modul **Thermometrie** mit einem Klick auf das Icon in der Startleiste des Hauptfensters öffnen:

- Alternativ Menüpunkt **Module** | **Thermometrie** wählen.
  - ✓ Auf der Arbeitsoberfläche wird ein neues Dokument geöffnet.
- Mit jedem weiteren Klick auf das Icon wird ein weiteres neues Dokument auf der Arbeitsoberfläche geöffnet.

Alle Funktionen der Dokumentfenster des Moduls **Thermometrie** sind den Messungen von Temperaturkurven und deren Auswertungen zugeordnet. Sie können nun eine Methode erstellen und auf deren Grundlage eine Messung mit Auswertungen starten.

9.1 Methodeneinstellung im Modul Thermometrie

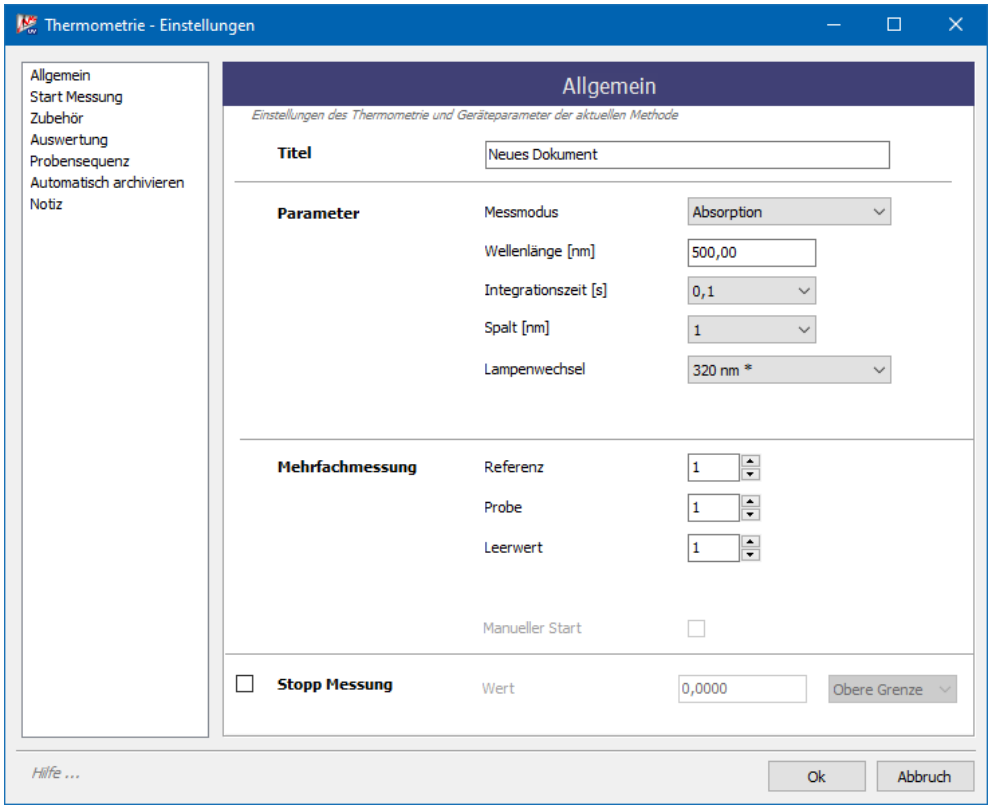
Dieser Abschnitt enthält alle Einstellungen die für eine Methode im Modul **Thermometrie** getroffen werden können.

Methode erstellen

- Im Dokumentfenster mit einem Klick auf **Methode einstellen** das Methodenfenster öffnen.
- Die Einstellungen auf den Seiten des Methodenfensters vornehmen.
- Die Eingabe der Parameter mit Klick auf **Ok** abschließen.
  - ✓ Die Methodenparameter werden auf der linken Seite des Dokumentfensters auf dem Tab **Methode** ausgegeben. Die Icons für den Messstart erscheinen in der Werkzeugleiste des Dokumentfensters.

9.1.1 Thermometrie - Einstellungen | Allgemein

Auf der Seite **Allgemein** werden die grundlegenden Messeinstellungen vorgenommen.



Titel

Hier geben Sie den Titel des Dokuments ein, der im Reiter des Dokuments angezeigt wird. Den Titel können Sie später editieren.

Parameter

In diesem Bereich wählen Sie die Parameter für die optische Messung.

Option	Beschreibung
Messmodus	Folgende Messmodi sind wählbar: ■ **Transmission** ■ **Absorption**
Wellenlänge [nm]	Wellenlänge für die Analyse eingeben
Integrationszeit [s]	Zeit für die Aufnahme eines Messpunkts auswählen
Spalt [nm]	Für SPECORD 210/250 PLUS Spektrale Spaltbreite (optische Auflösung) auswählen: 0,2; 0,5; 1; 2; 4 nm **Hinweis**: In älteren SPECORD 210/250 PLUS wurde der Spalt 0,2 nm noch nicht eingebaut. Für diese Geräte steht er nicht zur Auswahl.
Lampenwechsel	Wellenlänge des Wechsels von UV-Lampe auf Vis-Lampe auswählen Der voreingestellte Lampenwechsel bei 320 nm gewährleistet eine optimale Energieverteilung über den gesamten Wellenlängenbereich des Spektrometers. Wenn Sie nur im UV-Bereich oder Vis-Bereich arbeiten, können Sie auch mit den Optionen **nur UV** oder **nur Vis** mit der gewählten Lampe messen.

Mehrfachmessung

Sie können eine Messung mehrfach hintereinander ausführen und den Mittelwert für die weiteren Berechnungen und Analysen verwenden. Bei Messungen mit sehr wenig Energie, z. B bei Proben mit hoher Absorption, kann dieses Verfahren das Signal-Rausch-Verhältnis verbessern und die Messgenauigkeit erhöhen.

Option	Beschreibung
Mehrfachmessung	Bei Bedarf für die Probentypen **Referenz**, **Leerwert**, **Probe** und **Standard** die Anzahl der Messwiederholungen eingeben Wenn die Option **Manueller Start** aktiviert ist, erfolgt für jede Einzelmessung innerhalb einer Wiederholung die Aufforderung zum Start.

Optional können Sie einen Messwert festlegen, bei dessen Erreichen die Messung gestoppt wird.

Option	Beschreibung
Stopp Messung	**Wert** Bei Erreichen dieses Messwertes stoppt die Messung. Die Einheit richtet sich nach dem ausgewähltem Messmodus. **Obere Grenze/Untere Grenze** Je nach erwarteten Kurvenverlauf muss eine der Grenzoptionen ausgewählt werden.

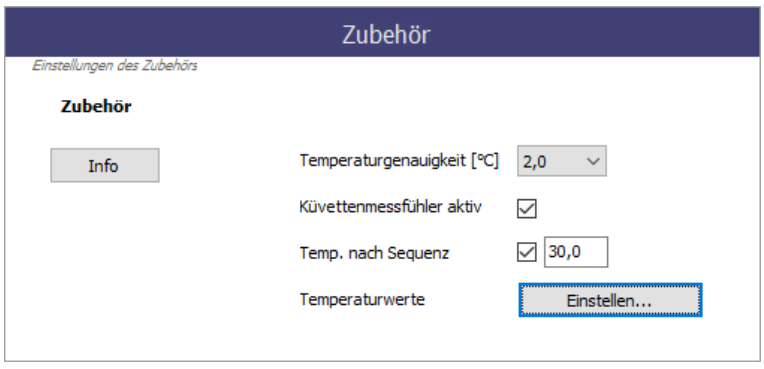
9.1.2 Thermometrie - Einstellungen | Start Messung

Den Messstart einer Probe definieren Sie auf der Seite **Start Messung**. Folgende Startoptionen stehen zur Verfügung:

Option	Beschreibung
Autom. ohne Wartezeit	Die Messung beginnt sofort nach Klick auf oder .
Autom. mit Wartezeit	Nach Klick auf oder beginnt die Messung erst nach Ablauf der Wartezeit.
Manuell ohne Wartezeit	Nach Klick auf oder erscheint eine Rückfrage zum Start der Messung. Bei Beantwortung mit **Ja** beginnt die Messung sofort.
Manuell mit Wartezeit	Nach Klick auf oder erscheint eine Rückfrage zum Start der Messung. Bei Beantwortung mit **Ja** läuft zunächst die Wartezeit ab und danach startet die Messung.
Wartezeit	Zeitverzögerung für Startoptionen mit Wartezeit

9.1.3 Thermometrie - Einstellungen | Zubehör

Auf der Seite **Zubehör** parametrisieren Sie die vom Zubehör angefahrene Temperaturkurve und nehmen bei Verwendung von 2 peltiertemperierten Küvettenwechslern die Einstellung des Betriebsmodus vor.



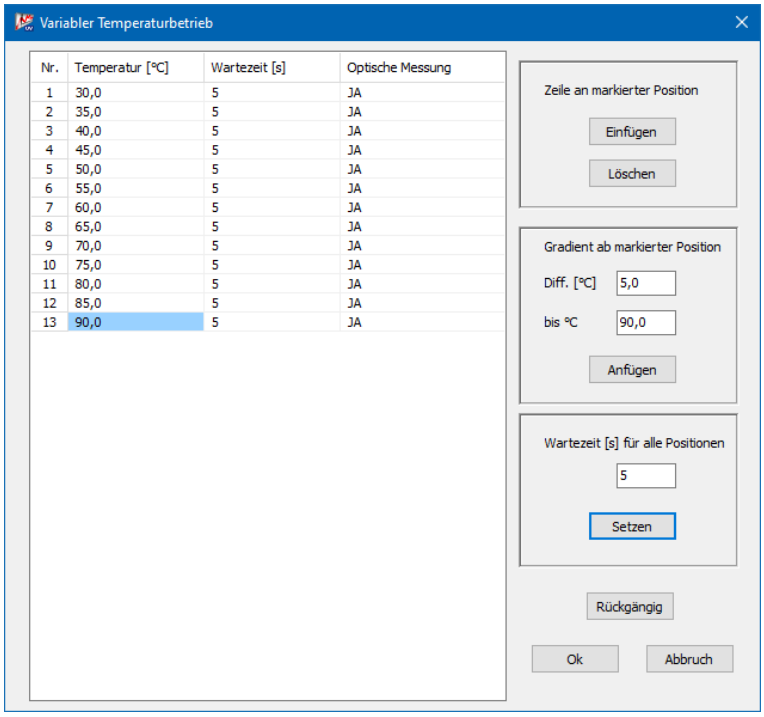
Temperierung einstellen

Option	Beschreibung
Temperaturgenauigkeit [°C]	Genauigkeit der Temperatursteuerung wählen
Küvettenmessfühler aktiv	Beim Start der Messung nach erreichter Solltemperatur im Temperaturregelgerät wird die Küvettentemperatur registriert. Der Messwert (Absorbanz/%T) wird der Küvettentemperatur zugeordnet. Die Temperaturmessung ist damit genauer als die Probenblocktemperatur. Wenn die Option nicht aktiviert ist, wird die Blocktemperatur (Regeltemperatur) erfasst und als Abszissenwert im Modul **Thermometrie** angegeben.
Temp. nach Sequenz	Haltetemperatur nach der optischen Messung aktivieren Diese Temperatur wird nach der letzten optischen Messung angefahren und gehalten.
Info	Information über den einstellbaren Temperaturbereich und die aktuellen Temperaturen im Zubehör anzeigen

Temperaturverlauf eingeben

Nach einem Klick auf **Einstellen** erscheint das Fenster **Variabler Temperaturbetrieb**. Die Parameter der Temperaturstufen können in den Tabellenzeilen einzeln editiert oder mit den Kontroll- und Eingabefeldern automatisch festgelegt werden.

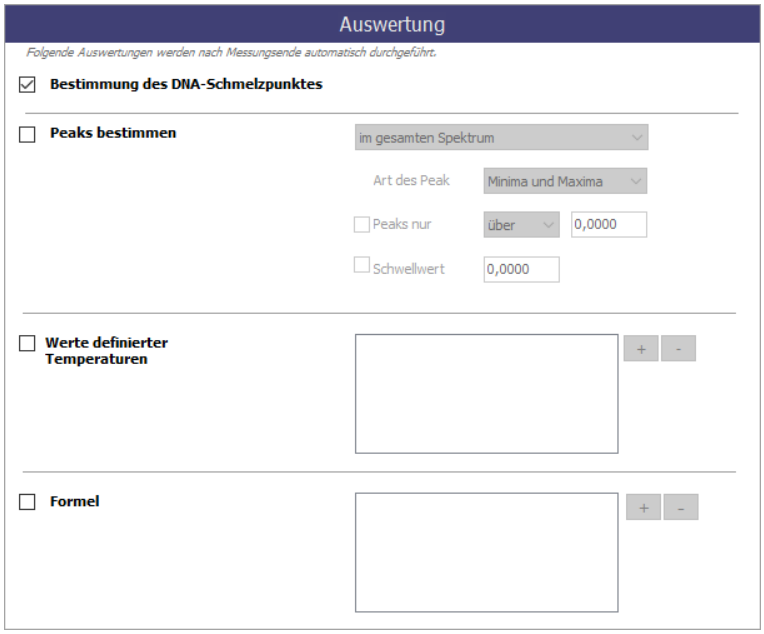
Option/Button	Beschreibung
Einfügen	Neuen Temperaturschritt nach der markierten Tabellenzeile einfügen
Löschen	Markierte Tabellenzeile löschen
Gradient ab markierter Position	Temperaturgradienten ab einer markierten Tabellenzeile automatisch erstellen. Beginnend mit der Starttemperatur der markierten Tabellenzeile werden schrittweise weitere Temperaturstufen in die Tabelle eingefügt, bis die Endtemperatur erreicht ist. **Diff. [°C]** Temperaturdifferenz einer Temperaturstufe **bis °C** Endtemperatur des Gradienten **Anfügen** Temperaturgradienten an markierte Position anfügen
Wartezeit [s] für alle Positionen	Wartezeit vom Erreichen der Solltemperatur bis zum Start der optischen Messung Mit Klick auf **Setzen** wird die eingetragene Temperatur in alle Temperaturstufen der Tabelle übertragen. **Hinweis**: Unabhängig von der eingestellten Wartezeit erfolgt die optische Messung erst 5 s nach Erreichen der Temperatur im Bereich der vereinbarten Temperaturgenauigkeit im Block. Die Wartezeit wird zu diesem 5-s-Zeitraum addiert.
Rückgängig	Letzte Aktion rückgängig machen
Optische Messung	**Ja** Am Temperaturschritt eine optische Messung ausführen **Nein** Am Temperaturschritt erfolgt keine optische Messung.



9.1.4 Thermometrie - Einstellungen | Auswertung

Auf der Seite **Auswertung** können Sie folgende Analysen wählen:

- Bestimmung des DNA-Schmelzpunktes
- Bestimmung von Peaks
- Anzeige der Messwerte an ausgewählten Temperaturen
- Eingabe von Formeln



Bestimmung des DNA-Schmelzpunktes

Bei Aktivierung der Option **Bestimmung des DNA-Schmelzpunktes** wird der Schmelzpunkt der DNA-Schmelzkurve ermittelt.

Peaks bestimmen

Mit Aktivieren des Kontrollkästchens **Peaks bestimmen** werden Extremwerte nach vorgegebenen Kriterien automatisch gesucht. Die Peaks werden in der grafischen Anzeige der Messkurve gekennzeichnet und auf einem gesonderten Tab im Auswertungsbereich ausgegeben.

Option	Beschreibung
Auswahlliste	**im gesamten Spektrum** Alle Peaks im Messbereich suchen **in definierten Teilbereichen** Peaks in definierten Spektrenbereichen suchen
Art des Peak	Art der gesuchten Peaks wählen: **Minima**, **Maxima** oder **Minima und Maxima**
Peaks nur	Absolute Grenze für die Anzeige der Peaks Peaks werden nur angezeigt, wenn sie über bzw. unter dem eingegebenen Ordinatenwert liegen.
Schwellwert	Differenz zwischen Peakhöhe und dem benachbarten darauffolgenden lokalen Maximum/Minimum Peaks werden nur angezeigt, wenn sie den eingegebenen Schwellwert überschreiten (Maximum) oder unterschreiten (Minimum).

Werte definierter Temperaturen

Sie können Messwerte an ausgewählten Temperaturen der Messkurve bestimmen. Diese Messwerte werden in der Probentabelle in den Auswertungen des Dokumentfensters angezeigt und können für die Berechnung einer Formel verwendet werden.

- Das Kontrollkästchen **Werte definierter Temperaturen** aktivieren.
- Auf + klicken, im Eingabefeld die Temperatur innerhalb des Temperaturbereichs wählen und mit erneutem Klick auf + in die Liste übertragen.

Formel

Sie können die Messwerte einer oder mehrerer Proben in einer Formel verknüpfen.

Sehen Sie dazu auch

Formeln verwenden [▸ 37]

9.1.5 Thermometrie - Einstellungen | Probensequenz

Auf der Seite **Probensequenz** können Sie die Reihenfolge der Proben für eine folgende Messung bestimmen, die Sie mit dem Icon im Dokumentfenster starten können. Eine Probensequenz können Sie auch direkt vor einer Messung erstellen.

Anforderung an die Probensequenz

- Die Aktivierung der Kalibration erfordert eine Eingabe einer Sequenz mit Standardproben.
- Bei Verwendung von Küvettenwechslern und Probengebern werden die Proben den Probenplätzen im Zubehör zugeordnet.
- Wenn die Probensequenz leer ist, erscheint beim Messstart der Probensequenz zunächst das Fenster **Sequenz einstellen**. Das Fenster kann erst verlassen werden, wenn mindestens eine Probe definiert ist.

Sehen Sie dazu auch

Probensequenzen [▸ 30]

9.1.6 Thermometrie - Einstellungen | Automatisch archivieren

Sie können die Messdaten und deren Auswertung automatisch speichern, exportieren und drucken. So können Sie Ihre Prozesse zur Archivierung der Daten vereinheitlichen und sicherstellen, dass Daten nicht verlorengehen. Auf der Seite **Automatisch archivieren** wählen Sie dazu die Zieldateien und Reportvorlagen. Zusätzlich müssen Sie im Fenster **Optionen** die automatische Archivierung programmweit aktivieren und den Zeitpunkt für die einzelnen Archivierungsfunktionen wählen.

Sehen Sie dazu auch

Messdaten automatisch archivieren [▶ 29]

9.1.7 Fenster Thermometrie - Einstellungen | Notiz

Auf der Seite **Notiz** können Sie optional eine Notiz zur Methode eingeben.

9.2 Messungen im Modul Thermometrie ausführen

Voraussetzung für einen Messstart ist, dass im Dokumentfenster eine Methode neu erstellt oder geladen wurde. Die Messung kann mit einer in der Methode hinterlegten Probensequenz oder als Einzelmessung gestartet werden.

Für die Messungen werden folgende Icons eingeblendet:

Icon	Beschreibung
Sequenz messen	Probensequenz starten Wenn Sie in den Messparametern keine Probensequenz hinterlegt haben, erscheint nach Klick auf dieses Icon das Fenster **Sequenz einstellen**. Das Fenster können Sie erst verlassen, wenn Sie mindestens eine Probe definiert haben.
Probe messen	Einzelne Probenmessung unabhängig von der eingestellten Probensequenz starten
Referenz	Referenz messen Eine separate Referenzmessung ist nötig, wenn die Probensequenz nicht mit einer Referenzmessung beginnt oder keine Referenz, passend zu den aktuellen Methodenparametern, verfügbar ist.
Stopp	Laufende Messung stoppen und nicht fortsetzen
Sequenz unterbrechen	Messung unterbrechen und zu einem späteren Zeitpunkt fortsetzen Die laufende Probenmessung wird fertig abgearbeitet. Die noch ausstehende Probensequenz wird anschließend angezeigt und kann editiert werden.
	Temperatur in einem peltiertemperierten Zubehör einstellen

Referenz messen

Wenn keine Referenz an erster Stelle in der Probensequenz steht, muss die Referenz separat aufgenommen werden.

- Referenz im Probenraum platzieren.
- Auf **Referenz** klicken und Abfrage zur Referenzmessung bestätigen.
  - ✓ Die Referenzmessung wird ausgeführt. Alle folgenden Messungen werden mit dieser Referenz korrigiert, bis die Messparameter durch eine neue Methodeneinstellung geändert werden oder die nächste Referenzmessung erfolgt.

Erste Sequenz starten

Mit Start der Probensequenz werden die Proben in der Reihenfolge entsprechend der Probentabelle abgearbeitet.

- Die erste Probe der Sequenz im Probenraum platzieren bzw. Küvettenwechsler/APG mit Proben bestücken.
- Auf **Sequenz messen** klicken.
- Den weiteren Bildschirmaufforderungen zum Einsetzen der Proben und Start von Probenmessungen folgen.

✓ Die Probensequenz wird abgearbeitet. Die Messwerte und Auswertungen werden im Dokumentfenster angezeigt.

Sequenz unterbrechen oder stoppen

Eine laufende Messung können Sie unterbrechen und fortführen oder endgültig stoppen.

- Auf **Stopp** klicken, um die Messung zu stoppen.
  ✓ Die Messung der Sequenz wird gestoppt und kann nicht fortgesetzt werden. Bis zu diesem Zeitpunkt aufgenommene Messdaten bleiben erhalten und können weiter bearbeitet werden.
- Auf **Sequenz unterbrechen** klicken, um eine Messung zu unterbrechen und später fortzusetzen.
  ✓ Die aktuelle Probenmessung wird beendet und danach die Abarbeitung unterbrochen. Die Messpause können Sie nutzen, um die laufende Probensequenz anzusehen und zu editieren.

Nächste Sequenz starten

Nach Abarbeitung der ersten Probensequenz können Sie die Sequenz weitere Male starten oder nacheditieren. Dies ist auch möglich, wenn das Dokument bereits gespeichert und zur Anzeige der Ergebnisse erneut geöffnet wurde.

- Auf klicken.
  Das Fenster **Sequenz einstellen** mit der in der Methode hinterlegten Sequenz erscheint.
- Bei Bedarf eine neue Sequenz zusammenstellen.
- Die Einstellungen im Fenster **Sequenz einstellen** mit Klick auf **Ok** bestätigen.
- Den weiteren Bildschirmaufforderungen zum Einsetzen der Proben und Start von Probenmessungen folgen.
  ✓ Die aktuelle Sequenz wird abgearbeitet und die Daten an die vorhandene Messwerttabelle und Auswertungen angehängt.

Einzelmessungen ausführen

Sie können unabhängig von der eingestellten Sequenz einzelne Proben des Probentyps **Probe** messen und an die Messwerttabelle und Auswertungen anhängen.

- Probe im Probenraum platzieren.
- Auf **Probe messen** klicken.
- Den weiteren Bildschirmaufforderungen zum Messstart folgen.
  ✓ Die Messung erfolgt und die Daten werden an vorhandene Messwerte und Auswertungen angehängt.

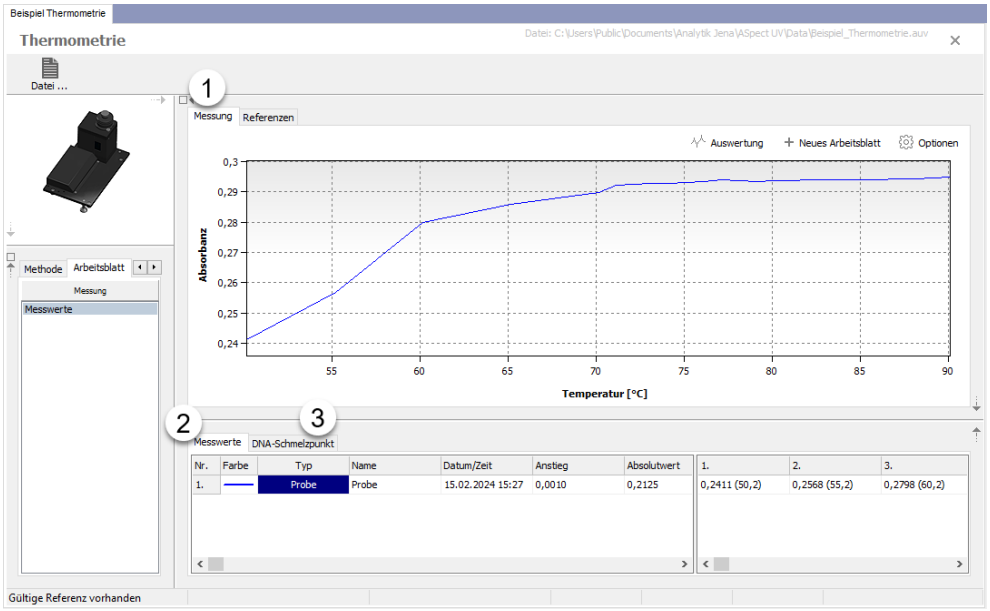
Tipp

Wenn Messungen anderer Probentypen angehängt werden sollen, klicken Sie auf **Sequenz messen** und geben Sie eine Sequenz mit den entsprechenden Proben ein.

9.3 Ergebnisse im Modul Thermometrie anzeigen, auswerten und bearbeiten

In diesem Abschnitt werden die Besonderheiten der Ergebnisanzeige im Modulfenster Thermometrie erläutert.

Dokumentfenster im Modul Thermometrie



Nr.	Beschreibung
1	Arbeitsblätter mit der Anzeige der Temperaturkurve, Referenzen
2	Tab **Messwerte** mit den Einzelmesswerten der Proben
3	Tab **DNA-Schmelzpunkt**

Arbeitsblatt Messung

Das Arbeitsblatt **Messung** enthält die Messdaten. In der oberen Hälfte des Arbeitsblatts werden die Spektren angezeigt.

Auf dem Tab **Messwerte** in der unteren Hälfte des Arbeitsblatts sind die Probentabelle mit der Reihenfolge der Messungen und die Tabelle mit den digitalen Messwerten angeordnet. Die weiteren Tabs enthalten Datenauswertungen, die schon in der Methode festgelegt wurden. Diese Auswertungen können Sie ergänzen und editieren.

Neues Arbeitsblatt

Sie können im Dokumentfenster weitere Arbeitsblätter erzeugen und auf ihnen weitere Auswertungen vornehmen. Auf diese Weise können Sie in einem Dokument (Datei) verschiedene Auswertungen nebeneinander anlegen. Das Arbeitsblatt **Neues Arbeitsblatt** wird nach einem Klick auf den Menüpunkt + **Neues Arbeitsblatt** auf dem Arbeitsblatt **Messung** angelegt. Die unbearbeiteten, originalen Messdaten werden zunächst in das neue Arbeitsblatt kopiert und können dann bearbeitet werden.

Probentabelle

Die Anzeige der Probentabelle kann frei konfiguriert werden. Nach einem Rechtsklick auf den Kopf der Tabelle können im Kontextmenü folgende Parameter gewählt werden:

- Nummer in der Sequenzreihenfolge
- Position im Zubehör bei Verwendung von Küvettenwechsler oder Probengeber
- Charge bei Verwendung von Küvettenwechsler oder Probengeber
- Probenbezeichnung
- Probentyp
- Anstieg
- Bereichsgrenzen des Anstiegs
- Bestimmtheitsmaß
- Probenspezifische Variablen A – H für die Berechnungen in Formeln

Per Drag&Drop kann die Reihenfolge der Spalten in der Tabelle verändert werden.

Die Einzelmessungen für jede Probe sind daneben in einer separaten Tabelle aufgeführt.

Sehen Sie dazu auch

Spektren und Messkurven auf dem Arbeitsblatt anzeigen [▶ 19]

9.3.1 Anzeigeoptionen für die Ergebnisse im Modul Thermometrie

Für die grafische Anzeige der Temperaturkurve sind folgende Funktionen verfügbar:

- Kurve skalieren
- Kurve mit Text versehen (Textbox)
- Kurve/Probe markieren
- Kurvenfarbe ändern
- Kurve ausblenden (Probe deaktivieren)

Sehen Sie dazu auch

Spektren und Messkurven auf dem Arbeitsblatt anzeigen [▶ 19]

9.3.2 Temperaturkurven auswerten

Die in der Methode angebotenen Datenauswertungen können Sie auch nachträglich vornehmen. Die Funktionen sind im Menü **Auswertung** zusammengefasst, das auf jedem Arbeitsblatt zur Verfügung steht. Die Auswertungen beziehen sich immer auf die Messwerte des jeweiligen Arbeitsblatts. Wenn die Messwerte mit mathematischen Funktionen bearbeitet werden, wird die Auswertung auf diesem Arbeitsblatt entsprechend angepasst.

Die Auswertungen werden im unteren Teil des Arbeitsblatts auf einem eigenen Tabellenblatt ausgegeben.

Auswertung editieren

Bei vorhandenen Auswertungen können Sie die Auswerteparameter editieren.

▶ Auf dem Tabellenblatt der Auswertung auf **Einstellungen** klicken und im Dialogfenster die Auswerteparameter ändern.

✓ Die Auswertung wird aktualisiert.

Auswertung löschen

Nichtbenötigte Auswertungen können Sie löschen.

▶ Auf dem Tabellenblatt der Auswertungen rechts oben auf ✕ klicken.

✓ Die Auswertung wird vom Arbeitsblatt entfernt.

DNA-Schmelzpunkt

In einer DNA-Schmelzkurve können Sie den Schmelzpunkt bestimmen.

▶ Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **DNA-Schmelzpunkt** wählen.

✓ Die Übersicht mit den ermittelten Schmelzpunkten wird angezeigt.

Peakliste

Mit der Funktion **Peakliste** können Sie eine automatische Peaksuche starten.

▶ Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Peakliste** wählen.

▶ Im Fenster **Einstellungen Peakliste** folgende Optionen auswählen.

Option	Beschreibung
Auswahlliste	**im gesamten Spektrum** Alle Peaks im Messbereich suchen **in definierten Teilbereichen** Peaks in definierten Spektrenbereichen suchen
Art des Peak	Art der gesuchten Peaks wählen: **Minima**, **Maxima** oder **Minima und Maxima**
Peaks nur	Absolute Grenze für die Anzeige der Peaks Peaks werden nur angezeigt, wenn sie über bzw. unter dem eingegebenen Ordinatenwert liegen.
Schwellwert	Differenz zwischen Peakhöhe und dem benachbarten darauffolgenden lokalen Maximum/Minimum

Option	Beschreibung
	Peaks werden nur angezeigt, wenn sie den eingegebenen Schwellwert überschreiten (Maximum) oder unterschreiten (Minimum).

- Die Auswahl mit Klick auf **Ok** bestätigen.
  - ✓ Die Peakliste wird angezeigt.

Werte def. Temperaturen

Mit der Funktion **Werte def. Temperaturen** werden Messwerte an ausgewählten Temperaturen in einer Tabelle zusammengefasst. Diese Messwerte können Sie danach in einer Formel weiter verwenden.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Werte def. Temperaturen** Werte wählen.
- Auf + klicken, im Eingabefeld die Temperatur innerhalb des Temperaturbereichs eingeben und mit erneutem Klick auf + in die Liste übertragen.
  - ✓ Die Wertetabelle wird angezeigt.

Formel

Mit der Funktion **Formel** können Sie Messwerte einer oder mehrerer Proben in einer Formel verknüpfen.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Formel** wählen.
- Auf + klicken und die Formel mit dem Formeleditor erstellen.
- Bei Bedarf auf die gleiche Weise weitere Formeln hinzufügen.
  - ✓ Die Ergebnisse werden auf dem Tab **Formel** angezeigt.

Bereich der Anstiegsberechnung

Die Anstiegsberechnung erfolgt zunächst über die gesamte Temperaturkurve. Nach Ende der Messung können Sie diesen Bereich eingrenzen und nur einen Ausschnitt der Temperaturkurve, idealerweise den lineare Teil, für die Berechnung heranziehen.

- Wenn der Anstieg nur für einzelne Proben berechnet wird, auf dem Arbeitsblatt diese Proben markieren.
- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Bereich der Anstiegsberechnung** wählen.
- Zeitpunkte für den Beginn und Ende des linearen Bereichs eingeben.
- In der Liste die Proben wählen, für die der Anstieg berechnet wird:
  Für alle Messungen: Die Berechnung wird für alle Proben ausgeführt.
  Nur für markierte Messungen: Die Berechnung wird nur für die vorher markierten Proben ausgeführt.
  - ✓ Der Wert **Anstieg** in der Messwerttabelle wird aktualisiert. Eventuelle Auswertungen werden ebenfalls nachberechnet.

9.3.3 Temperaturkurven mathematisch bearbeiten

Sie können mathematische Funktionen, z. B die Addition einer Konstanten, auf die Messdaten anwenden. Die Messdaten und vorhandene Auswertungen auf einem Arbeitsblatt werden daraufhin neu berechnet und aktualisiert. Die mathematischen Operationen können Sie aufeinanderfolgend im gleichen Arbeitsblatt anwenden.

HINWEIS

Sollten die Messdaten auf dem Arbeitsblatt **Messung** verändert werden, z. B. durch Nachmessen oder Deaktivieren einer Probe, werden die Daten auf dem weiteren Arbeitsblättern nicht aktualisiert.

Datenbearbeitung rückgängig machen

Das Protokoll über die ausgeführten Operationen finden Sie auf der linken Seite des Dokuments auf dem Tab **Arbeitsblatt**. Die Operationen sind dort der Reihe nach aufgelistet. Mit einem Klick auf die entsprechende Operation wird der Bearbeitungsschritt angezeigt. Auf diesem Tab können Sie Operationen rückgängig machen.

- Mit rechter Maustaste auf die letzte Operation klicken, die rückgängig zu machen ist.
- Im Kontextmenü eine der beiden Optionen auswählen:
  - **Bis zu diesem Schritt in neues Arbeitsblatt kopieren**
    Ein neues Arbeitsblatt wird geöffnet und die Daten mit der Änderungshistorie bis zur gewählten Operation dorthin kopiert. Im vorherigen Arbeitsblatt bleiben alle Operationen erhalten.
  - **Operation löschen**
    Alle Schritte inklusive der gewählten Operation werden im aktuellen Arbeitsblatt gelöscht.

  ✓ Die Operationen werden entsprechend der gewählten Option in ein neues Arbeitsblatt kopiert oder rückgängig gemacht.

Zuschneiden

Mit dieser Funktion wählen Sie einen Kurvenausschnitt für die Anzeige und weitere Bearbeitung/Auswertung aus. Die Werte außerhalb des gewählten Bereichs werden nicht mehr berücksichtigt.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Zuschneiden** wählen.

  ✓ Der Cursor wandelt sich in eine senkrechte Linie mit der Bezeichnung "Range".
- Auf die linke oder rechte Begrenzung des auszuschneidenden Abszissenbereichs klicken und mit gedrückt gehaltener Maustaste den Cursor bis zur anderen Begrenzung ziehen. Dann die Maustaste loslassen.
- Alternativ im Fenster **Zuschneiden** in den Feldern **Beginn** und **Ende:** die Bereichsgrenzen eingeben.
- Die Eingabe im Fenster **Zuschneiden** mit Klick auf **Ok** bestätigen.

  ✓ Die Kurvendarstellung wird aktualisiert. Sichtbar ist nur noch der ausgewählte Bereich der Messkurve.

Offset

Mit dieser Funktion wird eine Konstante zu den Messwerten addiert. Der Wert der Konstanten kann sowohl positiv als auch negativ sein. Auf diese Weise lassen sich Störgrößen simulieren oder kompensieren.

- Auf einem neuen Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Offset** wählen.
- Im Feld **Offset** den Wert eingeben.

  ✓ Die Messwerte und Auswertungen werden neu berechnet und die Anzeigen aktualisiert.

Faktor

Mit dieser Funktion werden die Messwerte mit einer Konstanten multipliziert. Die Multiplikation eines Absorptionswerts mit einer Konstanten entspricht theoretisch einer Veränderung der Schichtdicke oder der Konzentration der Probe.

- Auf einem neuen Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Faktor** wählen.
- Im Feld **Faktor** den Wert eingeben.

  ✓ Die Messwerte und Auswertungen werden neu berechnet und die Anzeigen aktualisiert.

Glätten

Mit dieser Funktion wird die Kurve nach dem Verfahren Savitzky-Golay geglättet.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Glätten** wählen.
- In der Dropdown-Liste **Stützstellen** die Anzahl zu betrachtender Punkte für die Glättung nach Savitzky-Golay auswählen.

✓ Die Kurve wird neu berechnet und die Anzeige aktualisiert.

Ableiten

Mit dieser Funktion wird für die Messkurve die Ableitung der 1. bis 4. Ordnung mit integrierter konstanter Glättung über 5 Punkte und variabler Anzahl Stützstellen für den Ableitungsfilter (n Punkte) nach Savitzky-Golay berechnet. Die abgeleitete Kurve kann Untergrundsignale, die die Messung überlagern, unterdrücken und die spezifischen Absorptionen deutlicher hervorheben.

Eine Kurve kann mehrfach abgeleitet werden. Der Algorithmus ist jedoch jedem Ableitungstyp spezifisch angepasst, deshalb ergeben sich dementsprechend bei der vierten Ableitung nicht die gleichen Ordinatenwerte wie bei viermaliger Bildung der ersten Ableitung. Für die quantitative Analyse ist daher immer dasselbe Verfahren anzuwenden.

Die Ableitung insbesondere höherer Ordnung führt immer zum "Aufrauen" der Messkurve. Wählen Sie deshalb in Abhängigkeit von der Breite der Messkurvenstruktur immer eine möglichst hohe Anzahl Stützstellen. Mitunter ist ein vorheriges Glätten zur Unterdrückung des statistischen Rauschens empfohlen. Beachten Sie, dass sich der Wertebereich entsprechend der gewählten Anzahl Stützstellen (n) um die Anzahl Werte (n-1)/2+2 an beiden Spektrenenden verringert. Zum Abmindern dieses Effekts können Sie vorher eine Interpolation ausführen.

- Auf dem Arbeitsblatt den Menüpunkt **Auswertung** | **Ableiten** wählen.
- In der Liste **Ableiten** die Ordnung der Ableitung auswählen.
- In der Liste **Stützstellen** die Zahl der für die Ableitung mit integriertem Glättungsfilter zu verwendenden Stützstellen auswählen.

  ✓ Die Ableitung wird berechnet und die Anzeige aktualisiert. Im Audit Trail wird die Ordnung der Ableitung und die Anzahl Stützstellen dokumentiert.

9.4 Beispielmessung im Modul Thermometrie

Im Beispiel wird der Schmelzpunkt einer DNA-Probe bestimmt. Dafür wird eine Temperaturkurve im Bereich 25 ... 90 °C gefahren. Für die Messung ist ein peltiertemperiertes Zubehör mit Küvettenmessfühler erforderlich. Als Probe kann eine geeignete DNA-Probe oder Wasser verwendet werden.

Folgende Schritte müssen ausgeführt werden:

1. Dokument im Modul anlegen.
2. Methode öffnen und Parameter eingeben.
3. Messung starten.

Dokument anlegen

Den Menüpunkt **Module** | **Thermometrie** wählen oder auf das Icon in der Startleiste klicken.

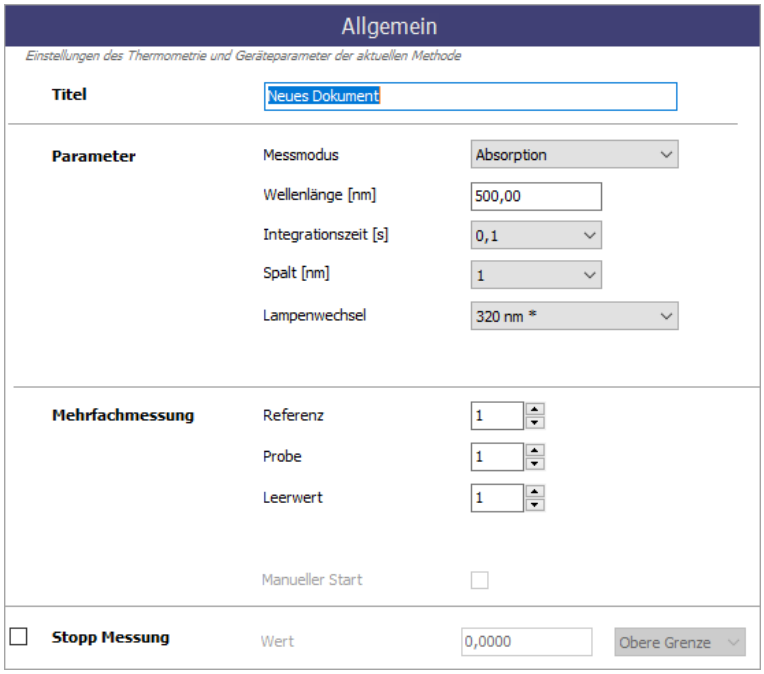
Methodenparameter festlegen

- Im Dokumentfenster auf **Methode einstellen** klicken.
- Auf den Seiten des Methodenfensters **Thermometrie - Einstellungen** die Parameter eingeben (siehe unten).
- Die Parametereingabe mit Klick auf **Ok** bestätigen und in das Dokumentfenster zurückkehren.

Parametereingabe

Nehmen Sie die Einstellungen entsprechend der Screenshots vor.

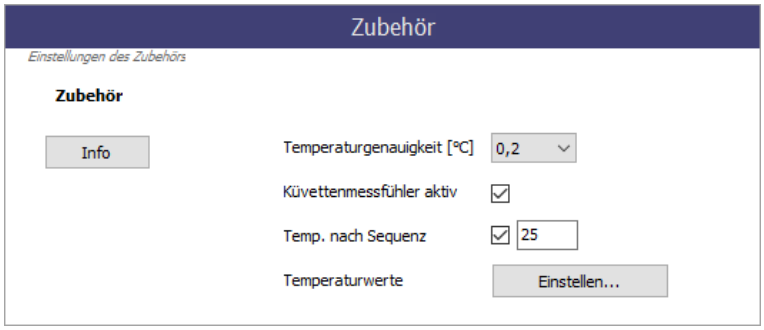
Seite Allgemein



Seite Start Messung

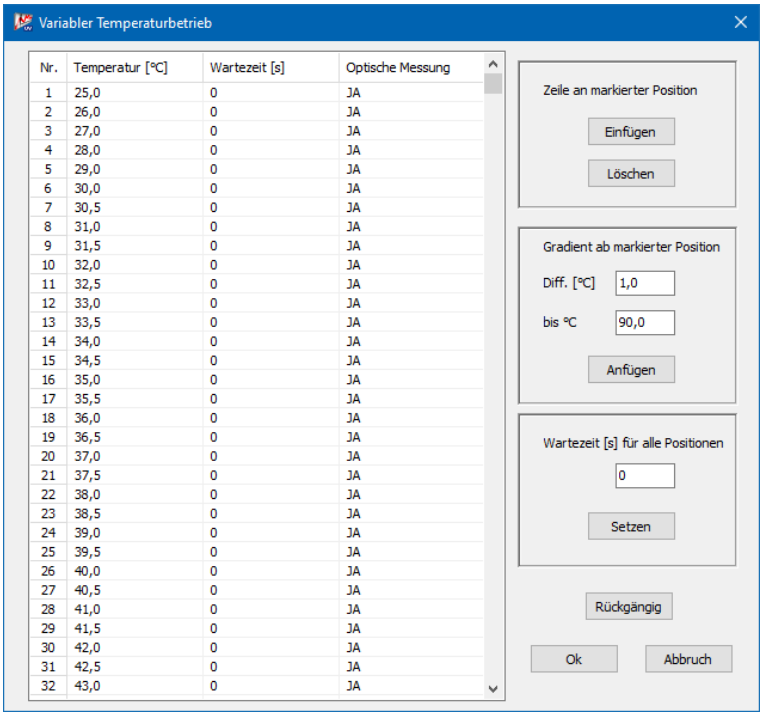
Keine Einträge vornehmen.

Seite Zubehör



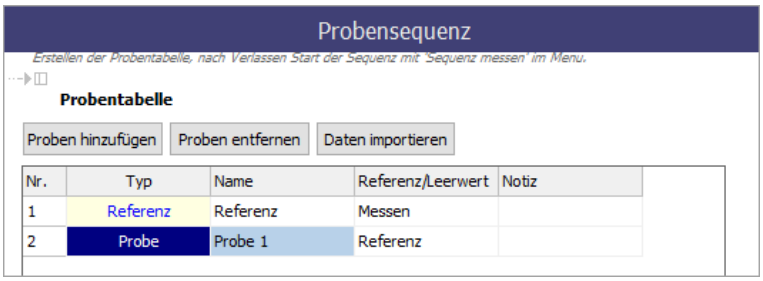
Parameter der Temperaturkurve einstellen:

- Mit einem Klick auf **Einstellen...** das Fenster **Variabler Temperaturbetrieb** öffnen.
- In die Spalte **Temperatur [°C]** klicken und den Wert "25" eintragen.
- Im Eingabefeld **Diff. [°C]** den Wert "1" und im Feld **bis °C** den Wert "30" eingeben. Auf **Anfügen** klicken.
- Diese Eingaben für die Wertepaare "0,5 °C"/ "80 °C" und "1 °C"/"90 °C" wiederholen.
- Eingaben mit Klick auf **Ok** bestätigen.

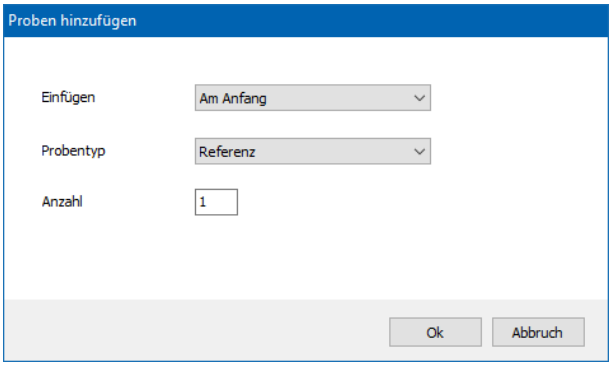


Seite Auswertung

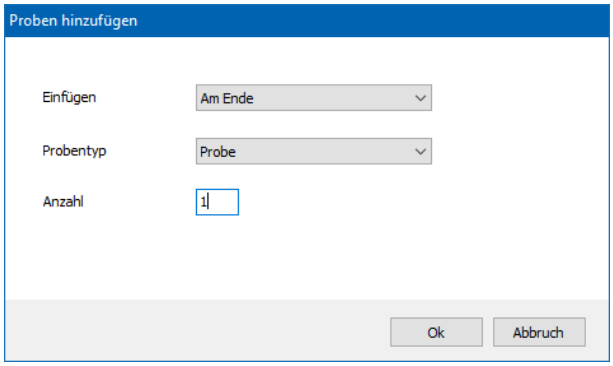
Seite Probensequenz



- Auf **Proben hinzufügen** klicken und eine Referenz an den Anfang der Probentabelle setzen:



- Noch einmal auf **Proben hinzufügen** klicken eine Probe an das Ende der Probentabelle anfügen:



- In der ersten Zeile der Probentabelle als Namen "Referenz" eingeben und mit der Enter-Taste bestätigen.
- In der zweiten Zeile der Probentabelle als Namen "Probe 1" eingeben und mit der Enter-Taste bestätigen.

Seite Automatisch archivieren

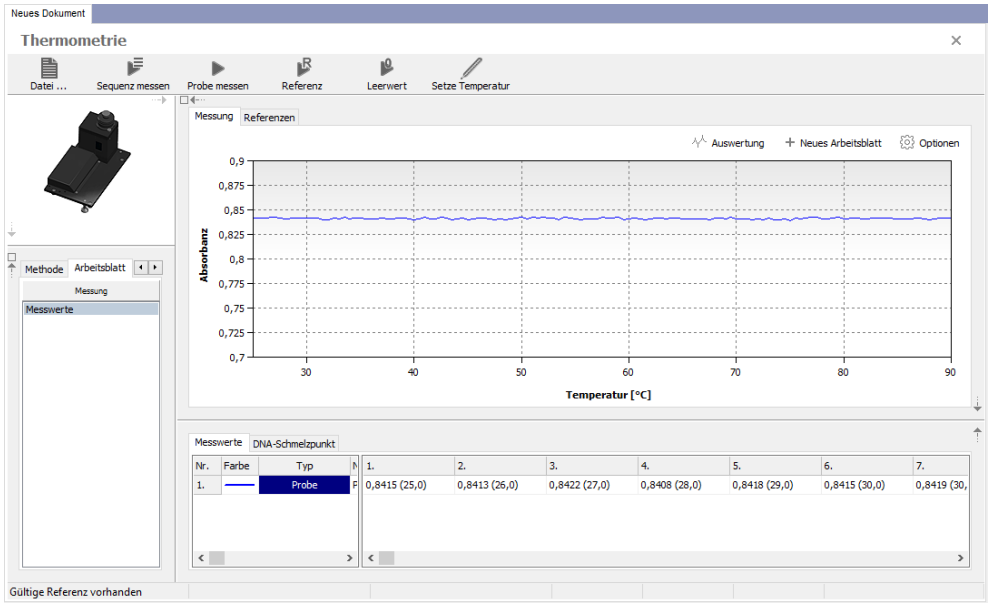
Keinen Eintrag vornehmen.

Seite Notiz

Keinen Eintrag vornehmen.

Messung ausführen

- Im Dokumentfenster auf klicken.
  Die Startinformation zur Messung der Referenz erscheint.
- Referenzprobe einsetzen und zum Start der Messung auf **Ja** klicken.
- Die Referenzmessung erfolgt. Aufforderung zur Messung der Probe 1 erscheint.
- Probe 1 einsetzen und zum Start der Messung auf **Ja** klicken.



10 Modul Farbmetrik

Im Modul **Farbmetrik** erfolgt die farbmetrische Auswertung von Transmissonsspektren durchsichtiger fester oder flüssiger Proben und Reflexionsspektren undurchsichtiger fester oder pulverförmiger Proben.

Folgende Parameter können im Modul Farbmetrik bestimmt werden:

Farbräume/Normfarbwerte
- Normfarbwerte X, Y, Z (nach EN ISO 11664)
- Normfarbwertanteile x, y (nach EN ISO 11664)
- CIE-Lab, CIE-Luv (nach EN ISO 11664)
- Hunter-Lab

Beobachtungswinkel/Lichtarten
- Beobachtungswinkel 2° und 10°
- CIE Lichtart A und D65 nach EN ISO 11664
- CIE Lichtart C

Farbzahlen
- Weißindex, Gelbindex
- Platin Cobalt nach ASTM D 5386-05 mit linearer Regression über Gelbindex nach ASTM E313-15
- Jod mit Kalibrierfunktion über CIE-Lab-Werte
- Gardner nach DIN ISO 4630
- Saybolt berechnet aus CIE-Lab-Werten nach ASTM D156, D6045

Modul Farbmetrik öffnen

▶ Das Modul **Farbmetrik** mit einem Klick auf das Icon in der Startleiste öffnen.

▶ Alternativ den Menüpunkt **Module** | **Farbmetrik** wählen.

✓ Auf der Arbeitsoberfläche wird ein neues Dokument geöffnet.

Alle Funktionen des Dokumentfensters des Moduls **Farbmetrik** sind der Messung von Spektren und deren farbmetrischer Auswertung zugeordnet. Sie können nun eine Methode erstellen und auf deren Grundlage eine Messung mit Auswertungen starten.

10.1 Methodeneinstellung im Modul Farbmetrik

Dieses Kapitel enthält alle Einstellungen die für eine Methode im Modul **Farbmetrik** getroffen werden können.

Methode erstellen

▶ Im Dokumentfenster mit einem Klick auf **Methode einstellen** das Methodenfenster öffnen.

▶ Die Einstellungen auf den Seiten des Methodenfensters vornehmen.

▶ Die Eingabe der Parameter mit Klick auf **Ok** abschließen.

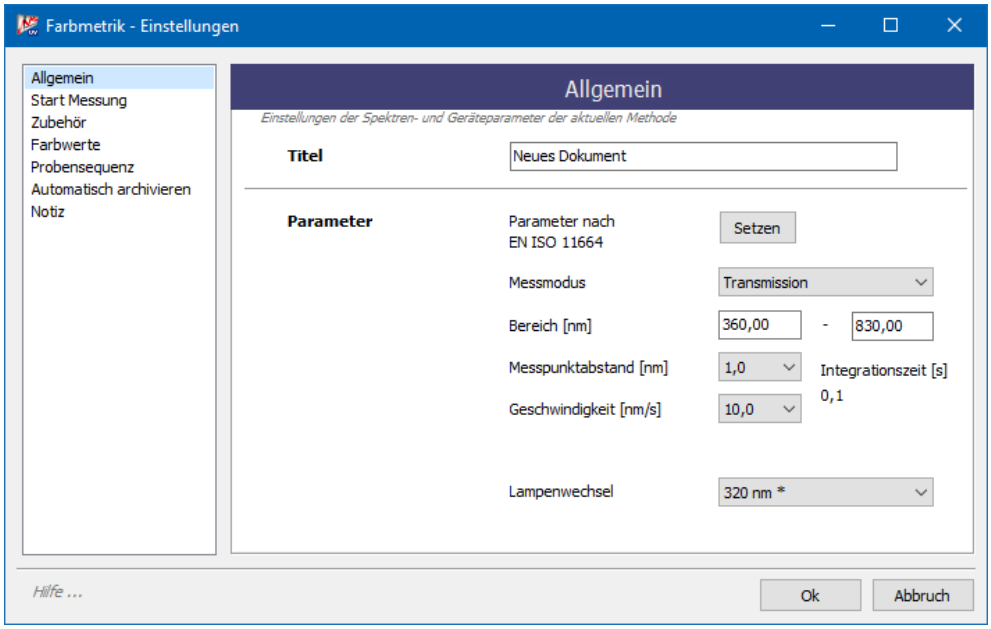
✓ Die Methodenparameter werden auf der linken Seite des Dokumentfensters auf dem Tab **Methode** ausgegeben. Die Icons für den Messstart erscheinen in der Werkzeugleiste des Dokumentfensters.

Sehen Sie dazu auch

Grundlegender Aufbau und Funktionen von ASpect UV [▶ 11]

10.1.1 Farbmetrik - Einstellungen | Allgemein

Auf der Seite **Allgemein** werden die grundlegenden Messeinstellungen vorgenommen.



Titel

Hier geben Sie den Titel des Dokuments ein, der im Reiter des Dokuments angezeigt wird. Den Titel können Sie später editieren.

Parameter

In diesem Bereich wählen Sie die Parameter für die optische Messung.

Option	Beschreibung
Parameter nach EN ISO 11664	Mit einem Klick auf **Setzen** werden die in der Norm EN ISO 11664 geforderten Messparameter für den Spektralbereich, den Messpunktabstand und die spektrale Spaltbreite eingestellt.
Messmodus	Folgende Messmodi sind wählbar: ■ **Transmission** ■ **Reflexion** (nur für Reflexionsmesseinsätze und Integrationskugel)
Bereich [nm]	Wellenlängenbereich für die Messung in den Eingabefeldern eingeben Für die farbmetrische Auswertung muss mindestens der Spektralbereich 380 ... 780 nm erfasst werden.
Messpunktabstand [nm]	Messpunktabstand wählen
Geschwindigkeit [nm/s]	Messgeschwindigkeit wählen
Integrationszeit	Zeit für die Aufnahme eines Messpunkts Dieser Wert wird automatisch berechnet.
Spalt [nm]	Für SPECORD 210/250 PLUS Spektrale Spaltbreite (optische Auflösung) auswählen: 0,2; 0,5; 1; 2; 4 nm **Hinweis**: In älteren SPECORD 210/250 PLUS wurde der Spalt 0,2 nm noch nicht eingebaut. Für diese Geräte steht er nicht zur Auswahl.

Option	Beschreibung
Lampenwechsel	Wellenlänge des Wechsels von UV-Lampe auf Vis-Lampe auswählen Der voreingestellte Lampenwechsel bei 320 nm gewährleistet eine optimale Energieverteilung über den gesamten Wellenlängenbereich des Spektrometers. Wenn Sie nur im UV-Bereich oder Vis-Bereich arbeiten, können Sie auch mit den Optionen **nur UV** oder **nur Vis** mit der gewählten Lampe messen.

10.1.2 Farbmetrik - Einstellungen | Start Messung

Den Messstart einer Probe definieren Sie auf der Seite **Start Messung**. Folgende Startoptionen stehen zur Verfügung:

Option	Beschreibung
Autom. ohne Wartezeit	Die Messung beginnt sofort nach Klick auf oder .
Autom. mit Wartezeit	Nach Klick auf oder beginnt die Messung erst nach Ablauf der Wartezeit.
Manuell ohne Wartezeit	Nach Klick auf oder erscheint eine Rückfrage zum Start der Messung. Bei Beantwortung mit **Ja** beginnt die Messung sofort.
Manuell mit Wartezeit	Nach Klick auf oder erscheint eine Rückfrage zum Start der Messung. Bei Beantwortung mit **Ja** läuft zunächst die Wartezeit ab und danach startet die Messung.
Wartezeit	Zeitverzögerung für Startoptionen mit Wartezeit

10.1.3 Farbmetrik - Einstellungen | Zubehör

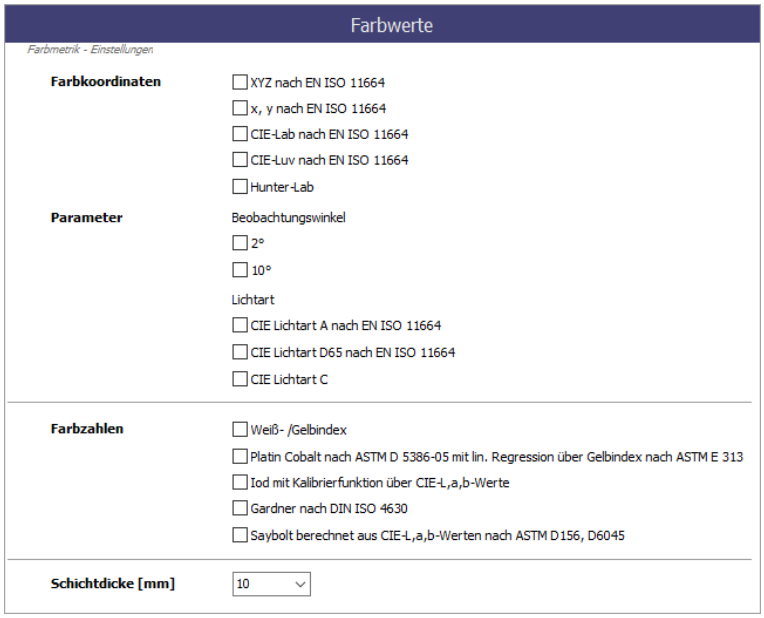
Die Parameter auf der Seite **Zubehör** hängen vom installierten Zubehör ab.

Sehen Sie dazu auch

Zubehöre verwenden [▶ 41]

10.1.4 Farbmetrik - Einstellungen | Farbwerte

Auf der Seite **Farbwerte** erfolgt die Auswahl der zu berechnenden Farbkoordinaten und Farbzahlen.



Farbkoordinaten

Die folgenden Farbkoordinaten können für die Berechnung gewählt werden:

- XYZ nach EN ISO 11664
- x, y nach EN ISO 11664
- CIE-Lab nach EN ISO 11664
- CIE-Luv nach EN ISO 11664
- Hunter-Lab

Parameter

Die Farbkoordinaten können unter zwei Beobachtungswinkeln bestimmt werden:

- 2°
- 10°

Folgende Lichtarten stehen zur Verfügung:

- CIE Lichtart A nach EN ISO 11664
- CIE Lichtart D65 nach EN ISO 11664
- CIE Lichtart C

Mehrfachauswahl von Farbkoordinaten und Parametern für die Auswertung einer Messung sind möglich.

Farbzahlen

Folgende Farbzahlen können berechnet werden:

- Weiß- /Gelbindex
- Platin Cobalt nach ASTM D 5386-05 mit lin. Regression über Gelbindex nach ASTM E 313
- Iod mit Kalibrierfunktion über CIE-L,a,b-Werte
- Gardner nach DIN ISO 4630
- Saybolt berechnet aus CIE-L,a,b-Werten nach ASTM D156, D6045

Schichtdicke

Für die Bestimmung der Farbkoordinaten und der daraus abgeleitete Farbzahlen wird ein Transmissions- bzw. Reflexionswert für die normierte Schichtdicke von 10 mm benötigt.

- ▶ Wählen Sie für Transmissionsmessungen in der Liste Schichtdicke die verwendeten Schichtdicke in Strahlrichtung der Probe bzw. Küvette oder geben Sie den Wert direkt in das Listenfeld ein.
- ▶ Bei Reflexionsmessungen von undurchlässigen Oberflächen muss der Wert genormt auf 10 mm gesetzt werden.

HINWEIS

In den Normen zur Bestimmung der Farbzahlen Platin Cobalt (Hazen), Iod und Gardner wird neben anderen Voraussetzungen gefordert, dass eine Anwendung nur erfolgt, wenn die Absorptionscharakteristik bzw. der Farbton der Probe ähnlich dem entsprechenden Standard ist. Der Farbton ist definiert durch seine Spektralfarbe. Zur Gewährleistung der Gültigkeit eines farblosen Standards, z. B. Wasser, ist die Definition einer Epsilon-Umgebung um den Unbuntpunkt nötig. Beide Parameter sind für die genannten Farbzahlen unter Berücksichtigung sowohl messtechnischer als auch farbspezifischer Aspekte in einer Ini-Datei entsprechend vordefiniert. Wenn Sie diese Grenzen verändern müssen, öffnen Sie in einem Editor unter ProgramData\Analytik Jena\ASpect UV die Datei colcount.ini. Passen Sie die Werte entsprechend Ihren Anforderungen an und speichern die Datei wieder.

10.1.5 Farbmetrik - Einstellungen | Probensequenz

Auf der Seite **Probensequenz** können Sie die Reihenfolge der Proben für eine folgende Messung bestimmen, die Sie mit dem Icon im Dokumentfenster starten können. Eine Probensequenz können Sie auch direkt vor einer Messung erstellen.

Anforderung an die Probensequenz

- Bei Verwendung von Küvettenwechslern und Probengebern werden die Proben den Probenplätzen im Zubehör zugeordnet.
- Wenn die Probensequenz leer ist, erscheint beim Messstart der Probensequenz zunächst das Fenster **Sequenz einstellen**. Das Fenster kann erst verlassen werden, wenn mindestens eine Probe definiert ist.

10.1.6 Farbmetrik - Einstellungen | Automatisch archivieren

Sie können die Messdaten und deren Auswertung automatisch speichern, exportieren und drucken. So können Sie Ihre Prozesse zur Archivierung der Daten vereinheitlichen und sicherstellen, dass Daten nicht verlorengehen. Auf der Seite **Automatisch archivieren** wählen Sie dazu die Zieldateien und Reportvorlagen. Zusätzlich müssen Sie im Fenster **Optionen** die automatische Archivierung programmweit aktivieren und den Zeitpunkt für die einzelnen Archivierungsfunktionen wählen.

Sehen Sie dazu auch

Messdaten automatisch archivieren [▶ 29]

10.1.7 Farbmetrik - Einstellungen | Notiz

Auf der Seite **Notiz** können Sie optional eine Notiz zur Methode eingeben.

10.2 Messungen im Modul Farbmetrik ausführen

Voraussetzung für einen Messstart ist, dass im Dokumentfenster eine Methode neu erstellt oder geladen wurde. Die Messung kann mit einer in der Methode hinterlegten Probensequenz oder als Einzelmessung gestartet werden.

Für die Messungen werden folgende Icons eingeblendet:

Icon	Beschreibung
Sequenz messen	Probensequenz starten Wenn Sie in den Messparametern keine Probensequenz hinterlegt haben, erscheint nach Klick auf dieses Icon das Fenster **Sequenz einstellen**. Das Fenster können Sie erst verlassen, wenn Sie mindestens eine Probe definiert haben.
Probe messen	Einzelne Probenmessung unabhängig von der eingestellten Probensequenz starten
Referenz	Referenz messen Eine separate Referenzmessung ist nötig, wenn die Probensequenz nicht mit einer Referenzmessung beginnt oder keine Referenz, passend zu den aktuellen Methodenparametern, verfügbar ist.
Stopp	Laufende Messung stoppen und nicht fortsetzen
Sequenz unterbrechen	Messung unterbrechen und zu einem späteren Zeitpunkt fortsetzen Die laufende Probenmessung wird fertig abgearbeitet. Die noch ausstehende Probensequenz wird anschließend angezeigt und kann editiert werden.
	Für Kassetten-Sipper-System und Probengeber APG verfügbar: Pumpe ein- bzw. ausschalten und Probe transportieren bzw. Transport stoppen
	Für Probengeber APG verfügbar: Probenkanüle absenken bzw. hochfahren
	Für Probengeber APG mit Rührfunktion verfügbar: Rührer ein- bzw. ausschalten
	Temperatur in einem peltiertemperierten Zubehör einstellen

Referenz messen

Wenn keine Referenz an erster Stelle in der Probensequenz steht, muss die Referenz separat aufgenommen werden.

- Referenz im Probenraum platzieren.
- Auf **Referenz** klicken und Abfrage zur Referenzmessung bestätigen.
  - ✓ Die Referenzmessung wird ausgeführt. Alle folgenden Messungen werden mit dieser Referenz korrigiert, bis die Messparameter durch eine neue Methodeneinstellung geändert werden oder die nächste Referenzmessung erfolgt.

Erste Sequenz starten

Mit Start der Probensequenz werden die Proben in der Reihenfolge entsprechend der Probentabelle abgearbeitet.

- Die erste Probe der Sequenz im Probenraum platzieren bzw. Küvettenwechsler/APG mit Proben bestücken.
- Auf **Sequenz messen** klicken.
- Den weiteren Bildschirmaufforderungen zum Einsetzen der Proben und Start von Probenmessungen folgen.
  - ✓ Die Probensequenz wird abgearbeitet. Die Messwerte und Auswertungen werden im Dokumentfenster angezeigt.

Sequenz unterbrechen oder stoppen

Eine laufende Messung können Sie unterbrechen und fortführen oder endgültig stoppen.

- Auf **Stopp** klicken, um die Messung zu stoppen.
  - ✓ Die Messung der Sequenz wird gestoppt und kann nicht fortgesetzt werden. Bis zu diesem Zeitpunkt aufgenommene Messdaten bleiben erhalten und können weiter bearbeitet werden.

- Auf **Sequenz unterbrechen** klicken, um eine Messung zu unterbrechen und später fortzusetzen.
  - ✓ Die aktuelle Probenmessung wird beendet und danach die Abarbeitung unterbrochen. Die Messpause können Sie nutzen, um die laufende Probensequenz anzusehen und zu editieren.

Nächste Sequenz starten

Nach Abarbeitung der ersten Probensequenz können Sie die Sequenz weitere Male starten oder nacheditieren. Dies ist auch möglich, wenn das Dokument bereits gespeichert und zur Anzeige der Ergebnisse erneut geöffnet wurde.

- Auf klicken.
  Das Fenster **Sequenz einstellen** mit der in der Methode hinterlegten Sequenz erscheint.
- Bei Bedarf eine neue Sequenz zusammenstellen.
- Die Einstellungen im Fenster **Sequenz einstellen** mit Klick auf **Ok** bestätigen.
- Den weiteren Bildschirmaufforderungen zum Einsetzen der Proben und Start von Probenmessungen folgen.
  - ✓ Die aktuelle Sequenz wird abgearbeitet und die Daten an die vorhandene Messwerttabelle und Auswertungen angehängt.

Einzelmessungen ausführen

Sie können unabhängig von der eingestellten Sequenz einzelne Proben des Probentyps **Probe** messen und an die Messwerttabelle und Auswertungen anhängen.

- Probe im Probenraum platzieren.
- Auf **Probe messen** klicken.
- Den weiteren Bildschirmaufforderungen zum Messstart folgen.
  - ✓ Die Messung erfolgt und die Daten werden an vorhandene Messwerte und Auswertungen angehängt.

Tipp

Wenn Messungen anderer Probentypen angehängt werden sollen, klicken Sie auf **Sequenz messen** und geben Sie eine Sequenz mit den entsprechenden Proben ein.

Proben nachmessen

Sie können Ausreißer einer Messung nachmessen und damit stark abweichende Werte einer Messserie durch neue Werte ersetzen. Eine Nachmessung von Proben wird stets im Audit Trail protokolliert. Für das Nachmessen einer Probe müssen Sie auf das Arbeitsblatt **Messung** wechseln.

- Die Probe im Probenraum platzieren.
- Auf die Zeile der nachzumessenden Probe mit der rechten Maustaste klicken. Bei Mehrfachmessungen können Sie einen einzelnen Wert durch Klicken mit der rechten Maustaste auswählen.
- Im Kontextmenü den Menüpunkt **Probe nachmessen** wählen.
- Weiteren Bildschirmaufforderungen zum Messstart folgen.
  - ✓ Die Messung wird ausgeführt und der Messwert in der Probentabelle ersetzt. Die vorhandenen Auswertungen werden aktualisiert.

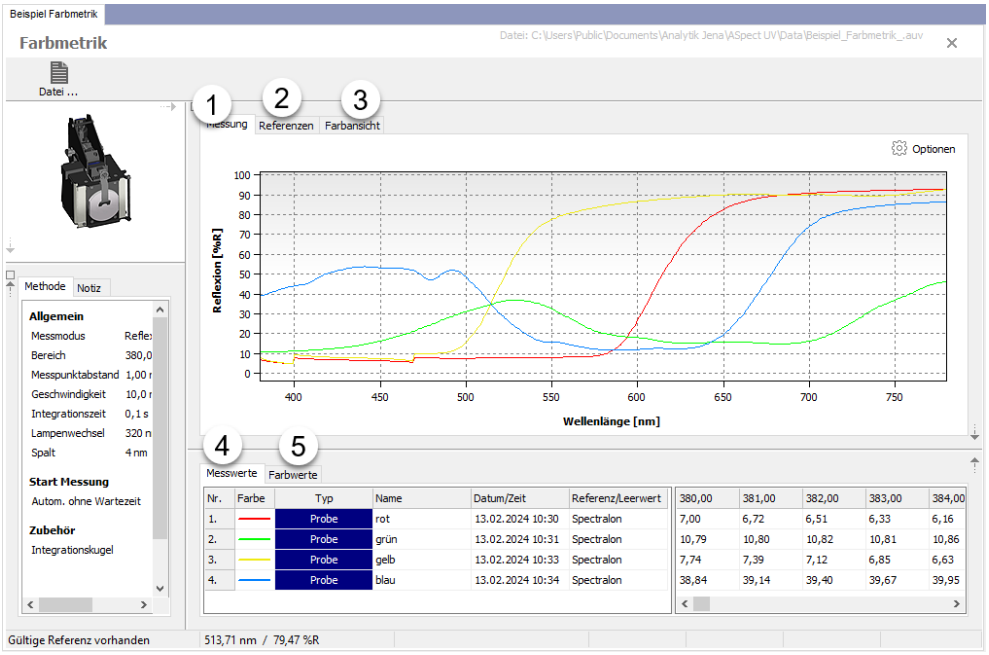
HINWEIS

Wenn im Dokument bereits weitere Arbeitsblätter neben dem Arbeitsblatt **Messung** angelegt sind, werden diese bei einer Nachmessung nicht aktualisiert.
Bei Verwendung von Küvettenwechsler oder APG muss die nachzumessende Probe auf die gleiche Position im Zubehör gesetzt werden. Die Position im Zubehör kann in der Probentabelle auf dem Arbeitsblatt angezeigt werden.
Zeitzyklische Messungen können nicht nachgemessen werden.

10.3 Ergebnisse im Modul Farbmetrik anzeigen und auswerten

In diesem Abschnitt werden die Besonderheiten der Ergebnisanzeige und Auswertung im Modulfenster **Farbmetrik** erläutert.

Dokumentfenster im Modul **Farbmetrik**



1 Arbeitsblatt **Messung**
2 Arbeitsblatt **Referenzen**
3 Arbeitsblatt **Farbansicht**
4 Tab **Messwerte**
5 Tab **Farbwerte**

Arbeitsblatt Messung

Das Arbeitsblatt **Messung** enthält die Messdaten. In der oberen Hälfte des Arbeitsblatts werden die Probenspektren angezeigt.

Arbeitsblatt Referenzen

Das Arbeitsblatt **Referenzen** zeigt die Referenzspektren und die Messwerte der Referenzen.

Probentabelle

Der Tab **Messwerte** enthält die Probentabelle in der Reihenfolge der Messungen und die Tabelle mit den digitalen Messwerten der Probenspektren. Die Probentabelle kann frei konfiguriert werden. Nach einem Rechtsklick auf den Kopf der Tabelle können im Kontextmenü folgende Parameter gewählt werden:

- Nummer in der Sequenzreihenfolge
- Farbe der Messkurve im Chart
- Charge bei Verwendung von Küvettenwechsler oder Probengeber
- Position im Zubehör bei Verwendung von Küvettenwechsler oder Probengeber
- Probentyp
- Probenbezeichnung
- Datum und Zeitpunkt der Messung

- Notiz
- Temperatur bei Methoden mit peltiertemperierten Zubehör

Per Drag&Drop kann die Reihenfolge der Spalten in der Tabelle verändert werden.

Auswertung der Spektren

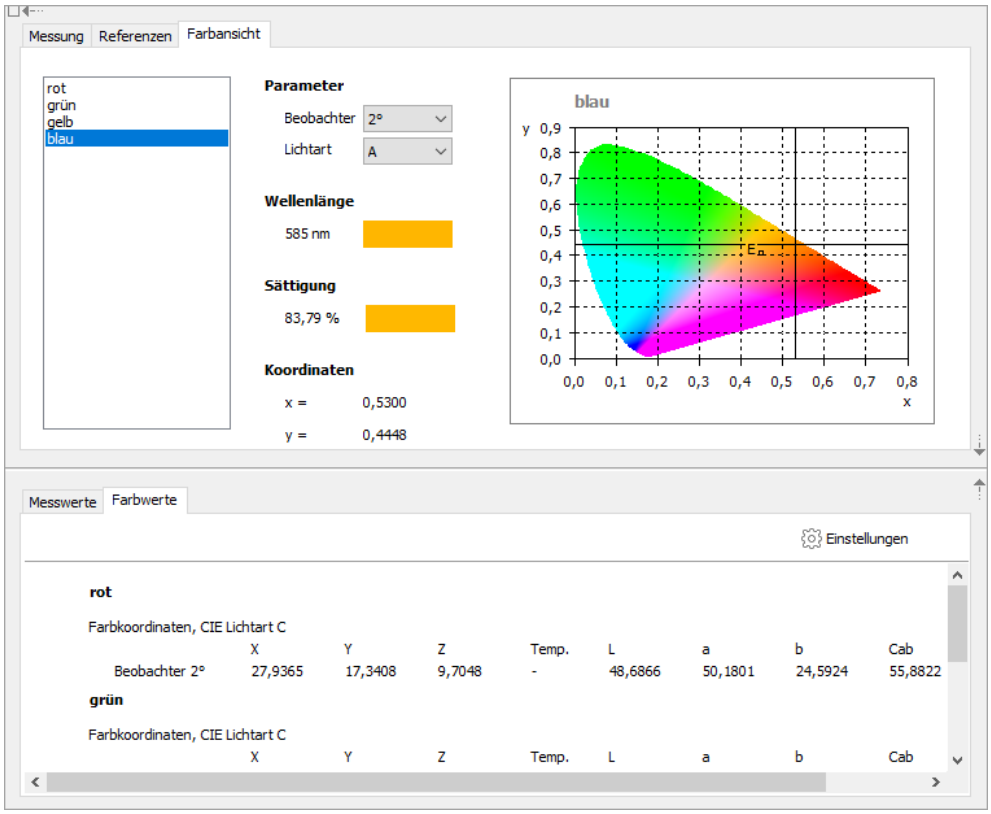
Auf dem Tab **Farbwerte** werden die schon in der Methode festgelegten Datenauswertungen angezeigt. Diese Auswertungen können Sie ergänzen und editieren:

- Auf dem Tab **Farbwerte** auf **Einstellungen** klicken.
- Im Fenster **Einstellungen - Farbwerte** die gewünschten Farbkoordinaten mit den Parametern oder die zu berechnenden Farbzahlen aktivieren.
  - ✓ Die Anzeige auf dem Tabellenblatt Farbwerte wird entsprechend den gewählten Parametern aktualisiert.

Arbeitsblatt Farbansicht

Auf dem Arbeitsblatt **Farbansicht** werden die Normfarbwertanteile und ihre Lage im Koordinatensystem angezeigt.

Option/Wert	Beschreibung
Parameter	Parameter für die Berechnung der Normfarbwertanteile: **Beobachter** Beobachtungswinkel wählen **Lichtart** Lichtart auswählen **Hinweis**: Die Auswahl auf diesem Tab hat keinen Einfluss auf die Ergebnisausgabe auf dem Tab **Farbwerte**. Die Schichtdicke ist unabhängig von der vereinbarten Schichtdicke auf 1 cm gesetzt.
Wellenlänge	Bunttongleiche Wellenlänge des Farbtons auf der Normfarbwerttafel
Sättigung	Die Sättigung des Farbtons ist das Verhältnis des Abstands von Weißpunkt (Unbuntpunkt) / Farbort (x, y) und des Abstands Weißpunkt / bunttongleiche Wellenlänge auf der Normfarbwerttafel.
Koordinaten	xy-Werte des Farbtons auf der Normfarbwerttafel



Sehen Sie dazu auch

- Das Dokumentfenster [▶ 15]
- Spektren und Messkurven auf dem Arbeitsblatt anzeigen [▶ 19]

10.3.1 Anzeigeoptionen für die Spektren im Modul Farbmetrik

Für die grafische Anzeige des Farbspektrums sind folgende Funktionen verfügbar:

- Kurve skalieren
- Kurve mit Text versehen (Textbox)
- Kurve/Probe markieren
- Kurvenfarbe ändern
- Kurve ausblenden (Probe deaktivieren)

Sehen Sie dazu auch

- Spektren und Messkurven auf dem Arbeitsblatt anzeigen [▶ 19]

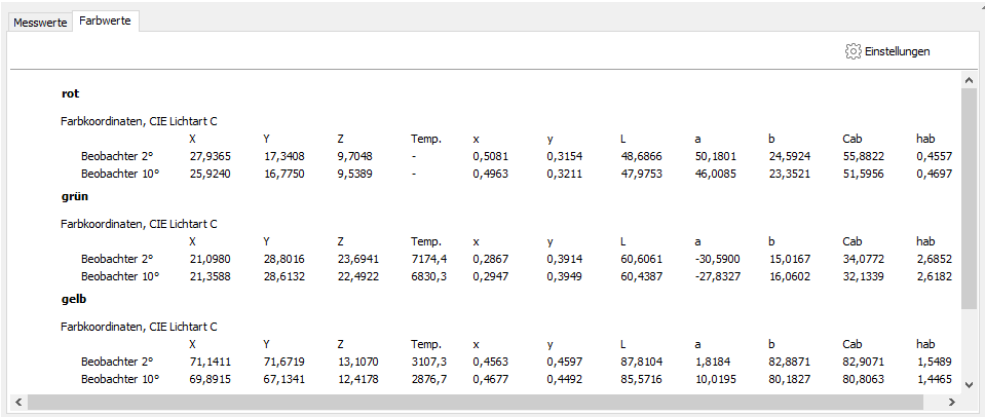
10.3.2 Spektren im Modul Farbmetrik auswerten

Die in der Methode angebotenen Datenauswertungen können auch nachträglich vorgenommen werden. Die Auswertungen werden im unteren Teil des Arbeitsblatts auf dem Tabellenblatt **Farbwerte** ausgegeben.

▶ Auf dem Tabellenblatt **Farbwerte** auf **Einstellungen** klicken.

▶ Im Dialogfenster **Einstellungen** - **Farbwerte** die gewünschten Farbkoordinaten mit den Parametern oder die zu berechnenden Farbzahlen aktivieren.

✓ Die Anzeige auf dem Tab **Farbwerte** wird entsprechend den gewählten Optionen und Parametern aktualisiert.



rot

Farbkoordinaten, CIE Lichtart C

	X	Y	Z	Temp.	x	y	L	a	b	Cab	hab
Beobachter 2°	27,9365	17,3408	9,7048	-	0,5081	0,3154	48,6866	50,1801	24,5924	55,8822	0,4557
Beobachter 10°	25,9240	16,7750	9,5389	-	0,4963	0,3211	47,9753	46,0085	23,3521	51,5956	0,4697

grün

Farbkoordinaten, CIE Lichtart C

	X	Y	Z	Temp.	x	y	L	a	b	Cab	hab
Beobachter 2°	21,0980	28,8016	23,6941	7174,4	0,2867	0,3914	60,6061	-30,5900	15,0167	34,0772	2,6852
Beobachter 10°	21,3588	28,6132	22,4922	6830,3	0,2947	0,3949	60,4387	-27,8327	16,0602	32,1339	2,6182

gelb

Farbkoordinaten, CIE Lichtart C

	X	Y	Z	Temp.	x	y	L	a	b	Cab	hab
Beobachter 2°	71,1411	71,6719	13,1070	3107,3	0,4563	0,4597	87,8104	1,8184	82,8871	82,9071	1,5489
Beobachter 10°	69,8915	67,1341	12,4178	2876,7	0,4677	0,4492	85,5716	10,0195	80,1827	80,8063	1,4465

Sehen Sie dazu auch

- Farbmetrik - Einstellungen | Farbwerte [▶ 122]

10.4 Beispielmessung im Modul Farbmetrik

Als Beispiel dient eine Bestimmung der Tristimuluswerte unter den Beobachtungswinkeln 2° und 10° mit der Normlichtart A. Für die Messung kann eine Integrationskugel und einfarbiges Papier verwendet werden. Sollte das nicht vorhanden sein, genügt auch eine Küvette mit Wasser als Referenz und einer farbigen Lösung als Probe. Zum Handling der Integrationskugel siehe Bedienungsanleitung "SPECORD PLUS Zubehör".

Folgende Schritte müssen ausgeführt werden:

1. Dokument im Modul anlegen.
2. Methode öffnen und Parameter eingeben.
3. Messung starten.

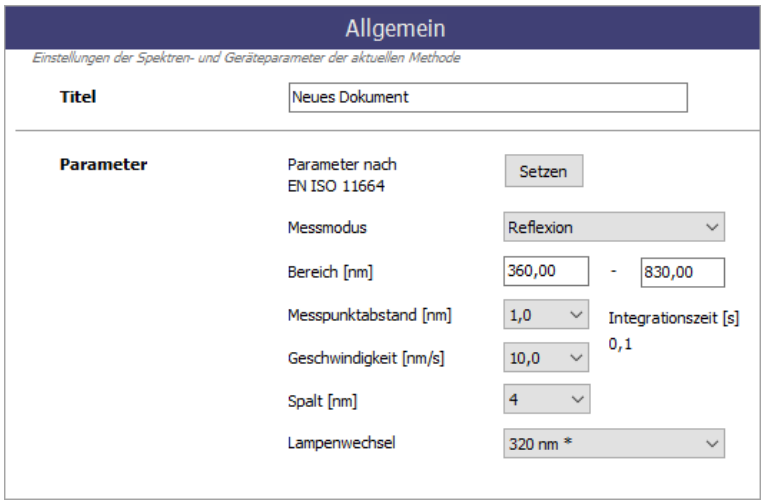
Dokument anlegen

- Auf in der Startleiste klicken oder Menüpunkt **Module** | **Farbmetrik** wählen.
  ✓ Ein neues Dokument wird geöffnet.

Methodenparameter festlegen

- Im Dokumentfenster auf **Methode einstellen** klicken.
- Auf den Seiten des Methodenfensters **Farbmetrik - Einstellungen** die Parameter entsprechend den Screenshots eingeben (siehe unten).
- Parameter im Methodenfenster mit einem Klick auf **Ok** bestätigen und in das Dokumentfenster zurückkehren.

Seite **Allgemein**



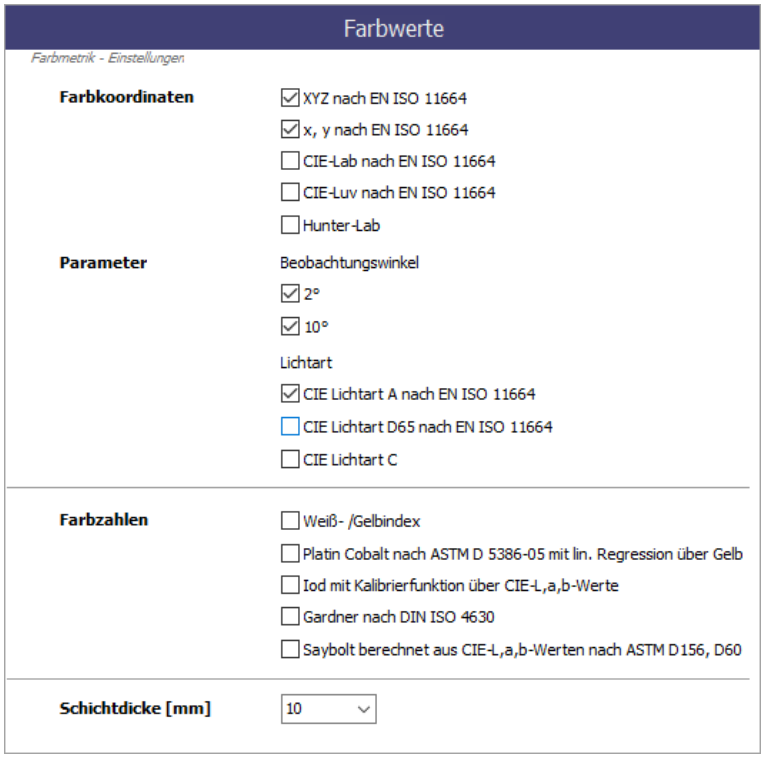
Seite Start Messung

Keine Einträge vornehmen.

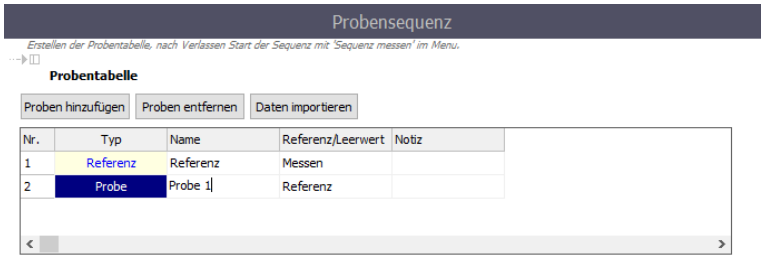
Seite **Zubehör**

Keine Einträge vornehmen.

Seite **Farbwerte**



Seite **Probensequenz**:

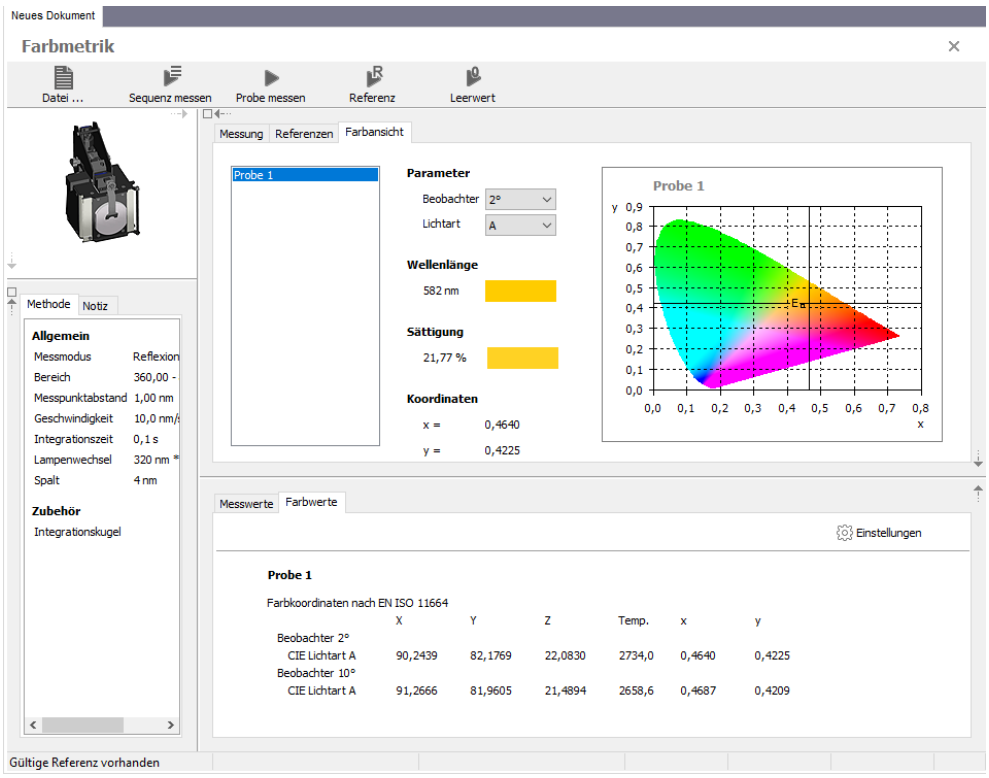


Seite **Automatisch archivieren** Keinen Eintrag vornehmen.

Seite **Notiz** Keinen Eintrag vornehmen.

Messung ausführen

- Im Dokumentfenster auf klicken.
  Die Startinformation zur Messung der Referenz erscheint.
- Referenzprobe, z. B den Weißstandard aus dem Zubehör der Integrationskugel, einsetzen und zum Start der Messung auf **Ja** klicken.
  - ✓ Die Referenzmessung erfolgt. Aufforderung zur Messung der Probe 1 erscheint.
- Probe 1 einsetzen und zum Start der Messung auf **Ja** klicken.
  - ✓ Das Probenspektrum erscheint im Dokumentfenster.



11 Allgemeine Gerätefunktionen – Menü Gerät

11.1 Gerätestatus anzeigen

Nach Wahl des Menüpunkts **Gerät** | **Info** wird der Gerätestatus des SPECORD PLUS angezeigt. Nach erfolgreicher Initialisierung werden Informationen zur Version der Firmware und angeschlossenes Zubehör ausgegeben.

Wenn das SPECORD PLUS nicht mit dem Computer verbunden ist, wird die Nachricht "Simulationsmode: SPECORD XXX PLUS" eingeblendet, wobei XXX dem im Fenster **Optionen** | **Start** | **Simulation** (Menüpunkt **Einstellungen** | **Optionen**) eingestelltem Gerät entspricht.

Sehen Sie dazu auch

Simulationsmodus konfigurieren [▶ 145]

11.2 Gerät initialisieren und Simulationsmodus starten

Entsprechend den Standardeinstellungen im Fenster **Optionen** | **Start** | **Start ASpect UV** wird beim Start des Programms und eingeschaltetem SPECORD PLUS eine Geräteinitialisierung ausgeführt, d. h. eine Verbindung zwischen Gerät und Computer hergestellt und das SPECORD PLUS in einen messbereiten Zustand versetzt.

Das Programm ASpect UV läuft im Simulationsmodus, wenn es nicht mit dem SPECORD PLUS verbunden ist. In diesem Modus können vorhandene Messwerte ausgewertet und bearbeitet werden. Darüber hinaus werden Messfunktionen simuliert; das Programm kann ohne eingeschaltetes Gerät erkundet werden.

Wenn die Verbindung zum SPECORD PLUS während des ASpect UV-Starts fehlschlägt, startet ASpect UV automatisch im Simulationsmodus. Durch eine nachträgliche Initialisierung kann das Gerät in den messbereiten Zustand versetzt werden.

SPECORD PLUS initialisieren

- Bei Bedarf Zubehör im SPECORD PLUS installieren und anschließen. SPECORD PLUS einschalten.
- Alle Dokumente in ASpect UV schließen.
- Den Menüpunkt **Gerät** | **Initialisierung** wählen oder das Icon **Initialisierung** in der Startleiste klicken.

  ✓ Der Monochromator des SPECORD PLUS bewegt sich und auf dem Bildschirm erscheint die Meldung **Initialisierung**. Wenn im Fenster **Optionen** | **Start** | **SPECORD PLUS** die Optionen zum Einschalten der Lampen nicht aktiviert sind, erfolgt eine Abfrage zum Einschalten der Lampen. Nach Ende der Einschaltphase der Lampen wird angeschlossenes Zubehör initialisiert und das SPECORD PLUS ist messbereit.

Simulationsmodus starten

- Alle Dokumente in ASpect UV schließen
- Menüpunkt **Gerät** | **Simulation** wählen.
- Die USB-Verbindung zum Gerät wird getrennt und das im Fenster **Optionen** | **Start** | **Simulationsmodus** vereinbarte Gerät und Zubehör aktiviert. Wenn keine weiteren Messungen mehr erfolgen sollen, kann das SPECORD PLUS am Netzschalter ausgeschaltet werden.

11.3 SPECORD PLUS korrigieren

Grund- und Gitterkorrektur

Das SPECORD PLUS ist ab Werk vollständig justiert und eingerichtet. Veränderungen des Justierzustandes durch Transport, Umgebungstemperatur oder Lampenwechsel werden durch das Programm ASpect UV korrigiert, ohne das mechanische Eingriffe am Gerät vorgenommen werden.

Folgende Parameter werden bei der Grundkorrektur geprüft und gegebenenfalls korrigiert:

- Offset (Dunkelstrom)
- 0. Ordnung der Lampen
- Verstärkerstufen der Empfänger
- Wellenlängenkorrektur mittels internem Holmiumfilter und UV-Lampe

Beim SPECORD 250 PLUS wird zusätzlich eine Gitterkorrektur ausgeführt, wobei das Gitter des Vormonochromators zum Gitter des Hauptmonochromators ausgerichtet wird.

HINWEIS

Führen Sie die Grundkorrektur erst nach 2 Stunden Einlaufzeit durch. In dieser Zeit müssen beide Lampen eingeschaltet sein.

Beim SPECORD 250 PLUS starten Sie zuerst die Gitterkorrektur und anschließend die Grundkorrektur.

- ▸ Proben und Zubehör, das den Strahlengang beeinflusst (Integrationskugel, Durchflussküvette o. ä.), aus den Strahlengängen im Probenraum entfernen.
- ▸ Nur SPECORD 250 PLUS: Den Menüpunkt **Gerät** | **Korrektur** | **Gitter-Korrektur** wählen.
  - ✓ Die Gitterkorrektur startet sofort.
- ▸ Den Menüpunkt **Gerät** | **Korrektur** | **Grundkorrektur** wählen.
  - ✓ Die Grundkorrektur startet sofort.
- ▸ Optional die Ergebnisse der Korrektur anzeigen.

Nach Ende der Korrekturprozedur werden die neuen Korrekturdaten im SPECORD PLUS und auf dem Computer dauerhaft gespeichert. Die Daten bleiben bis zur nächsten Aufnahme der Korrekturwerte bestehen und werden für alle weiteren Messungen zur Korrektur herangezogen.

Hinweis: Wenn ausschließlich mit aufwendig einzubauenden Zubehören wie peltiertemperierten Wechslern gemessen wird und wenn diese während der Initialisierung bereits eingebaut waren, können diese auch im Probenraum bleiben, wenn vor der Korrektur die Zubehörerkennung ausgeschaltet wurde. Die Proben müssen aus diesen Zubehören vorher entfernt werden.

Korrektur der Unendlichabsorbanz

Die Funktion der Korrektur der Unendlichabsorbanz steht nur zur Verfügung, wenn das optionale Modul "Validierung nach USP" installiert ist.

- ▸ Proben und Zubehör, das den Strahlengang beeinflusst (Integrationskugel, Durchflussküvette oder ähnliche), aus den Strahlengängen im Probenraum entfernen.
- ▸ Gitterkorrektur (bei SPECORD 250 PLUS) und Grundkorrektur ausführen (siehe oben).
- ▸ Den Menüpunkt **Gerät** | **Korrektur** | **Korrektur der Unendlichabsorbanz** wählen.
  - ✓ Die Aufnahme der Korrekturspektren startet.

Nach Ende der Korrektur werden die Korrekturspektren in ASpect UV auf dem Computer gespeichert. Die Daten bleiben bis zur nächsten Aufnahme der Korrekturspektren bestehen und werden für alle weiteren Messungen herangezogen.

Sehen Sie dazu auch

Messwertbildung und Aufnahme der Referenzwerte [▷ 186]

11.4 Messtechnischen Zustand des SPECORD PLUS prüfen

ASpect UV stellt Ihnen Funktionen zur Verfügung, um den messtechnischen Zustand des SPECORD PLUS zu überprüfen. Die Richtigkeit der Messwerte kann so validiert und Gerätefehler und Defekte leichter gefunden werden. Die Funktionen zur Überprüfung des SPECORD PLUS sind im Menü **Gerät** zu finden.

11.4.1 Lampenintensität kontrollieren

Die Halogenlampe für den Vis-Bereich und die Deuteriumlampe für den UV-Bereich unterliegen einem normalen Verschleiß. Durch Altern verschlechtern sich die Strahlungseigenschaften, was zu einem schlechteren Signal-Rausch-Verhältnis und damit einer geringeren photometrischen Reproduzierbarkeit und einem eingeschränkten Photometriebereich führt. Mit dem Lampentest wird überprüft, ob die Energie der Lampen noch ausreichend ist, um die technische Spezifikation des SPECORD PLUS zu erfüllen.

Wenn eine oder beide Lampen getauscht wurden, müssen die Gerätekorrekturen erneut vorgenommen werden.

- Proben und Zubehör, das den Strahlengang beeinflusst (Integrationskugel, Durchflussküvette o. ä.), aus den Strahlengängen im Probenraum entfernen.
- Menüpunkt **Gerät** | **Prüfung** | **Lampentest** wählen.
  - ✓ Es erfolgt nacheinander die Energiemessung der UV-Lampe und der Vis-Lampe.

Nach Abschluss der beiden Messungen erscheinen im Fenster **Lampentest** die Balkendiagramme der Messergebnisse der geprüften Lampen und die Information über den Lampenzustand:

- Die Energie der Lampe liegt im Normbereich
- Die Lampe nähert sich dem Ende ihrer Lebensdauer.
- Die Lampe sollte ausgetauscht werden!

11.4.2 Funktionsfähigkeit prüfen

ASpect UV enthält ein Diagnoseprogramm, mit dem folgende Funktionen des Geräts geprüft werden:

- Referenzmessung als Verhältnis von Mess- und Referenzstrahlengang in %T
- Energie in Mess- und Vergleichsstrahlengang
- Leerwertmessung in %T als 100-Prozent-Basislinie
- Wellenlängenrichtigkeit durch Registrierung der Spektrallinien der Deuteriumlampe bei 485,9 nm und 656,1 nm

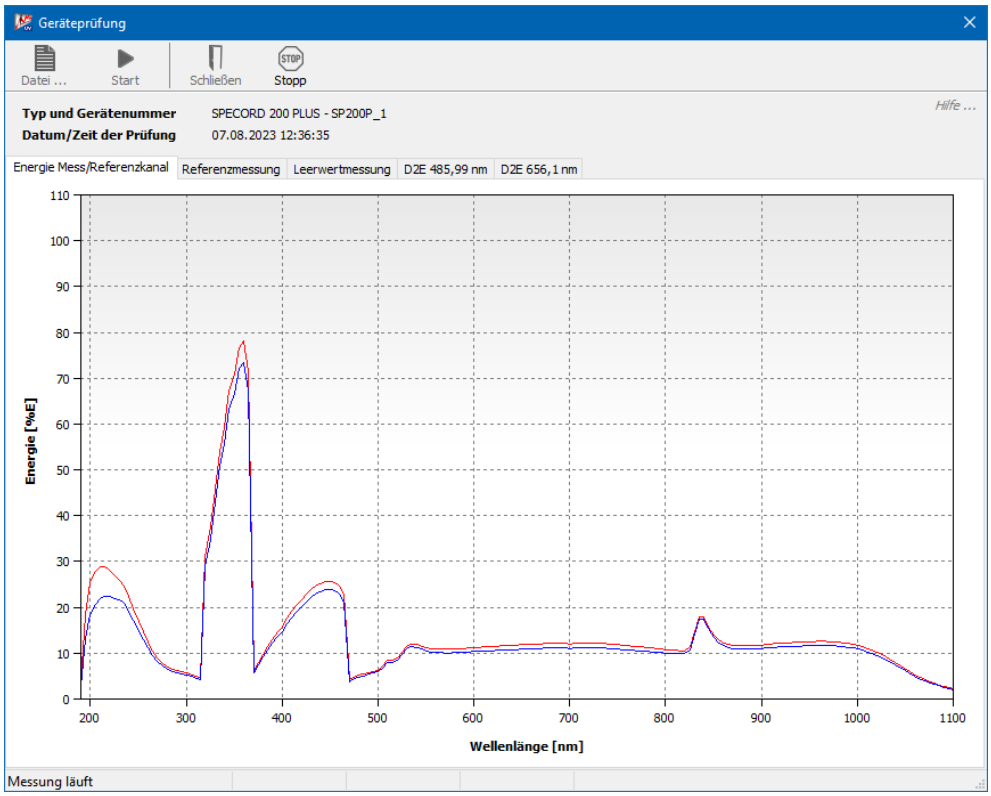
Die Ergebnisse der Diagnose können Sie ausdrucken und in einer Datei speichern.

- Proben und Zubehör, die den Strahlengang beeinflusst (Integrationskugel, Durchflussküvette o. ä.), aus den Strahlengängen im Probenraum entfernen.
- Im Hauptfenster Menüpunkt **Gerät** | **Prüfung** | **Geräteprüfung** wählen.
- Auf ▶ **Start** klicken.

✓ Die Prüfpunkte werden automatisch abgearbeitet.

Nach Abschluss der Prüfung erscheinen die Messkurven auf den 4 Tabs des Fensters **Geräteprüfung**. Bei eventuellen Gerätefehlern werden entsprechende Meldungen ausgegeben.

Anzeige nach Geräteprüfung



Für die Kurvenansicht steht die grafische Zoomfunktion zur Verfügung:

- Mit gedrückter linker Maustaste einen Rahmen um den zu vergrößernden Bereich ziehen. Durch Doppelklick auf die Grafik wird die Aktion rückgängig gemacht.

Die Ergebnisse der Geräteprüfung können über das Menü **Datei** gespeichert, wieder geöffnet und gedruckt werden.

11.4.3 Energie messen

Bei der Energiemessung werden die Energieverläufe in Referenz- und Messstrahlengang separat aufgezeichnet und als Energiewerte ausgegeben. Diese Funktion wird hauptsächlich durch den Service genutzt, um den Gerätezustand zu beurteilen und Fehler ausfindig zu machen.

Nach Wahl des Menüpunkts **Gerät** | **Prüfung** | **Energiemessung** erscheint das gleichnamige Fenster.

Die Messparametereinstellungen erfolgen anlog zu den Einstellungen im Modul **Spektrum** mit folgenden Einschränkungen:

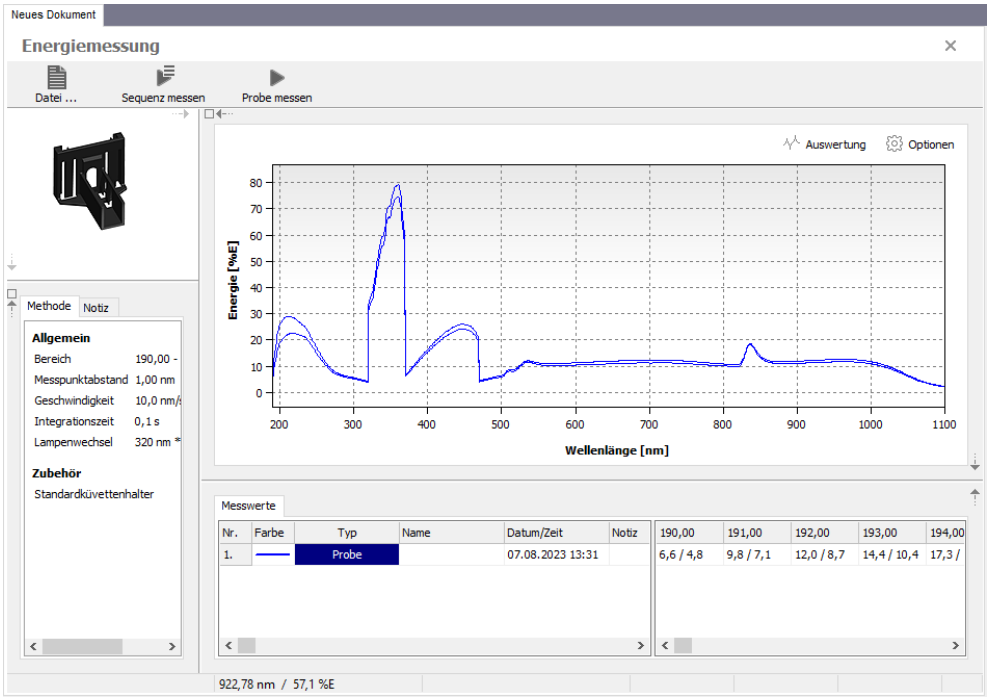
- Es wird nur das Energiesignal aufgenommen.
- Es ist keine Kalibrierung vorgesehen.
- Es gibt nur den Probentyp **Probe**.

Energiemessung starten/auswerten

Nach Auswahl der Messparameter sind die Icons zum Start der Energiemessung freigeschaltet.

- Energiemessung mit Klick auf **Probe messen** starten.
- Ggf. weitere Messungen hinzufügen.

- Für die Auswertung der Daten können die Funktionen **Peakliste**, **Werte def. Wellenlängen** und **Formel** angewendet werden.



11.4.4 Nullte Ordnung einstellen

Mit der Funktion **Nullte Ordnung** wird der Monochromator in eine Position gedreht, in der das Licht am Gitter nicht zerlegt, sondern wie an einem Spiegel reflektiert wird. Das unzerlegte (weiße) Licht geht durch den Probenraum und lässt sich aufgrund seiner Intensität gut beobachten. Dies wird genutzt, um Zubehör, z. B. Mikroküvetten, im Strahlengang zu justieren. Die Nullte Ordnung kann für die Halogenlampe und die Deuteriumlampe jeweils separat eingestellt werden.

- Für die Einstellung der Nullten Ordnung der Deuteriumlampe den Menüpunkt **Gerät** | **Nullte Ordnung** | **UV Lampe** wählen.
- Für die Einstellung der Nullten Ordnung der Halogenlampe den Menüpunkt **Gerät** | **Nullte Ordnung** | **Vis Lampe** wählen.
  - ✓ Die Lampenstrahlung geht nun unzerlegt durch den Monochromator und wird im Probenraum sichtbar.

11.5 Zusätzliche Funktionen zur Zubehörsteuerung

Folgende Funktionen für die Zubehörsteuerung sind im Menü **Gerät** verfügbar:

- Erkennung des aktiven Zubehörs ein- und ausschalten
- Aktives Zubehör elektrisch ein- und ausschalten
- Küvettenwechsler und Probengeber auf einzelne Positionen fahren
- Küvettenwechsler justieren
- Pumpzeiten optimieren
- Bei peltiertemperierten Zubehören: Abfrage des Temperaturbereichs und der aktuellen Temperaturen

11.5.1 Zubehör aus-/einschalten

Mit dieser Funktion wird elektrisch angesteuertes Zubehör abgeschaltet. Dazu wird das Zubehör in die Parkposition gefahren und die Stromzufuhr unterbrochen. Das Zubehör kann so bequemer und ohne Gefahr eines Kurzschlusses aus dem Probenraum ausgebaut werden.

- Im Hauptfenster Menüpunkt **Gerät** | **Zubehör** | **Aus** wählen.
  - ✓ Das Zubehör wird abgeschaltet und erscheint nicht mehr in den Methodenparametern. Das Zubehör kann jetzt aus dem Probenraum ausgebaut werden.
- Um das Zubehör wieder zu aktivieren, den Menüpunkt **Gerät** | **Zubehör** | **Ein** wählen.
  - ✓ Das Zubehör wird initialisiert und ist wieder für Methoden und Messungen verfügbar.

HINWEIS

Wenn der Zubehörstecker nicht aus dem Anschluss am SPECORD PLUS gezogen wird, dann wird bei der nächsten Initialisierung des Gerätes das Zubehör automatisch wieder erkannt.

11.5.2 Erkennung des aktiven Zubehörs aus- und einschalten

Diese Funktion ist nur für das Küvettenkarussel von Bedeutung. Die Erkennung des aktiven Zubehörs kann softwaregestützt ausgeschaltet werden, ohne dass der Identifikationsstecker gezogen wird. In anschließend geöffneten Methodenparametern wird das Zubehör als passives Zubehör behandelt, obwohl das Zubehör weiter mit Strom versorgt wird. Verwenden Sie diese Funktion, wenn Sie das Küvettenkarussell nur als Halter verwenden. Wenn das Küvettenkarussel unbestromt ist, dreht sich der Teller frei und Küvetten können nicht reproduzierbar platziert werden.

- Den Menüpunkt **Gerät** | **Zubehör** | **Zubehörerkennung aus** wählen.
  - ✓ Die Zubehörerkennung wird abgeschaltet und nicht mehr für folgende Messungen verwendet. Das Zubehör ist jedoch weiterhin bestromt.
- Um das Zubehör wieder zu aktivieren, den Menüpunkt **Gerät** | **Zubehör** | **Zubehörerkennung ein** wählen.
  - ✓ Das Zubehör ist wieder für Methoden und Messungen verfügbar.

11.5.3 Küvettenwechsler justieren und einzelne Positionen anfahren

Positionen im Küvettenwechsler anfahren

Der Küvettenwechsler oder das Küvettenkarussell kann auf eine bestimmte Probenposition gefahren werden.

- Im Hauptfenster Menüpunkt **Gerät** | **Zubehör** | **Proben-Position** wählen.
- Im Fenster **Proben-Position** mit den Buttons auf die gewünschte Position fahren.
  - ✓ Der Küvettenwechsler fährt auf die angegebene Position.

Button	Beschreibung
Pos. 1	Küvettenwechsler auf Position 1 fahren und initialisieren
Pos. +1	Küvettenwechsler auf die nächste Position fahren
Parken	Küvettenwechsler in Parkstellung fahren In der Parkstellung kann der Küvettenwechsler leichter im Probenraum montiert bzw. in seiner Aufbewahrungsbox verpackt werden.

Küvettenwechsler justieren

Um die Küvetten optimal im Strahlengang zu positionieren, kann der Küvettenwechsler rechnergesteuert justiert werden.

Eine Justierung ist nötig bei
- erstmaligem Gebrauch des Küvettenwechslers
- bei Verwendung von Spezialküvetten
- nach einer Grundkorrektur
- nach einem Transport des SPECORD PLUS

- Den leeren Küvettenwechsler im Probenraum montieren.
- Das SPECORD PLUS einschalten und ASpect UV starten.
- Bei Verwendung von Mikroküvetten: Mikroküvetten mit Lösungsmittel, z. B. Wasser, füllen und jeden Platz im Probenwechsler damit bestücken.
  Bei Verwendung von Standard- oder Halbmikroküvetten: Alle Plätze im Küvettenwechsler leeren.
- Justierung mit dem Menüpunkt **Gerät** | **Zubehör** | **Justieren** starten.
  - ✓ Die Justierung wird automatisch ausgeführt und die Korrekturwerte im Gerät und auf dem PC gespeichert.

11.5.4 Pumpzeit des Kassetten-Sipper-Systems optimieren

Bei der Ermittlung der optimalen Pumpzeit erfolgt eine stetige Messwertaufnahme, während die Probe oder die Referenzlösung durch die Küvette gepumpt wird. Auf dem Bildschirm wird die Veränderung der Energie, Absorption und Transmission auf 3 Tabs über der Zeit angezeigt. Im Verlauf steigt der Messwert an oder ab und erreicht schließlich ein Plateau. Die optimale Pumpzeit entspricht dem Erreichen der Plateauphase. Zu diesem Zeitpunkt ist die Küvette ausreichend mit Probe oder Referenz gespült und die Verschleppung am geringsten.

Funktionen des Fensters Pumpzeit optimieren

In der Menüleiste sind folgende Funktionen angeordnet:

Funktion	Beschreibung
Datei ...	Menü für die Datenverwaltung **Speichern** Optimierungsdaten speichern **Öffnen** Optimierungsdaten öffnen **Beenden** Optimierung der Pumpzeit beenden

Funktion	Beschreibung
Start	Optimierung starten
Pumpe ein / **Pumpe aus**	Pumpe unabhängig vom Start der Messung ein- und ausschalten
Stopp	Messung vorzeitig beenden

Auf dem Tab **Einstellungen** folgende Parameter eingeben:

Parameter	Beschreibung
Wellenlänge	Analysenwellenlänge der Probe
Messzeit	Gesamtmesszeit für die Optimierung
Integrationszeit	Zeit für die Aufnahme eines Messpunktes, z. B. 0,1 s
Spalt	Nur SPECORD 210/250 PLUS: Spalteinstellung, z. B. 1 nm
Start Pumpe	Zeitpunkt innerhalb der Messung, ab dem die Pumpe läuft
Stopp Pumpe	Zeitpunkt innerhalb der Messung, an dem die Pumpe stoppt
Langsamlauf	Die Pumgeschwindigkeit auf die Hälfte vom Normallauf verringern, um das Entgasen oder Entmischen zu reduzieren oder um bei geringen Probenvolumina genauer zu dosieren zu können
Energie, **Absorption**, **Transmission**	Ordinatenbereich für die Anzeige der Messwerte auf den entsprechenden Tabs

Optimierung ausführen

- Referenz- und Probenlösung bereitstellen.
- Optimierung mit dem Menüpunkt **Gerät** | **Zubehör** | **Pumpzeit optimieren** starten.
- Durchflussküvetten aus dem Halter nehmen und mit Referenzlösung füllen:
  - Ansaugschlauch in Referenzlösung tauchen und auf klicken.
  - Wenn die Küvette blasenfrei gefüllt ist, Pumpe mit einem Klick auf stoppen.
- Durchflussküvette in den Halter stellen und Ansaugschlauch in die Probenlösung tauchen.
- Messung mit einem Klick auf starten.
  - ✓ Zu Beginn wird automatisch die Referenz ermittelt und anschließend werden die Messwerte aufgezeichnet.
- Messwertänderung auf einer der Tabs **Energie**, **Absorption** oder **Transmission** verfolgen:
  - Der Zeitbereich, indem die Pumpe läuft, ist weiß hinterlegt. Der Bereich, in dem die Pumpe gestoppt ist, ist grau.
  - Die Pumpzeit ist optimal, wenn der Messwert stabil ist bzw. die geforderte Genauigkeit erreicht hat.
  - In der Zeit nach Abschalten der Pumpe, kann beobachtet werden, ob die Probe stabil bleibt oder sich durch abklingende Turbulenzen noch ändert.

11.5.5 Probengeber APG justieren, einzelne Positionen anfahren und Pumpzeit optimieren

Einzelne Positionen anfahren

Einzelne Positionen des Probengebers können separat angefahren werden.

- Den Menüpunkt **Gerät** | **Zubehör** | **Proben-Position** wählen.
- Im Positionierfenster **APG-64 xyz–Probengeber** mit den Buttons den Probengeberarm auf die gewünschte Position fahren.

Probengeber justieren

Abhängig von der Größe der Öffnung der Probengefäße müssen die Probenpositionen ggf. nachjustiert werden.

- Probentablett an den 4 Ecken mit einem Probengefäß bestücken.
- Auf eine der Positionen klicken und den Probengeberarm über die Position fahren.
- Mit dem Icon (nach unten) im Positionierfenster den Kanülenhalter ohne Kanüle absenken. Danach Kanüle einsetzen und kurz über den Gefäßrand positionieren.
- Über **Offx** und **Offy** die Kanüle mittig positionieren. Vorgang an den anderen 3 Ecken wiederholen und die Werte für Offx und Offy vermitteln.
- Die endgültige Eintauchtiefe einstellen. Dafür den Probenansaugschlauch bei abgesenktem Probenarm in seiner Führung verschieben.

Folgende Funktionen stehen im Fenster für die Justierung des Probengebers zur Verfügung:

Button	Beschreibung
Offx / **Offy**	Kanüle in x- und y-Richtung mittig zum Gefäß einstellen
	Z-Hub des Probengeberarms einstellen
Werkseinstellungen	Werkseinstellungen wieder herstellen
Pos. 0	APG initialisieren und die Position 0 anfahren Die Position 0 kann nur im Positionierfenster angefahren werden. Mit einem separaten Spülgefäß auf dieser Position kann das System vorgespült werden.

Probengeber APG S

Beim APG S kann das Probentablett auf Kundenbedürfnisse angepasst werden. Dafür werden im Positionierfenster zusätzliche Funktionen angezeigt:

Funktion	Beschreibung
nx / **ny**	Die Anzahl der Probengefäße über die Anzahl der Tabellenzeilen (nx) und –spalten (ny) einstellen
nx0 / **ny0**	Die Position 1 in x-/y-Richtung verschieben
lx / **ly**	Die Probenposition über die Abstände der Probengefäße zueinander einstellen Die grafische Darstellung in ASpect UV wird nicht angepasst.

Pumpzeit optimieren

Die Pumpzeit des Kassetten-Sipper-Systems muss für den Transportweg des Probengebers optimiert werden.

- Referenz- und Probenlösung bereitstellen.
- Justierung mit dem Menüpunkt **Gerät** | **Zubehör** | **Pumpzeit optimieren** starten.
- Auf **Probenpositionen** klicken und Position der Referenz anfahren.
- Mit Klick auf **Kanüle absenken** Probengeberarm absenken.

Weiter verfahren wie für die Pumpzeitoptimierung des Kassetten-Sipper-Systems beschrieben. Dabei mit den Buttons , und die Positionen auf dem APG anfahren und Probengeberarm absenken bzw. nach oben fahren.

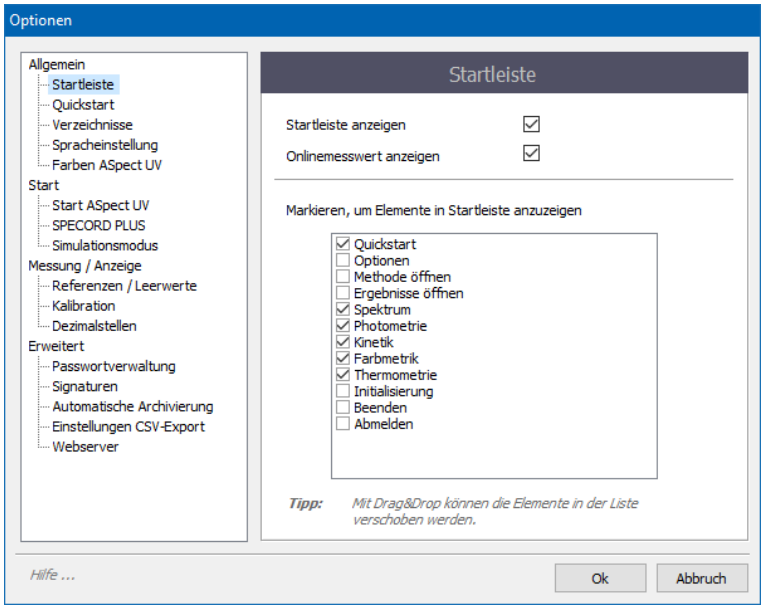
Sehen Sie dazu auch

Pumpzeit des Kassetten-Sipper-Systems optimieren [▶ 138]

12 ASpect UV im Fenster Optionen einrichten

In ASpect UV gibt es eine Anzahl Funktionen, mit denen Sie die Ansicht, den Start und die Ausführung des Programms beeinflussen können. So können Sie beispielsweise beim Start des Programms ein Quickstart-Menü mit Ihren gebräuchlichsten Methoden anzeigen lassen oder Voreinstellungen für die Kalibration in den einzelnen Modulen treffen.

Die Einstellungen werden im Fenster **Optionen** vorgenommen. Zur besseren Übersicht sind die Seiten des Fenster thematisch in die Gruppen **Allgemein**, **Start**, **Messung / Anzeige** und **Erweitert** geordnet.



12.1 Startleiste konfigurieren

Die Startleiste auf der linken Seite der Arbeitsoberfläche erlaubt Ihnen einen schnellen Zugriff auf einzelne Module und Funktionen von ASpect UV.

- Mit dem Menüpunkt **Einstellungen** | **Optionen** das Fenster **Optionen** | **Allgemein** | **Startleiste** öffnen.
- Die Optionen der gewünschten Elemente aktivieren und per Drag&Drop (mit gedrückter Maustaste) die aktivierten Elemente in die gewünschte Reihenfolge ziehen.
- Mit **Ok** die Einstellungen bestätigen und das Fenster **Optionen** verlassen.
  - ✓ Die Elemente werden in der gewählten Reihenfolge in der Startleiste des Hauptfensters angezeigt.

12.2 Quickstart konfigurieren

Der Quickstart ist eine Methodensammlung, in der Sie ihre Routinemethoden hinterlegen können. Nach Aufruf des Quickstarts stehen Ihnen die Methoden zur Verfügung und können sofort gestartet werden. Zur besseren Übersicht können Sie ab ASpect UV 2.0 die Methoden in Gruppen anordnen. Im Fenster **Optionen** | **Allgemein** | **Quickstart** gibt es dafür 2 Listen, eine mit den angelegten Gruppen und eine mit den zu einer Gruppe zugeordneten Methoden.

Neues Quickstart-Element anlegen

Legen Sie zu Beginn eine neue Gruppe an und ordnen Sie dann der Gruppe die Methoden (Messparameterdateien) zu.

- Mit dem Menüpunkt **Einstellungen** | **Optionen** das Fenster **Optionen** | **Allgemein** | **Quickstart** öffnen.
- Für das Anlegen einer neuen Gruppe neben **Liste der Quickstart-Gruppenelemente** auf + klicken.
- Im Fenster **Neues Quickstartelement** einen Titel eingeben und mit **Ok** bestätigen.
  - ✓ Die neue Gruppe erscheint jetzt in der Gruppenliste.
- Für das Zuordnen einer Methode neben **Liste der Quickstartelemente** auf + klicken.
- Im Fenster **Neues Quickstartelement** einen Titel eingeben, in der Liste eine Gruppe auswählen und nach Klick auf ... eine Methodendatei auswählen.
- Eingaben mit **Ok** bestätigen.
- Mit **Ok** die Einstellungen bestätigen und das Fenster **Optionen** verlassen.
  - ✓ Die Einstellungen sind im Fenster **Quickstart** wirksam.

Elemente im Quickstart sortieren/editieren

Sie können die Reihenfolge der Gruppen und der Methoden, wie sie im Fenster **Quickstart** erscheinen sollen, sortieren.

- Ein Element in einer der Listen markieren und mit den Pfeilen neben **Gruppe** oder **Titel** an die gewünschte Position verschieben.
  Alternativ mit gedrückter Maustaste einen Eintrag in der jeweiligen Liste per Drag-and-Drop in die gewünschte Position ziehen.
  - ✓ Im Fenster **Quickstart** werden die Gruppen in aufeinanderfolgenden Tabs angeordnet. Die Methoden mit ihren Benennungen sind auf den Gruppentabs untereinander aufgeführt.

Den Elementen in einer Gruppe können Sie einen neuen Titel geben oder eine andere Methode zuweisen.

- Um einen Titel zu ändern, 2-mal langsam nacheinander auf das Feld des Titels klicken. Wenn nur der Text markiert ist, den neuen Titel eingeben und mit der Enter-Taste bestätigen.
- Um eine Methode zu ändern, auf das Methodenfeld klicken und anschließen auf ... klicken. Im Fenster **Öffnen** die neue Methode wählen.
  - ✓ Die Elemente werden entsprechend editiert.

Elemente aus dem Quickstart entfernen

Sie können den Quickstart bereinigen und nicht mehr benötigte Elemente löschen.

- Zum Löschen einer Methode zunächst die Gruppe, zu welcher die Methode zugeordnet ist, auswählen und dann das Methodenelement in der Liste markieren.
- Neben **Liste der Quickstartelemente** auf - klicken.
  - ✓ Das Methodenelement wird aus der Liste gelöscht und erscheint nicht mehr im Fenster **Quickstart**.

Eine Gruppe kann nur entfernt werden, wenn sie keine Methoden enthält. Das Fenster **Quickstart** muss mindestens eine Gruppe enthalten.

- Zum Löschen einer Gruppe, die Gruppe in der Liste markieren.
- Neben **Liste der Quickstart-Gruppenelemente** auf - klicken.
  - ✓ Die Gruppe wird aus der Liste gelöscht und erscheint nicht mehr als Tab im Fenster **Quickstart**.

Sehen Sie dazu auch

- Start von ASpect UV mit Modul oder Quickstart konfigurieren [▶ 9]
- Quickstart verwenden [▶ 10]

12.3 Verzeichnisse voreinstellen

Sie können Verzeichnisse zum Laden oder Speichern von Daten (Methoden, Ergebnisse, Kalibrationen, Vorlagen für Druck und Export, Probeninformationsdaten) voreinstellen. Die Einstellungen können Sie separat für jedes Modul oder für alle Module in ASpect UV vornehmen.

- Mit dem Menüpunkt **Einstellungen** | **Optionen** das Fenster **Optionen** | **Allgemein** | **Verzeichnisse** öffnen.
- In der Liste **Modul** das Modul, für das die Verzeichnisse eingestellt werden sollen, auswählen. Wenn für alle Module das gleiche Verzeichnis voreingestellt werden soll, die Option **Alle Module** wählen.
- In der Liste eine Funktion, z. B. **Methode öffnen**, und in der danebenstehenden Liste eine Verzeichnisoption wählen:
  - **Zuletzt verwendeter Pfad**: Beim nächsten Laden/Speichern der gewählten Daten wird zunächst der zuletzt verwendete Pfad angezeigt.
  - **Voreingestellter Pfad**: Beim nächsten Laden/Speichern wird der hier eingestellte Pfad angezeigt.
- Auf ... klicken und den Pfad im Fenster **Ordner auswählen** einstellen.

Hinweis: Wenn Sie eine Datei über die Menüpunkte **Datei** | **Ergebnisse öffnen** oder **Datei** | **Methode öffnen** wählen, dann wird das zuletzt geöffnete Verzeichnis angezeigt.

12.4 Sprache einstellen

Sie können in ASpect UV verschiedene Sprachen für die Programmoberfläche wählen. Für die Sprachumstellung darf kein Dokument/Modul geöffnet sein.

- Alle Dokumente in ASpect UV schließen.
- Mit dem Menüpunkt **Einstellungen** | **Optionen** das Fenster **Optionen** | **Allgemein** | **Spracheinstellung** öffnen.
- In der Liste **Sprache** eine Sprache für die Oberfläche wählen.
- Mit **Ok** die Einstellungen bestätigen und das Fenster **Optionen** verlassen.
  - ✓ Die Oberfläche von ASpect UV wird in der gewählten Sprache angezeigt.

12.5 Farbschema einstellen

Sie können die Farben der Programmoberfläche ändern.

- Mit dem Menüpunkt **Einstellungen** | **Optionen** das Fenster **Optionen** | **Allgemein** | **Farben ASpect UV** öffnen.
- In der Liste **Element** ein Objekt wählen und mit Klick auf die Farbe wählen. So weiter verfahren, bis allen Elementen die Farben zugeordnet sind.

- Mit das erstellte Farbschema speichern.
- Mit ein gespeichertes Farbschema laden.
- Mit die Voreinstellung der Farben wieder herstellen.
- Mit **Ok** die Einstellungen bestätigen und das Fenster **Optionen** verlassen.
  ✓ Das neue Farbschema wird auf die Programmoberfläche angewendet.

12.6 Startmodus für ASpect UV festlegen

ASpect UV startet in der Voreinstellung mit einer leeren Arbeitsoberfläche. Sie können jedoch auch direkt mit einem neuen Dokument in einem favorisierten Modul oder mit dem Quickstart beginnen. Außerdem können Sie wählen, ob das SPECORD PLUS beim Start mit ASpect UV verbunden und initialisiert wird oder die Initialisierung später erfolgen soll.

- Mit dem Menüpunkt **Einstellungen** | **Optionen** das Fenster **Optionen** | **Start** | **Start ASpect UV** öffnen.
- Wenn sich das Gerät beim Start mit ASpect UV verbinden soll, die Option **Gerät initialisieren** aktivieren.
  Hinweis: Erst SPECORD PLUS einschalten und warten bis die Ausrichtung der Monochromatorantriebe beendet ist. Anschließend ASpect UV starten.
- Wenn ASpect UV mit einem bestimmten Modul oder den Quickstart gestartet werden soll, in der Liste **Element** dieses auswählen.
- Mit **Ok** die Einstellungen bestätigen und das Fenster **Optionen** verlassen.
  ✓ Die Einstellungen werden beim nächsten Start von ASpect UV wirksam.

12.7 Lampen einschalten und Monitor-Datei aufzeichnen

Beim Initialisieren des Geräts können Sie die beiden Lampen automatisch einschalten lassen. Wenn Sie das automatische Einschalten deaktivieren, erscheint beim Initialisieren und Start einer Methode die Frage, ob die Lampen eingeschaltet werden sollen. Die Lampen werden erst eingeschaltet, wenn Sie die Frage mit **Ja** beantworten. Sie können Lampen auch ausschalten, wenn sie nicht mehr benötigt werden. Beachten Sie jedoch dabei, dass häufiges Einschalten der Lampen ihre Lebensdauer verringert.

In einem Service-Fall können Sie bei einer Fernwartung aufgefordert werden, die Monitordatei zu aktivieren. Die Monitordatei zeichnet den Datenverkehr zwischen Gerät und Software auf und kann dem Service Hinweise auf einen möglichen Fehler geben.

- Mit dem Menüpunkt **Einstellungen** | **Optionen** das Fenster **Optionen** | **Start** | **SPECORD PLUS** öffnen.
- Zum automatischen Einschalten der Lampen bei der Initialisierung die Optionen **UV Lampe einschalten** oder **Vis Lampe einschalten** aktivieren.
- Zum Aufzeichnen der Monitordatei die Option **Monitor-Datei** aktivieren.
  Beim nächsten Start einer Messung wird der Datenverkehr aufgezeichnet.
- Zum Ausschalten der beiden Lampen die entsprechende Option **UV aus** oder **Vis aus** aktivieren.
- Zum manuellen Einschalten der Lampen **UV ein** oder **Vis ein** ein wählen.
- Mit **Ok** die Einstellungen bestätigen und das Fenster **Optionen** verlassen.

✓ Die Einstellungen zum automatischen Einschalten der Lampe werden beim nächsten Programmstart wirksam.

12.8 Simulationsmodus konfigurieren

Sie können ASpect UV ohne eingeschaltetes Gerät verwenden, um Daten auszuwerten oder Methoden für Routine-Messungen zu erstellen. Dazu wird ASpect UV in einem Modus betrieben, der ein angeschaltetes Gerät und verwendetes Zubehör simuliert. Besonders für die Erstellung der Methoden ist dies notwendig, weil die einstellbaren Parameter von Gerät und Zubehör abhängig sind. Im Simulationsmodus werden auch Messungen simuliert. Sie können deshalb diesen Modus verwenden, um ASpect UV ohne Gerät zu erkunden.

- Mit dem Menüpunkt **Einstellungen** | **Optionen** das Fenster **Optionen** | **Start** | **Simulationsmodus** öffnen.
- In der Liste **Gerät** den Gerätetyp wählen.
- In der Liste **Zubehör** das Zubehör wählen.
- Mit **Ok** die Einstellungen bestätigen und das Fenster **Optionen** verlassen.
  ✓ Die Einstellungen werden im Simulationsmodus übernommen.

12.9 Zeitliche Gültigkeiten von Referenzen und Leerwerten definieren

Ab ASpect UV 2.0 können Sie gespeicherte Referenzen und Leerwerte laden und für weitere Probenmessungen verwenden. Die Gültigkeit dieser Referenzspektren oder Referenzwerte können Sie zeitlich einschränken. Wenn Sie nicht auf gespeicherte Referenzen oder Leerwerte zurückgreifen möchten, müssen Sie diese Einstellungen nicht vornehmen.

- Mit dem Menüpunkt **Einstellungen** | **Optionen** das Fenster **Optionen** | **Messung / Anzeige** | **Referenzen / Leerwerte** öffnen.
- Jeweils für **Referenzen** und **Leerwerte** die Option **Gültigkeitsdauer** aktivieren und im Feld **Tage** die Anzahl der Tage angeben.
- Mit **Ok** die Einstellungen bestätigen und das Fenster **Optionen** verlassen.
  ✓ Die Gültigkeitsdauer für Referenzen und Leerwerte wird übernommen.

12.10 Einstellungen für Kalibrationen definieren

Sie können für Kalibrationen die Gültigkeit anhand des zur erreichenden Bestimmtheitsmaßes oder der Zeitdauer definieren. Wenn das Bestimmtheitsmaß nicht erreicht wurde, wird die Kalibration verworfen und muss neu erstellt werden. Ebenfalls verworfen werden Kalibrationen, deren Gültigkeitsdauer überschritten wurde. Außerdem können Sie Voreinstellungen für die Methodenparameter der Kalibration definieren.

- Mit dem Menüpunkt **Einstellungen** | **Optionen** das Fenster **Optionen** | **Messung / Anzeige** | **Kalibration** öffnen.
- Wenn die Kalibration generell ein Bestimmtheitsmaß erreichen muss, die Option **Bestimmtheitsmaß** aktivieren und im Feld daneben den Wert eingeben.
- Wenn die Kalibration nur eine bestimmte Zeit verwendet werden soll, die Option **Gültigkeitsdauer** aktivieren und im Feld daneben den Wert eingeben.

- Für die Methodenparameter bei Bedarf Voreinstellungen wählen:
  - **Regression**: Berechnungsmodell für die Kalibrierkurven
  - **Einheit**: Konzentrationseinheit
  - **Schichtdicke**: Schichtdicke der Küvetten
  - **Oberer Grenzwert** und **Unterer Grenzwert**: Konzentrationsgrenzwerte zwischen denen die Kalibration gültig ist. Gemessene Probenkonzentrationen jenseits eines Grenzwertes werden markiert.
- Mit **Ok** die Einstellungen bestätigen und das Fenster **Optionen** verlassen.
  - ✓ Die Einstellungen werden auf die folgenden Messungen und Berechnungen der Kalibrationen angewendet.

12.11 Dezimalstellen für Ausgabewerte festlegen

Sie können die Anzahl der angezeigten und für den Export verwendeten Dezimalstellen für alle Zahlenwerte in ASpect UV festlegen.

- Mit dem Menüpunkt **Einstellungen** | **Optionen** das Fenster **Optionen** | **Messung / Anzeige** | **Dezimalstellen** öffnen.
- In der Liste **Auswahl Kategorie** eine Anwendung oder ein Modul auswählen.
- Mit den Pfeiltasten neben den Messgrößen können die Anzahl Dezimalstellen vergrößert oder verringert werden.
- Mit **Ok** die Einstellungen bestätigen und das Fenster **Optionen** verlassen.
  - ✓ Die Einstellungen werden auf die nächsten Messungen und Berechnungen angewendet.

Hinweis: Die interne Rechengenauigkeit für Gleitkommazahlen ist double. Beachten Sie deshalb beim Export die notwendige Dezimalstellenanzahl zu setzen um Rechenungenauigkeiten zu reduzieren.

12.12 Eigenschaften von Passwörtern konfigurieren

Wenn Sie das Modul FDA 21 CFR Part 11 Compliance mit der Benutzerverwaltung verwenden, können Sie die Kriterien für die Gültigkeit von Passwörtern einstellen. Diese Seite im Fenster **Optionen** sollte nur für Administratoren freigeschaltet werden.

- Mit dem Menüpunkt **Einstellungen** | **Optionen** das Fenster **Optionen** | **Erweitert** | **Passwortverwaltung** wählen.
- Bei Bedarf die Optionen aktivieren.
- Mit **Ok** die Einstellungen bestätigen und das Fenster **Optionen** verlassen.

Einstellungen für die Passwörter

Option	Beschreibung
Check Minimale Länge	Mindestanzahl von Zeichen für das Passwort
Groß- und Kleinschreibung	Passwort muss Groß- und Kleinbuchstaben enthalten
Sonderzeichen (? *#/\^°)	Passwort muss mindestens ein Sonderzeichen enthalten
Ziffern	Passwort muss mindestens eine Ziffer enthalten

Option	Beschreibung
die letzten Passwörter dürfen nicht verwendet werden	Bei der Erstellung eines neuen Passworts wird geprüft, ob der Benutzer dieses schon einmal verwendet hat. Wurde ein Passwort bereits unter den letzten Passwörtern (Anzahl) verwendet, wird es zurückgewiesen.

12.13 Signaturen anlegen

Wenn Sie das Zusatzmodul FDA 21 CFR Part 11 Compliance verwenden, können Sie ASpect UV-Dateien signieren. Mit einer Signatur schränken Sie die weiteren Bearbeitungsmöglichkeiten für ein Dokument ein. Der Grad der Einschränkung ist für jede angelegte Signatur frei wählbar. Optional können Sie für Signaturen eine Reihenfolge festlegen, mit der ein Dokument nacheinander signiert werden muss.

Im Fenster **Optionen** | **Erweitert** | **Signaturen** verwalten Sie die Signaturen und deren Eigenschaften. Auf dem Tab **Liste der Signaturen** werden die vorhandenen Signaturen mit den hinterlegten Funktionen angezeigt, neue Signaturen hinzugefügt und Signaturen gelöscht. Auf dem Tab **Signaturreihenfolge** können Sie eine verbindliche Signaturreihenfolge festlegen.

Signaturen hinzufügen, editieren, löschen

- Mit dem Menüpunkt **Einstellungen** | **Optionen** das Fenster **Optionen** | **Erweitert** | **Signaturen** öffnen.
- Auf den Tab **Liste der Signaturen** wechseln.
- Um eine Signatur hinzuzufügen, auf + klicken und damit das Fenster **Signatur hinzufügen** öffnen.
  - Im Eingabefeld **Name** die Signaturbezeichnung und im Feld **Beschreibung** eine zusätzliche Erläuterung eingeben.
  - Auf den Tabs **Dokument**, **Messablauf** und **Arbeitsblatt** jeweils die Funktionen aktivieren, die nach der jeweiligen Signatur weiterhin mit der Datei ausgeführt werden können.
- Um eine vorhandene Signatur zu bearbeiten, einen Doppelklick auf die betreffende Signatur in der Liste ausführen.
- Eine nicht benötigte Signatur in der Liste markieren und mit einem Klick auf - löschen.
  Es können nur Signaturen gelöscht werden, die nicht in der Signaturreihenfolge enthalten sind.

HINWEIS

Funktionen, die nach einer Signatur nicht mehr ausgeführt werden dürfen, dürfen auch nach einer weiteren Signatur nicht wieder ausgeführt werden. Eine Signatur kann nicht die Beschränkungen einer vorhergehenden Signatur aufheben.

Signaturreihenfolge festlegen

Wenn Sie eine Signaturreihenfolge festlegen, können die darin enthaltenen Signaturen nur in der vorgegebenen Reihenfolge erfolgen. Ein Dokument ist erst dann vollständig signiert, wenn alle Signaturen abgearbeitet sind. Bei einem unvollständig signierten Dokument erfolgt ein Hinweis beim Speichern und Öffnen der Datei, dass die Datei nicht vollständig signiert wurde.

Signaturen in der Liste **Verfügbare Signaturen** sind nicht in der Signaturreihenfolge enthalten. Sie können zu einem beliebigen Zeitpunkt und in beliebiger Reihenfolge für ein Dokument verwendet werden.

- Im Fenster **Optionen** | **Erweitert** | **Signaturen** den Tab **Signaturreihenfolge** wählen.

- In der Liste **Verfügbare Signaturen** eine Signatur wählen und mit der Pfeilschaltfläche in die Liste **Einzuhaltenden Reihenfolge beim Signieren** verschieben.
- Auf die gleiche Weise alle weiteren benötigten Signaturen in der Liste **Einzuhaltenden Reihenfolge beim Signieren** sammeln.
- Die gesammelten Signaturen der Reihe nach sortieren. Jeweils eine Signatur markieren und mit den Pfeilschaltflächen auf der rechten Seite der Liste in die nötige Position verschieben.
  Die Signaturen werden von oben nach unten abgearbeitet.
- Signaturen, die nicht in der Reihenfolge benötigt werden, können Sie markieren und mit der Pfeilschaltfläche in der Mitte wieder in die Liste **Verfügbare Signaturen** zurück verschieben.
- Mit **Ok** die Einstellungen bestätigen und das Fenster **Optionen** verlassen.
  ✓ Die Dokumente können jetzt signiert werden.

HINWEIS

Das Recht, eine bestimmte Signatur zu verwenden, muss jedem Benutzer im Benutzerprofil zugewiesen werden.

Sehen Sie dazu auch

Elektronische Signatur [▸ 179]

12.14 Automatische Archivierung aktivieren

Sie können in ASpect UV eine automatische Archivierung der Dokumente vereinbaren. Diese Funktion müssen Sie im Fenster **Optionen** aktivieren und für jede Archivierungsfunktion den Zeitpunkt wählen. Den Dateinamen und die Reportoptionen für die automatische Archivierung legen Sie in der Methode fest.

- Mit dem Menüpunkt **Einstellungen** | **Optionen** das Fenster **Optionen** | **Erweitert** | **Automatische Archivierung** öffnen.
- Wenn programmweit eine automatische Archivierung erfolgen soll, die Option **Automatische Archivierung** aktivieren.
  Wenn die Option deaktiviert ist, wird programmweit die automatische Archivierung ausgeschaltet, unabhängig davon, ob diese Funktion in einer Methode aktiviert ist.
- In der Liste **Archivierungsfunktion** eine Funktion, z. B. **Speichern** wählen.
- Die Optionen aktivieren, bei denen die gewählte Archivierungsfunktion ausgeführt werden soll, z. B. **Beim Schließen des Dokumentes**.
- Alle weiteren Archivierungsfunktionen auf die gleiche Weise definieren.
- Wenn Sie die Daten bei der automatischen Archivierung gegen einen Verlust, verursacht durch Verbindungsprobleme, sichern wollen, aktivieren Sie die Funktion **Lokal Speichern nach Verbindungsproblemen**. In diesem Fall werden die Daten in den definierten Ordner gespeichert und können von dort aus gerettet werden.
- Mit **Ok** die Einstellungen bestätigen und das Fenster **Optionen** verlassen.
  ✓ Die Einstellungen werden bei der nächsten Methodenerstellung berücksichtigt.

12.15 CSV-Export konfigurieren

Für den CSV-Export nehmen Sie im Fenster **Optionen** programmweite Einstellungen vor.

- Mit dem Menüpunkt **Einstellungen** | **Optionen** das Fenster **Optionen** | **Erweitert** | **Einstellungen CSV-Export** öffnen.
- Die Einstellungen vornehmen und mit Klick auf **Ok** bestätigen.
  - ✓ Die Einstellungen werden beim nächsten CSV-Export verwendet.

Einstellungen für den CSV-Export

Option	Beschreibung
Transponiert	Ausgabe von Spalten und Zeilen im CSV-Export drehen Beispielsweise werden im Modul **Spektrum** voreingestellt die Wellenlänge fortlaufend in einer Zeile geschrieben und die dazugehörigen Messwerte in der nächsten Zeile angeordnet. In der transponierten Darstellung erfolgt die Ausgabe spaltenweise: eine Spalte mit den Wellenlängen und in der nächsten Spalte die dazugehörigen Messwerte.
Spaltentrenner	Folgende Spaltentrennzeichen können gewählt werden: ■ **Leerzeichen** ■ **Semikolon ";"** ■ **Komma ','** ■ **Tabulator**

13 Validierung des SPECORD PLUS (optional)

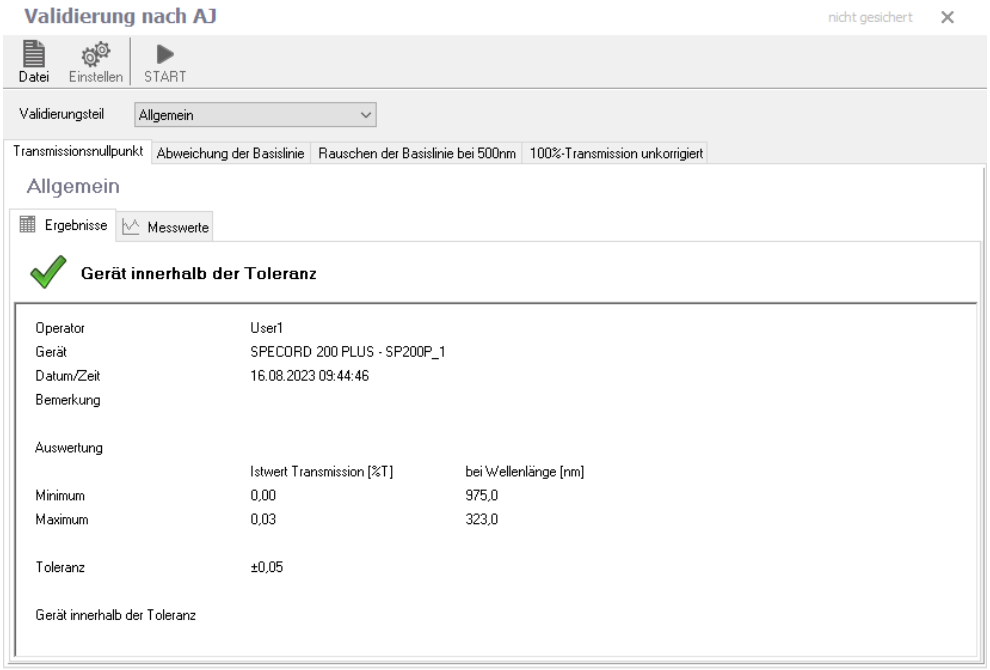
Zur Qualitätssicherung bei der Arbeit mit dem SPECORD PLUS wird empfohlen, regelmäßig eine Validierung auszuführen. Für die verschiedenen Anforderungen in den einzelnen Laboren sind folgende Module optional erhältlich:

- **Validierung nach AJ**: umfassende Validierung der messtechnischen Eigenschaften entsprechend den technischen Daten des Herstellers
- **Validierung nach Standard Ph. Eur.**: Validierung entsprechend den Anforderungen des Europäischen Arzneibuchs
- **Validierung nach USP**: Validierung entsprechend den Anforderungen des Arzneibuchs der Vereinigten Staaten von Amerika
- **Wartung economic**: Validierung im Rahmen eines Wartungsvertrages

13.1 Validierung nach AJ

Bei der **Validierung nach AJ** erfolgt eine umfassende Validierung der messtechnischen Eigenschaften entsprechend der technischen Spezifikation des Herstellers (siehe Technische Daten in der Bedienungsanleitung "SPECORD PLUS UV/Vis-Spektralphotometer"). Darüber hinaus können eigene Grenzwerte für die Validierung festgelegt werden, um das Gerät für eine bestimmte messtechnische Aufgabe zu validieren.

Modulfenster Validierung nach AJ



Das Modulfenster **Validierung nach AJ** erscheint nach Wahl des Menüpunkts **Gerät** | **Prüfung** | **Validierung** | **AJ**.

Der Umfang der zu prüfenden Parameter wird unter **Einstellen** festgelegt. Die Ergebnisse der Validierung werden für jeden Prüfparameter auf einem eigenen Tab angezeigt. Dabei werden jeweils auf dem Tab **Ergebnisse** die digitalen Prüfergebnisse ausgegeben und auf dem Tab **Messwerte** die gemessenen Spektren grafisch dargestellt. Im Listenfeld **Validierungsteil** kann jeweils eine Parametergruppe für die Anzeige ausgewählt werden.

Während der Validierung wird ein Audit Trail aufgezeichnet.

Die Ergebnisse der Validierung können gespeichert, exportiert, gedruckt und wieder geöffnet werden.

HINWEIS

Um optimale Ergebnisse zu erhalten, beachten Sie folgende Hinweise:

- Starten Sie die Validierung nach einer Geräte-Einlaufzeit von 2 Stunden. In dieser Zeit müssen beide Lampen des SPECORD PLUS eingeschaltet sein.
- Führen Sie unmittelbar vor dem Öffnen des Fensters Validierung eine Grundkorrektur, bzw. beim SPECORD 250 PLUS eine Gitter- und Grundkorrektur, durch.

13.1.1 Prüfparameter und erforderliche Hilfsmittel

Prüfparameter

Folgende Parameter können mit der Gerätevalidierung geprüft werden:

Parameter	Beschreibung
Transmissionsnullpunkt	Messung mit abgedecktem Mess-Strahlengang und geöffnetem Referenzstrahlengang im Bereich 200 … 1000 nm Aus dem Ergebnis werden Minimum und Maximum der Transmissionsnullpunktabweichung des Gerätes berechnet.
Abweichung der Basislinie	Aufnahme der Basislinie im Absorptionsmodus im Bereich 200 … 510 nm
Rauschen der Basislinie	Aufnahme von 30 Messzyklen der Basislinie im Bereich 490 … 1000 nm Bestimmung des RMS-Rauschens (Standardabweichung) bei 500 nm
100%-Transmission unkorrigiert	Messung der Basislinie in Transmission ohne Korrektur Bestimmung des Minimums und des Maximums der Transmission
Photometrische Richtigkeit Vis-Bereich	Test mit einem zertifizierten Standardfilter Bestimmung der Differenz der gemessenen Absorbanzen zu den vorgegebenen Sollwerten des Standardfiltersatzes an 5 Wellenlängen
Photometrische Richtigkeit Vis- und NIR-Bereich	Für SPECORD 210 PLUS mit erweitertem Messbereich Test mit einem zertifizierten Standardfilter Bestimmung der Differenz der gemessenen Absorbanzen zu den vorgegebenen Sollwerten des Standardfiltersatzes an 10 Wellenlängen
Photometrische Richtigkeit UV-Bereich	Messung der Absorbanz einer Kaliumdichromatlösung an vier Wellenlängen im Bereich 235 … 350 nm Bestimmung der Differenz der gemessenen Absorbanzen zu den vorgegebenen Sollwerten der Kaliumdichromatlösung
Photometrische Richtigkeit bei 430 nm	Messung der Absorbanz einer Kaliumdichromatlösung an der Wellenlänge 430 nm Bestimmung der Differenz der gemessenen Absorbanz zum vorgegebenen Sollwert der Kaliumdichromatlösung
Wellenlängenrichtigkeit	Messung der Wellenlängenpositionen der Peaks eines Holmiumglasfilters oder einer Holmiumoxidlösung mit bekannten Sollwerten für die Wellenlänge in den 5 Bereichen 270 … 285 nm, 350 … 370 nm, 450 … 485 nm, 530 … 545 nm und 630 … 645 nm.
Wellenlängenrichtigkeit bei 486 nm und 656 nm/UV-Lampe	Messung der Wellenlängenposition der D2E-Linien (485,99 nm und 656,1 nm) bei den Wellenlängen 486 nm und 656,1 nm

Parameter	Beschreibung
Wellenlängenreproduzierbarkeit	Durchführung von zehn Messzyklen im Bereich 358 ... 365 nm zur Bestimmung der Standardabweichung der Wellenlängenposition des Holmiumoxid-Peaks
Streulichtuntersuchung	Bestimmung des Maximalwertes des Streulichtes im Transmissionsmodus mit verschiedenen Kantenfiltern in folgenden Bereichen: KCl-Filterküvette: 198 nm NaJ-Filterküvette: 220 nm ... 240 nm $NaNO_2$-Filterküvette: 340 nm
Spektrale Auflösung	Prüfung des spektralen Auflösungsvermögens mit einer Toluollösung in n-Hexan durch Bestimmung des Absorptionsverhältnisses der Wellenlänge 269 nm zur Wellenlänge 266 nm (A_{269}/A_{266})
Langzeitstabilität	Wiederholte Messung der Basislinie über eine Stunde und Berechnung des Gradienten der Messwerte bei 500 nm

Prüfmittel

Für die Validierung des SPECORD PLUS werden folgende Filter und zertifizierte Standards benötigt:

- Zertifizierter Filtersatz für die photometrische Messung des Vis-Spektralbereichs und zertifizierter Holmiumoxid-Glasfilter für die Wellenlängenrichtigkeit
- Standardlösung Holmiumoxid in Perchlorsäure für die Wellenlängenrichtigkeit (alternativ zum Holmiumoxid-Glasfilter)
- Kaliumdichromat-Standardlösung für die UV-Photometrie und für 430 nm
- Natriumnitrit-Standardlösung für die Streulichtmessung
- Natriumjodid-Standardlösung für die Streulichtmessung
- Kaliumchlorid-Standardlösung für die Streulichtmessung
- Referenzierte Wasserküvette oder bidestilliertes Wasser (gasblasenfrei)
- 0,02%ige Standardlösung Toluol in Hexan und Hexan als Referenz für den Test der spektralen Auflösung

HINWEIS

Für die zertifizierten Standards geben die Hersteller auf den Zertifikaten einen Temperaturbereich für die Verwendung an. Halten Sie bei der Validierung unbedingt diesen Temperaturbereich ein. Eine Validierung außerhalb der angegebenen Temperaturtoleranzen kann zu falschen Messergebnissen führen!

13.1.2 Validierungsparameter eingeben

Zu Beginn der Validierung müssen Sie die zu validierenden Parameter wählen.

- Den Menüpunkt **Gerät** | **Prüfung** | **Validierung** | **AJ** wählen.
- Auf **Einstellen** klicken.
- Im Fenster **Einstellungen** die Prüfparameter wählen und die Angaben zu den verwendeten Standards eingeben.
- Mit **Ok** die Einstellungen bestätigen.
  - ✓ Das Fenster **Einstellungen** wird geschlossen. Im Fenster **Validierung nach AJ** wird das Icon **Start** freigeschaltet.

Prüfparameter wählen – Tab Allgemein

Die zu testenden Parameter können beliebig ausgewählt werden, sodass eine eigene Validierungsroutine für das Spektrometer festgelegt werden kann.

Prüfparameter	Beschreibung
Allgemein	Transmissionsnullpunkt; Basislinienabweichung; Basislinienrauschen; 100%T-Linie, unkorrigiert
Photometrische Richtigkeit Vis	Photometrische Richtigkeit im Vis-Bereich
Photometrische Richtigkeit Vis/NIR	Nur für SPECORD 210 PLUS mit erweitertem Messbereich Photometrische Richtigkeit im Vis-Bereich und im NIR-Bereich (bis 1200 nm)
Photometrische Richtigkeit UV / 430 nm	Photometrische Richtigkeit im Bereich 235 ... 350 und bei der Wellenlänge 430 nm
Wellenlängen	Wellenlängenrichtigkeit und Wellenlängenreproduzierbarkeit im Bereich 250 nm bis 650 nm
Streulicht	Streulicht bei 198 nm, 220 nm, 240 nm und 340 nm
Spektrale Auflösung	Spektrales Auflösungsvermögen mit einer Toluollösung in n-Hexan durch Bestimmung des Absorptionsverhältnisses der Wellenlänge 269 nm zur Wellenlänge 266 nm (A269/A266)
Langzeitstabilität	Messung der Basislinie über eine Stunde und Berechnung des Gradienten der Messwerte bei 500 nm

Grenzwerte wählen - Tab Akzeptanzkriterien

Die Grenzwerte für die Geräteprüfung können entsprechend den vom Hersteller garantierten Parametergrenzen und Toleranzen oder in selbst definierten Bereichsgrenzen gesetzt werden. Im letzteren Fall wird sichergestellt, dass das Spektrometer für eine bestimmte Messaufgabe geeignet ist.

Option	Beschreibung
Vorgabewerte AJ	Vom Hersteller garantierte Parametergrenzen und -toleranzen verwenden Die Daten werden entsprechend der technischen Spezifikation in den Eingabefeldern der Tabelle angezeigt. Sie können nicht editiert werden.
Werte aus Datei	Eigenen Datensatz mit Parametergrenzen und Toleranzen verwenden **Neu** Neue Grenzwerte eingegeben **Speichern** Grenzwerte speichern Die Dateien erhalten die Erweiterung "*.vat" (validation tolerances). **Öffnen** Gespeicherte Grenzwerte laden und für die Validierung verwenden

Kenndaten der verwendeten Standards eingeben

Tragen Sie auf den entsprechenden Tabs die Identifikationsnummern und Sollwerte der verwendeten Hilfsmittel ein, wenn Sie den entsprechenden Test auf dem Tab **Allgemein** markiert haben.

Tab Photometrische Richtigkeit Vis

Bezeichnung Id.	Identifikationsnummer des zertifizierten Standardfiltersatzes (Graufilter) entsprechend dem Datenblatt
Filter Parameter	**5** Prüfwellenlängen und dazugehörige Absorbanzen des Filters um den Absorbanzwert 1

Tab Photometrische Richtigkeit Vis/NIR

Nur für SPECORD 210 PLUS mit erweitertem Messbereich

Bezeichnung Id.	Identifikationsnummer des zertifizierten Standardfiltersatzes (Graufilter) entsprechend dem Datenblatt
Filter Parameter	**10** Prüfwellenlängen und dazugehörige Absorbanzen des Filters um den Absorbanzwert 1

Tab Photometrische Richtigkeit UV / 430 nm

Referenz	Identifikationsnummer der Referenz (0,01 N Schwefelsäure oder Perchlorsäure)
60 mg/l Kaliumdichromat / 600 mg/l Kaliumdichromat	Identifikationsnummer der Kaliumdichromatlösungen mit der Konzentration 60 mg/l und 600 mg/l eintragen.
Prüfwellenlängen und Sollwerte der Absorbanz:	**Wellenlängen [nm]** und **Sollwerte [A]** für die Prüfung entsprechend Datenblatt eintragen.

Tab Wellenlängen

Bezeichnung Id.	Identifikationsnummer des verwendeten Wellenlängenstandards: Holmiumoxidfilter oder Holmiumperchlorat-Standardlösung
Prüfwellenlängen	Sollwerte der Spektrenpeaks entsprechend Datenblatt

Tab Streulicht

Referenz (H2O)	Identifikationsnummer der Referenz
Streulicht KCl bei 198 nm	Identifikationsnummer der Kaliumchlorid-Standardlösung
Streulicht NaI bei 220,240 nm	Identifikationsnummer der Natriumjodid-Standardlösung
Streulicht NaNO2 bei 340 nm	Identifikationsnummer der Natriumnitrit-Standardlösung

Tab Spektrale Auflösung

Referenz (Hexan)	Identifikationsnummer der Hexan-Referenzlösung
Toluol (0,02% V/V)	Identifikationsnummer der Toluol–Standardlösung

13.1.3 Validierung ausführen

HINWEIS

Um optimale Ergebnisse zu erhalten, beachten Sie folgende Hinweise:

- Starten Sie die Validierung nach einer Geräte-Einlaufzeit von 2 Stunden. In dieser Zeit müssen beide Lampen des SPECORD PLUS eingeschaltet sein.
- Führen Sie unmittelbar vor dem Öffnen des Fensters Validierung eine Grundkorrektur, bzw. beim SPECORD 250 PLUS eine Gitter- und Grundkorrektur, durch.

Filter und Küvetten platzieren

Alle verwendeten Filter und Küvetten mit Standardlösungen, auch Referenzen, sind immer in den Mess-Strahlengang zu setzen. Der Referenzstrahlengang bleibt bei allen Messungen frei!

Validierung ausführen

Nach der Eingabe der Validierungsparameter im Fenster **Einstellungen** wird das Icon ▶ **Start** freigeschaltet. Die Validierung erfolgt programmgeführt. Entsprechend Ihrer Auswahl der Prüfparameter im Fenster **Einstellungen** werden die Messungen nacheinander durchgeführt.

▶ Validierung mit Klick auf ▶ starten.

- Den weiteren Anweisungen zur Verwendung von Filtern und Küvetten in den Fenstern folgen.
- Im Anschluss an jeden Teilschritt der Validierung werden in einem Fenster die Prüfergebnisse und die festgelegten Toleranzen angezeigt. Das Prüfergebnis-Fenster bietet folgende Optionen für das weitere Validierungsverfahren:

Option	Beschreibung
Wiederholen	Prüfpunkt wiederholen Die bisher aufgenommenen Messwerte des aktuellen Prüfpunktes werden verworfen. Die Wiederholung eines Prüfpunktes wird im Audit Trail dokumentiert.
Fortsetzen	Messung des nächsten Prüfparameters starten
Abbrechen	Validierung abbrechen Bisher aufgenommene Messwerte sind jedoch temporär gespeichert und werden auf den Tabs der Validierung angezeigt.

Validierungsergebnisse anzeigen

Nachdem die Validierung beendet ist, werden die Ergebnisse auf den Tabs des Fensters **Validierung nach AJ** angezeigt.

In der Liste **Validierungsteil** wird die Gruppe der anzuzeigenden Prüfparameter gewählt. Der Tab **Ergebnisse** zeigt die digitalen Messergebnisse im Vergleich zu den zulässigen Toleranzen. Auf dem Tab **Messwerte** werden die Spektren dargestellt. Mit dem Menüpunkt **Datei** | **Übersicht** können Sie sich die Ergebnisse der Validierung in einer kompakten Übersicht anzeigen lassen.

Audit Trail anzeigen

- Im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Audit Trail anzeigen** wählen.
- Auf den Tab **Audit Trail** klicken.
  - ✓ Unabhängig vom gewählten Validierungsteil wird der komplette Audit Trail angezeigt.

Hinweis: Der Audit Trail wird bei Auswahl der Druckvorlage "Detailed.lst" mitgedruckt.

Validierungsergebnisse exportieren

- Im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Export** wählen.
- Im Fenster **ASCII-Export** den Namen der Exportdatei und das Dezimaltrennzeichen eingeben und mit **Ok** bestätigen.
  - ✓ Die Daten werden exportiert.

Validierungsergebnisse drucken

- Im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Drucken** wählen.
- Im Fenster **Öffnen** im Ordner \\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect UV\Reports\Validierung AJ die Druckvorlage "Compact.lst" oder "Detailed.lst" wählen.
- Im Fenster **LLPrint Preview** die Optionen **Alle Seiten drucken** wählen.
  - ✓ Das Protokoll wird gedruckt.

HINWEIS

Bei einer Funktionsqualifizierung ist der Ausdruck Bestandteil des OQ-Protokolls.

13.2 Validierung Standard Ph. Eur.

Bei der Validierung Standard Ph. Eur. erfolgt eine Validierung der messtechnischen Eigenschaften entsprechend den Anforderungen des Europäischen Arzneibuchs (Kapitel 2.2.25). Die Validierung in der Standard Ph. Eur. erfolgt nach der Ausgabe 12.3.

Modulfenster Validierung nach Standard Ph. Eur.

Das Modulfenster **Validierung nach Standard Ph. Eur.** erscheint nach Wahl des Menüpunkts **Gerät** | **Prüfung** | **Validierung** | **Standard Ph. Eur.**.

Der Umfang der zu prüfenden Parameter wird unter **Einstellen** festgelegt. Die Ergebnisse der Validierung werden für jeden Prüfparameter auf einem eigenen Tab angezeigt. Dabei werden jeweils auf dem Tab **Ergebnisse** die digitalen Prüfergebnisse ausgegeben und auf dem Tab **Messwerte** die gemessenen Spektren grafisch dargestellt. In der Liste **Validierungsteil** kann jeweils eine Parametergruppe für die Anzeige ausgewählt werden.

In einem separaten Fenster kann der Audit Trail angezeigt werden. Die Ergebnisse der Validierung können gespeichert, gedruckt und wieder geöffnet werden.

HINWEIS

Um optimale Ergebnisse zu erhalten, beachten Sie folgende Hinweise:

- Starten Sie die Validierung nach einer Geräte-Einlaufzeit von 2 Stunden. In dieser Zeit müssen beide Lampen des SPECORD PLUS eingeschaltet sein.
- Führen Sie unmittelbar vor dem Öffnen des Fensters Validierung eine Grundkorrektur, bzw. beim SPECORD 250 PLUS eine Gitter- und Grundkorrektur, durch.

13.2.1 Prüfparameter und erforderliche Hilfsmittel

Prüfparameter

Folgende Parameter werden mit der Gerätevalidierung geprüft:

Parameter	Beschreibung
Wellenlängenrichtigkeit	Messung von bis zu 5 Standard-Wellenlängen wahlweise mit den Seltenerdmetalloxid-Filtern Holmiumoxid-, Didymium-Glasfilter und/oder unteres UV
Absorbanz UV/Vis	Prüfung der Absorbanz mit Kaliumdichromatlösungen 60mg/l bei den Wellenlängen 235, 257, 313, 350 nm und 600 mg/L bei 430nm
Photometrische Linearität	Prüfung der photometrischen Linearität bei einer Standard-Wellenlänge mit 3 ... 4 verschiedenen Absorbanzen bzw. Konzentrationen wahlweise mit Neutralglasfilter, Kaliumdichromat oder Niacin
Streulicht bei 198 nm	Streulichtmessung bei 198 nm mit Kaliumchloridlösung 12 g/L
Spektrale Auflösung	Prüfung des spektralen Auflösungsvermögens mit einer Toluollösung in n-Hexan durch Bestimmung des Absorbanzverhältnisses der Wellenlänge 269 nm zur Wellenlänge 266 nm (A_{269}/A_{266}) Dieser Test ist optional und wird nur bei der Analyse ausgewählter Substanzen gefordert.

Prüfmittel

Für die Validierung des SPECORD PLUS werden folgende Filter und zertifizierte Standards benötigt:

- Standardlösung Holmiumoxid in Perchlorsäure, Holmiumglasfilter, Didymium-Glasfilter oder Seltenerdmetalloxid-Filter für die Wellenlängenkontrolle nach Ph. Eur. (Auswahl entsprechend dem verwendeten Messbereich)
- Kaliumdichromat-Standardlösungen für die Kontrolle der Absorption im UV und für 430 nm nach Ph. Eur.
- Kaliumchlorid-Standardlösungen für die Streulichtmessung nach Ph. Eur.
- Referenzierte Wasserküvette oder bidestilliertes Wasser (gasblasenfrei)
- 0,02%ige Standardlösung Toluol in Hexan und Hexan als Referenz für den Test der spektralen Auflösung
- CRM mit 3 ... 4 verschiedenen Absorptionen/Konzentrationen bei einer Standardwellenlänge wahlweise mit den CRMs Neutralglasfilter, Kaliumdichromat oder Niacin zur Prüfung der photometrischen Linearität

HINWEIS

Für die zertifizierten Standards geben die Hersteller auf den Zertifikaten einen Temperaturbereich für die Verwendung an. Halten Sie bei der Validierung unbedingt diesen Temperaturbereich ein. Eine Validierung außerhalb der angegebenen Temperaturtoleranzen kann zu falschen Messergebnissen führen!

13.2.2 Validierungsparameter eingeben

Zu Beginn der Validierung müssen Sie die Parameter wählen.

- Den Menüpunkt **Gerät** | **Prüfung** | **Validierung** | **Standard Ph. Eur.** wählen.
- Auf **Einstellen** klicken.
- Im Fenster **Einstellungen** die Prüfparameter wählen und die Angaben zu den verwendeten Standards eingeben.
- Mit **Ok** die Einstellungen bestätigen.

✓ Das Fenster **Einstellungen** wird geschlossen. Im Fenster **Validierung nach Standard Ph. Eur.** wird das Icon **Start** freigeschaltet.

Prüfparameter wählen – Tab Allgemein

Die zu prüfenden Parameter sind im Europäischen Arzneibuch festgelegt. Aktivieren Sie die Parameter, die Sie prüfen möchten.

Akzeptanzkriterien ansehen - Tab Akzeptanzkriterien

Auf dem Tab **Akzeptanzkriterien** finden Sie die Akzeptanzkriterien, die entsprechend der Europäischen Pharmakopöe zu erreichen sind.

Kenndaten der verwendeten Standards eingeben

Tragen Sie auf den entsprechenden Tabs die Identifikationsnummern und Sollwerte der verwendeten Hilfsmittel ein.

Tab Wellenlängen

Seltenerdmetalloxid-Filter	Identifikationsnummer des verwendeten Seltenerdmetalloxid-Filter Id.-Nummer des Holmiumoxid-Glasfilters, Didymiumoxid-Glasfilters oder des Seltenerdmettalloxid-Filters Unteres UV
Prüfwellenlänge 1 ... Prüfwellenlänge 5	Standard-Sollwerte der Spektrenpeaks entsprechend Datenblatt

Tab Absorbanz UV/VIS

Referenz	Identifikationsnummer der Referenz (0,01 N Schwefelsäure bzw. Perchlorsäure)
60 mg/l Kaliumdichromat	Identifikationsnummer der Kaliumdichromatlösungen mit der Konzentration 60 mg/l
600 mg/l Kaliumdichromat	Identifikationsnummer der Kaliumdichromatlösungen mit der Konzentration 600 mg/l
Prüfwellenlängen und Sollwerte der Absorbanz:	Prüfwellenlängen und Absorbanzen entsprechend dem Datenblatt

Tab Linearität

Prüfmitteltyp	Prüfmittel wählen: Neutralglasfilter, Kaliumdichromat oder Niacin
Referenz	Identifikationsnummer der Referenz
Wellenlänge	Prüfwellenlänge entsprechend Datenblatt
Prüfmittel 1 ... Prüfmittel 4	Anzahl Prüfmittel aktivieren (mindestens 3) Im 1. Feld die Identifikationsnummer und im 2. Feld den Sollwert der Absorbanz für die Prüfmittel eintragen

Tab Streulicht

Referenz (H2O)	Identifikationsnummer der Referenz
Streulicht KCl bei 198 nm	Identifikationsnummer der Kaliumchlorid-Standardlösung

Tab Spektrale Auflösung

Referenz (Hexan)	Identifikationsnummer der Hexan-Referenzlösung
Toluol (0,02% V/V)	Identifikationsnummer der Toluol–Standardlösung
Spalt	Für SPECORD 210 PLUS und SPECORD 250 PLUS Der Spalt (spektrale Bandbreite) hat Einfluss auf das spektrale Auflösungsvermögen des Geräts. Eine Übersicht der spektralen Spaltbreiten und der zu erreichenden Werte finden Sie ebenfalls auf diesem Tab.

13.2.3 Validierung ausführen

HINWEIS

Um optimale Ergebnisse zu erhalten, beachten Sie folgende Hinweise:

- Starten Sie die Validierung nach einer Geräte-Einlaufzeit von 2 Stunden. In dieser Zeit müssen beide Lampen des SPECORD PLUS eingeschaltet sein.
- Führen Sie unmittelbar vor dem Öffnen des Fensters Validierung eine Grundkorrektur, bzw. beim SPECORD 250 PLUS eine Gitter- und Grundkorrektur, durch.

Filter und Küvetten platzieren

Alle verwendeten Filter und Küvetten mit Standardlösungen, auch Referenzen, sind immer in den Mess-Strahlengang zu setzen. Der Referenzstrahlengang bleibt bei allen Messungen frei!

Validierung ausführen

Nach der Eingabe der Validierungsparameter im Fenster **Einstellungen** wird das Icon **Start** freigeschaltet. Die Validierung erfolgt programmgeführt. Entsprechend Ihrer Auswahl der Prüfparameter im Fenster **Einstellungen** werden die Messungen nacheinander durchgeführt.

- Validierung mit Klick auf starten.
- Den weiteren Anweisungen zur Verwendung von Filtern und Küvetten in den Fenstern folgen.
- Im Anschluss an jeden Teilschritt der Validierung werden in einem Fenster die Prüfergebnisse und die Toleranzen entsprechend der Europäischen Pharmakopöe angezeigt. Das Prüfergebnis-Fenster bietet folgende Optionen für das weitere Validierungsverfahren:

Option	Beschreibung
Wiederholen	Prüfpunkt wiederholen Die bisher aufgenommenen Messwerte des aktuellen Prüfpunktes werden verworfen. Die Wiederholung eines Prüfpunktes wird im Audit Trail dokumentiert.
Fortsetzen	Messung des nächsten Prüfparameters starten
Abbrechen	Validierung abbrechen Bisher aufgenommene Messwerte sind jedoch temporär gespeichert und werden auf den Tabs der Validierung angezeigt.

Validierungsergebnisse anzeigen

Nach dem die Validierung beendet ist, werden die Ergebnisse auf den Tabs des Fensters **Validierung nach Standard Ph. Eur.** angezeigt.

In der Liste **Validierungsteil** wird die Gruppe der anzuzeigenden Prüfparameter gewählt. Der Tab **Ergebnisse** zeigt die digitalen Messergebnisse im Vergleich zu den zulässigen Toleranzen. Auf dem Tab **Messwerte** werden die Spektren dargestellt. Mit dem Menüpunkt **Datei** | **Übersicht** können Sie sich die Ergebnisse der Validierung in einer kompakten Übersicht anzeigen lassen.

Audit Trail anzeigen

- Im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Audit Trail anzeigen** wählen.
- Auf den Tab **Audit Trail** klicken.
  - ✓ Unabhängig vom gewählten Validierungsteil wird der komplette Audit Trail angezeigt.

Hinweis: Der Audit Trail wird bei Auswahl der Druckvorlage "Detailed.lst" mitgedruckt.

Validierungsergebnisse exportieren

- Im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Export** wählen.

- Im Fenster **ASCII-Export** den Namen der Exportdatei und das Dezimaltrennzeichen eingeben und mit **Ok** bestätigen.
  ✓ Die Daten werden exportiert.

Validierungsergebnisse drucken

- Im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Drucken** wählen.
- Im Fenster **Öffnen** im Ordner \\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect UV\Reports\Validierung\Standard Ph Eur die Druckvorlage "Compact.lst" oder "Detailed.lst" wählen.
- Im Fenster **LLPrint Preview** die Optionen **Alle Seiten drucken** wählen.
  ✓ Das Protokoll wird gedruckt.

HINWEIS

Bei einer Funktionsqualifizierung ist der Ausdruck Bestandteil des OQ-Protokolls.

13.3 Validierung nach USP

Bei der **Validierung nach USP** erfolgt eine Validierung der messtechnischen Eigenschaften entsprechend den Akzeptanzkriterien der United States Pharmacopeia USP <857>.

Die Prüfungen können auf Basis der folgenden USP-Versionen durchgeführt werden: USP 38, USP 40, USP 41, USP 42, USP-NF 2021, USP-NF 2022, USP-NF 2023, USP-NF 2024, USP-NF 2025 oder USP-NF 2026.

Mit der USP 42 wurden die Prüfparameter und Akzeptanzkriterien überarbeitet. Alle nachfolgenden USP-Versionen entsprechen unverändert der USP 42.

Modulfenster Validierung nach USP

Das Modulfenster **Validierung nach USP** erscheint nach Wahl des Menüpunkts **Gerät** | **Prüfung** | **Validierung** | **USP**.

Der Umfang der zu prüfenden Parameter wird unter **Einstellen** festgelegt. Die Ergebnisse der Validierung werden für jedes Prüfmittel im Fenster **Validierung nach USP** angezeigt. Auf einem zusätzlichen Tab im Fenster kann der Audit Trail angezeigt werden. Die Ergebnisse der Validierung können gespeichert, exportiert, gedruckt und wieder geöffnet werden.

HINWEIS

Um optimale Ergebnisse zu erhalten, beachten Sie folgende Hinweise:

- Starten Sie die Validierung nach einer Geräte-Einlaufzeit von 2 Stunden. In dieser Zeit müssen beide Lampen des SPECORD PLUS eingeschaltet sein.
- Führen Sie unmittelbar vor dem Öffnen des Fenster **Validierung nach USP** eine Grundkorrektur, bzw. beim SPECORD 250 PLUS eine Gitter- und Grundkorrektur, sowie eine Korrektur der Unendlichabsorbanz durch.

13.3.1 Prüfparameter, Akzeptanzkriterien und erforderliche Prüfmittel

Inhalt der Validierung nach USP sind folgende Parameter:
- Richtigkeit und Präzision der Wellenlänge
- Richtigkeit und Präzision der Absorbanz
- Ab USP 42: Prüfung der photometrischen Linearität
- Einhaltung von Grenzwerten für das Streulicht
- Prüfung der Auflösung

Die USP fordert die Validierung des Spektrometers im Operationsbereich, d.h. in dem Wellenlängen- und Absorbanzbereich, in dem die zu erwartenden Messwerte liegen.

Um einen möglichst großen Messbereich abzudecken, wird der Einsatz mehrerer Methoden sowie zertifizierter Referenzmaterialien (CRM, certified reference materials) empfohlen. Die Auswahl geeigneter CRM und Methoden entsprechend dem jeweiligen Operationsbereich liegt in der Verantwortung des Anwenders.

Neben den von der USP empfohlenen Standards sind auch alternative CRM zulässig, sofern deren Zertifizierung vollständig und nachvollziehbar dokumentiert ist.

Wellenlänge

Die USP fordert den Nachweis der Richtigkeit und Präzision der Wellenlänge.

Prüfmittel/CRM	Richtigkeit	Präzision
■ Hg- und D_2-Emissionslinien ■ Seltenerdenmetalloxid-Lösung (CRM) ■ Seltenerdenmetalloxid-Gläser (CRM) ■ Alternative CRM	Min. 6 Messwerte Differenz des Mittelwertes zum zertifizierten Wert des CRM: UV: ≤ ±1 nm Vis: ≤ ±2 nm	Min. 6 Messwerte Standardabweichung vom Mittelwert: ≤ 0,5 nm

Absorbanz

Die USP fordert den Nachweise der Richtigkeit und der Präzision der Absorbanz.

Ab USP 42: Die Anforderungen an die photometrische Linearität gelten als erfüllt, wenn bei mindestens einer Wellenlänge im UV- und/oder Vis-Bereich und bei drei unterschiedlichen Absorbanzen die Kriterien für die Richtigkeit eingehalten werden.

Prüfmittel/CRM	Richtigkeit	Präzision
$K_2Cr_2O_7$-Lösung (235; 257; 313; 350 nm)	≤ ±1 % A über 1,0 A oder ≤ ±0,010 A unter 1,0 A	Min 6 Messwerte Standardabweichung ≤ 0,5 % A über 1,0 A ≤ 0,005 A unter 1,0 A
Neutralglasfilter (440; 465; 546,1; 590 und 635 nm)	USP Verion 38, 40, 41: ≤ ±0,8 % A über 1,0 A oder ≤ ±0,0080 A unter 1,0 A Ab USP Version 42: ≤ ±0,8 % A über 1,0 A oder ≤ ± 0,008 A unter 1,0 A	
Alternative CRM		

Streulicht

Zur Streulichtbestimmung werden Filter mit scharf abgegrenztem Spektrum (Cut-off-Filter) eingesetzt, die unterhalb einer definierten Wellenlänge kein Licht transmittieren. Idealerweise liegt die Cut-off-Wellenlänge möglichst nahe oberhalb der zu prüfenden Wellenlänge.

Die USP beschreibt zwei Methoden zur Streulichtbestimmung:

Methode "10 mm gegen 5 mm"
- Messung einer 5-mm-Küvette (Filterlösung) als Referenz
- Messung einer 10-mm-Küvette (Filterlösung) als Probe
- Bestimmung von Lage und Höhe des Absorptionsmaximums sowie des Streulichtwerts S_λ

Methode „10 mm gegen 10 mm H_2O“

- Messung einer 10-mm-Küvette (Wasser) als Referenz
- Messung einer 10-mm-Küvette (Filterlösung) als Probe
- Die an der Zertifikatswellenlänge gemessene Absorption muss ≥ 2,0 A sein

USP Version 38, 40, 41

Prüfmittel/CRM	Methode	Forderung
12 g/l KCl (190 … 205 nm)	10 mm gegen 5 mm	$S_\lambda \leq 0{,}01$; $A_\lambda \geq 0{,}7$ A
10 g/l NaI (210 … 259 nm)	10 mm gegen 10 mm	$A_{\lambda max} \geq 2$ A
Azeton (250 … 320 nm)		
50 g/l $NaNO_2$ (300 … 385 nm)		

Ab USP Version 42

Prüfmittel/CRM	Methode	Forderung
12 g/l KCl (190 … 210 mm)	10 mm gegen 5 mm	$S_\lambda \leq 0{,}01$; $A_\lambda \geq 0{,}7$ A
10 g/l NaI (210 … 270 nm)	10 mm gegen 10 mm	$A_{\lambda max} \geq 2$ A
Azeton (250 … 330 nm)		
50 g/l $NaNO_2$ (300 … 400 nm)		

$S_\lambda = 0.25 \times 10^{-2A_\lambda}$

S_λ – Streulicht

A_λ – Absorptionswert des langwelligsten Maximums

Aufgrund des geringeren Streulichtanteils der SPECORD PLUS Geräte erweitert sich der Messbereich für NaI, Aceton und $NaNO_2$ gegenüber dem in Tabelle 3 der USP <857> angegebenen zum langwelligen Bereich um einige Nanometer.

Aus der USP <857> ergeben sich für die 2 Verfahren deshalb folgende Akzeptanzkriterien:

Methode "10 mm gegen 5 mm"

- Die Wellenlänge des langwelligsten Maximums (λ) ist größer als Zertifikatwellenlänge - Messunsicherheit
- $S_\lambda \leq 0.01$; $A_\lambda \geq 0.7$ A

Methode „10 mm gegen 10 mm H_2O“

Ausgehend von der langwelligen Bestimmung der Wellenlänge (λ), wo die Absorption den 2,0 A-Wert überschreitet, gilt:

- λ ist größer als Zertifikatwellenlänge - Messunsicherheit
- Unterhalb der Zertifikatwellenlänge - Messunsicherheit gibt es keine Absorptionswerte < 2,0 A

Auflösung

Die USP fordert, dass die verwendete spektrale Bandbreite des Spektrometers nicht größer als 1/8 der natürlichen Halbwertsbreite der Absorption der Substanzen sein darf.

Nachweis im UV-Bereich

- Referenz: Hexan
- Messung einer 0,02-%igen Toluen-Lösung in Hexan
- Berechnung des Quotienten A_{269}/A_{266}

Für die meisten pharmazeutischen Anwendungen ist eine spektrale Auflösung von 2 nm ausreichend, was folgendem Akzeptanzkriterium entspricht:

$A_{269}/A_{266} \geq 1{,}3$

Der Quotient ist temperaturabhängig; der Temperatureinfluss nimmt mit steigender spektraler Auflösung zu.

Temperaturabhängigkeit des Quotienten A_{269}/A_{266} für Toluen in Hexan:

Messtemperatur [°C]	Spektraler Bandbreite [nm] und A_{269}/A_{266}				
	0,5 ± 0,1	**1,0 ± 0,1**	**1,5 ± 0,1**	**2,0 ± 0,2**	**3,0 ± 0,2**
20 ± 1	2,4 – 2,5	2,0 – 2,1	1,6 – 1,7	1,3 – 1,4	1,0 – 1,1
25 ± 1	2,3 – 2,4	1,9 – 2,0	1,6 – 1,7	1,3 – 1,4	1,0 – 1,1
30 ± 1	2,1 – 2,2	1,8 – 1,9	1,5 – 1,6	1,3 – 1,4	1,0 – 1,1

Alternativ können geeignete Atomemissionslinien verwendet werden. Die spektrale Bandbreite des Spektrometers entspricht dabei der ermittelten Halbwertsbreite der Emissionslinie.

- Deuterium-Emissionslinien: geeignet für den Vis-Bereich
- Quecksilber-Emissionslinien: geeignet für UV- und Vis-Bereich

Die entsprechenden Linientabellen sind in der Validierungssoftware ASpect UV hinterlegt.

Prüfmittel/CRM	Forderung
Hg- und D_2-Emissionslinien	Die spektrale Bandbreite des Spektrometers soll ≤ 1/8 der Halbwertsbreite der Absorptionsbande der Substanz betragen (bei den meisten pharmazeutischen Substanzen sind 2 nm ausreichend).
Toluen in Hexan	$A_{269}/A_{266} \geq 1,3$

13.3.2 Validierungsparameter eingeben

Zu Beginn der Validierung müssen Sie die Parameter und die Prüfmittel wählen.

- Im Hauptfenster Menüpunkt **Gerät** | **Prüfung** | **Validierung** | **USP** wählen.
- Auf **Einstellen** klicken.
- Im Fenster **Einstellungen** die zu prüfenden Bereiche und Parameter auswählen und Einträge zu den Prüfmitteln die nötigen Einstellungen vornehmen (siehe unten).
- Mit **Ok** die Validierungsparameter bestätigen.

  ✓ Das Fenster **Einstellungen** wird geschlossen und das Icon **Start** freigeschaltet.

Tipp

Wenn Sie alle Parameter eingestellt und die benötigten CRM-Daten eingegeben haben, speichern Sie die Daten mit dem Menüpunkt **Datei** | **Speichern** im Fenster **Validierung nach USP**. Damit haben Sie die Daten auch für eine erneute Validierung zur Verfügung, wenn Sie die gleichen CRM verwenden.

Auswahl der CRM und der Messbereiche

Die USP fordert die Validierung des Spektrometers im Operationsbereich. Dem entsprechend müssen Sie nicht nur ein geeignetes CRM wählen, sondern oft auch noch den Messbereich, z. B. die Wellenlängen bei der Prüfung der Wellenlängenrichtigkeit/-präzision, festlegen. Wenn dies erforderlich ist, erscheint nach Auswahl des CRM der Button ....

- Auf der Seite **Allgemein** die erforderlichen Einträge vornehmen und die zu validierenden Prüfparameter mit einem Haken markieren.
- Auf der linken Seite des Fensters **Einstellungen** den Prüfparameter wählen.
- Auf der Seite des Prüfparameters das CRM mit einem Haken markieren.
- Auf ... klicken.

- Im Auswahlfenster die Messwerte markieren. Wenn erforderlich mit **Einstellen** das Fenster **Einstellungen CRM** öffnen und die Daten des CRM vom Zertifikat in die entsprechenden Eingabefelder übertragen. Sie können mehrere CRM für einen Prüfparameter aktivieren und so ihren Operationsbereich abdecken.

Hinweis: Bei CRM auf den Seiten **Streulicht** und **Auflösung** sofort auf **Einstellen** klicken, hier müssen keine Messwerte ausgewählt werden.

- Auswahlfenster mit **x** schließen.

Seite Allgemein

Auf der Seite **Allgemein** legen Sie den Umfang der Gerätevalidierung fest und geben allgemeine Parameter ein.

Parameter	Beschreibung
Titel	Titel des Dokuments Der Titel wird im Reiter des Dokuments angezeigt.
Benutzer	Name des Benutzers Wenn die Benutzerverwaltung installiert ist, wird der in ASpect UV angemeldeter Benutzer ausgegeben.
USP-Version	Auswahl der USP-Version für die Validierung
Zu prüfende Bereiche	Auswahl der Validierungsbereiche
Spalt	Für SPECORD 210 PLUS und SPECORD 250 PLUS Spaltbreite (spektrale Auflösung des Spektrometers wählen) Hinweis: Wählen Sie die spektrale Spaltbreite, mit der Sie später auch Ihre Messaufgaben abarbeiten. Die spektrale Auflösung des Spektrometers sollte 1/8 der Halbwertsbreite der Analysenbande nicht überschreiten.
Temperatur	Umgebungstemperatur des Aufstellplatzes Manche CRM sind temperaturabhängig.
Anzahl der Unterschriftenfelder	Benötigte Anzahl von Unterschriftenfelder unter den Prüfprotokollen Standardmäßig sind 2 Unterschriftsfelder vorgesehen (für den Benutzer und den Servicetechniker). Es können bis zu 4 Unterschriftsfelder gewählt werden.
Notiz	Ergänzende Notiz zur Validierung

Seite Wellenlänge

Auf der Seite **Wellenlänge** wählen Sie die Parameter für die Überprüfung der Wellenlängen (Richtigkeit und Präzision). Die angezeigten Wellenlängen der Filter sind nur voreingestellt und geben einen ungefähren Richtwert an. Als Sollwerte gelten die im Fenster **Einstellungen CRM** aus den Zertifikaten eingetragenen Werte.

CRM	Wellenlängen [nm]
Holmiumoxid (Glasfilter)	279; 360; 453; 536; 637
Didymiumoxid (Glasfilter)	329; 472; 512; 681; 875
Holmiumoxid Lösung	241; 249; 278; 287; 333; 345; 361; 385; 416; 451; 467; 536; 640
Didymiumoxid Lösung	731; 740; 794; 801; 864
Seltenerdmetalloxid Flüssigfilter - Unteres UV	201; 211; 222; 239; 252
D2E-Linien	486; 656,1

CRM	Wellenlängen [nm]
Hg-Emissionslinien	194,2; 237,9; 248,2; 253,7*; 265,4; 289,4; 296,7; 302,15; 334,15; 365,0; 404,7; 407,8; 435,8; 546,1; 577,0; 579,1; 871,7; 1014,0; 1092,1 *nur bei Spalt kleiner 2 nm möglich
Alternatives CRM	

Seite Absorbanz

Auf der Seite **Absorbanz** wählen Sie die Parameter für die Bestimmung der photometrischen Richtigkeit und Präzision. Hier müssen Sie den Wellenlängen- und Absorbanzbereich Ihrer Analysen abdecken.

Folgende CRM stehen zur Auswahl:

CRM	Messbereich / Konzentration	Wellenlängenbereich [nm]
Kaliumdichromat	20 ... 200 mg/l in Schritten von 20 mg/l	235 ... 257
Niacin	6; 12; 18 und 24 mg/l	213 und 261
Neutralglasfilter	0,04 ... 3,0 Abs	440 ... 635
Alternatives CRM		

Typische Absorbanz von Kaliumdichromat an den Wellenlängen 235 nm und 237 nm:

Konzentration [mg/l]	Absorbanz [235 nm]	Absorbanz [257 nm]
20	0,25	0,29
40	0,50	0,57
60	0,75	0,86
80	1,00	1,16
100	1,25	1,45
120	1,50	1,75
140	1,75	2,05
160	2,00	2,35
180	2,25	2,65
200	2,50	2,95

Durchschnittliche Absorbanz von Niacin bei den Wellenlängen 231 und 261 nm

Konzentration [mg/l]	Absorbanz (ca.)
6	0,25
12	0,50
18	0,75
24	1,00

Seite Streulicht

Auf der Seite **Streulicht** wählen Sie das CRM und die Methode für die Streulichtmessung.

CRM	Messbereich [nm]
KCl (12 g/l)	190 ... 205
NaI (10 g/l)	210 ... 259
Aceton	250 ... 320
NaNO2 (50 g/l)	300 ... 380

Die für die Filter angegebenen Wellenlängenbereiche entsprechen den Angaben der Tabelle 3 in der USP <857>. Aufgrund des geringeren Streulichtanteils der SPECORD PLUS Geräte erweitert sich der Messbereich für NaI, Aceton und $NaNO_2$ zum langwelligen Bereich um einige Nanometer.

Seite Auflösung

Auf der Seite **Auflösung** wählen Sie die Methode und das entsprechende CRM für die Bestimmung der spektralen Auflösung. Neben der Methode Toluol/Hexan kann die spektrale Auflösung auch über die Halbwertsbreite von Atomemissionslinien bestimmt werden.

CRM	Messbereich
Toluol/Hexan	UV (Verhältnis A_{269}/A_{266})
D2E-Linien	486 nm; 656,1 nm,
Hg-Emissionslinien	194,2 nm; 237,9 nm; 248,2 nm; 253,7 nm*; 265,4 nm; 289,4 nm; 296,7 nm; 302,15 nm; 334,15 nm; 365,0 nm; 404,7 nm; 407,8 nm; 435,8 nm; 546,1 nm; 577,0 nm*; 579,1 nm*

*Nur bei Spalt kleiner 2 möglich

Seite Automatisch archivieren

Auf der Seite **Automatisch archivieren** können Sie vereinbaren, dass die Daten während der Validierung automatisch gespeichert, exportiert oder gedruckt werden. Für den Export sind das Text-Format und das PDF-Format wählbar. Es muss die Reportvorlage USP_komplett.lst gewählt werden.

Sehen Sie dazu auch

Prüfparameter, Akzeptanzkriterien und erforderliche Prüfmittel [▷ 161]

13.3.3 Validierung ausführen

Filter und Küvetten platzieren

Alle verwendeten Filter und Küvetten mit Standardlösungen, auch Referenzen, sind immer in den Mess-Strahlengang zu setzen. Der Referenzstrahlengang bleibt bei allen Messungen frei!

Validierung ausführen

Nach der Eingabe der Validierungsparameter im Fenster **Einstellungen** wird das Icon ▶ **Start** freigeschaltet. Die Validierung erfolgt programmgeführt. Entsprechend Ihrer Auswahl der Prüfparameter im Fenster **Einstellungen** werden die Messungen nacheinander durchgeführt.

- Validierung mit Klick auf ▶ starten.
- Den weiteren Anweisungen zur Verwendung von Filtern und Küvetten in den Fenstern folgen.
- Im Anschluss an jeden Teilschritt der Validierung werden in einem Fenster die Prüfergebnisse und Akzeptanzkriterien entsprechend USP angezeigt. Sie können die Messung des CRM wiederholen, die Prüfung fortführen oder abbrechen.

Option	Beschreibung
Ja	Messung des CRM wiederholen Die bisher aufgenommenen Messwerte des aktuellen Prüfpunktes werden verworfen. Es erfolgt ein Eintrag in den Audit Trail der Validierung.
Nein	Gemessene Werte akzeptieren und mit der Validierung fortfahren
Prüfung abbrechen	Validierung abbrechen Bisher aufgenommene und abgeschlossene Messwerte sind temporär gespeichert und werden im Hauptfenster angezeigt.

Validierungsergebnisse anzeigen

Nachdem ein Messbereich eines Prüfparameters/CRM vollständig abgearbeitet ist und die Abarbeitung des nächsten Bereiches oder neuen Prüfparameters/CRM beginnt, werden die Ergebnisse auf dem entsprechenden unteren Tab dargestellt. So können Messergebnisse aus bereits absolvierten Validierungsteilen beurteilt werden, während die Validierung noch läuft.

Audit Trail anzeigen

- Im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Audit Trail anzeigen** wählen.
- Auf den Tab **Audit Trail** klicken.
  - ✓ Unabhängig vom gewählten Validierungsteil wird der komplette Audit Trail angezeigt.

Hinweis: Der Audit Trail wird bei Auswahl der Druckvorlage "Detailed.lst" mitgedruckt.

Dokument signieren

- Im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Dokument signieren** wählen.
- Auf **Login** klicken.
- Die Signatur wählen.
- Optional im Eingabefeld **Kommentar** eine Bemerkung eintragen.
- Dokument mit **Datei** | **Speichern** speichern.
  - ✓ Das Dokument ist damit signiert.

Validierungsergebnisse drucken

- Im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Drucken** wählen.
- Für den Druck die Vorlage USP_All_Data.lst wählen.
- Im Fenster **LLPrint Preview** die Optionen **Alle Seiten drucken** wählen.
  - ✓ Das Protokoll wird gedruckt.

HINWEIS

Bei einer Funktionsqualifizierung ist der Ausdruck Bestandteil des OQ-Protokolls.

13.4 Validierung Wartung economic

Die Durchführung der Validierung Wartung economic erfolgt im Rahmen einer Wartung, wenn ein Wartungsvertrag abgeschlossen wurde. Mit Abschluss eines Wartungsvertrages erwerben Sie das Zusatzmodul **Wartung economic**, mit dem grundlegende Funktionen des SPECORD PLUS getestet werden.

Modulfenster Wartung economic

Das Modulfenster **Wartung economic** erscheint nach Wahl des Menüpunkts **Gerät** | **Prüfung** | **Validierung** | **Wartung economic**.

Unter **Einstellen** geben Sie die Parameter der Standards ein. Die Ergebnisse der Validierung werden für jeden Prüfparameter auf einem eigenen Tab angezeigt. Dabei werden jeweils auf dem Tab **Ergebnisse** die digitalen Prüfergebnisse ausgegeben und auf dem Tab **Messwerte** die gemessenen Spektren grafisch dargestellt. In der Liste **Validierungsteil** kann jeweils eine Parametergruppe für die Anzeige ausgewählt werden.

In einem separaten Fenster kann der Audit Trail angezeigt werden. Die Ergebnisse der Validierung können gespeichert, gedruckt und wieder geöffnet werden.

HINWEIS

Um optimale Ergebnisse zu erhalten, beachten Sie folgende Hinweise:

- Starten Sie die Validierung nach einer Geräte-Einlaufzeit von 2 Stunden. In dieser Zeit müssen beide Lampen des SPECORD PLUS eingeschaltet sein.
- Führen Sie unmittelbar vor dem Öffnen des Fensters Validierung eine Grundkorrektur, bzw. beim SPECORD 250 PLUS eine Gitter- und Grundkorrektur, durch.

13.4.1 Prüfparameter und erforderliche Hilfsmittel

Prüfparameter

Folgende Parameter werden in der **Wartung economic** validiert:

Parameter	Beschreibung
Transmissionsnullpunkt	Messung mit abgedecktem Mess-Strahlengang bei geöffnetem Referenzstrahlengang im Bereich 200 ... 1000 nm Aus dem Ergebnis werden Minimum und Maximum der Transmissionsnullpunktabweichung des Gerätes berechnet.
Abweichung der Basislinie	Aufnahme der Basislinie im Absorptionsmodus im Bereich 200 ... 1000 nm
- Photometrische Richtigkeit (Absorbanz bei 465 nm)	Test mit einem zertifizierten Standardfilter Bestimmung der Differenz der gemessenen Absorbanz zu den vorgegebenen Sollwerten der Grauglasfilter F2, F3 und F4 bei 465nm
Wellenlängenrichtigkeit mit Seltenerdoxid-Filter	Messung der Wellenlängenpositionen der Peaks eines Holmiumoxidglasfilters mit bekannten Sollwerten für die Wellenlänge in den 5 Bereichen 270 ... 285 nm, 350 ... 370 nm, 450 ... 485 nm, 530 ... 545 nm und 630 ... 645 nm
Spektrale Auflösung	Bestimmung der spektralen Halbwertsbreite an der D_2E-Linie bei 656,1 nm Die Messung erfolgt mit der UV-Lampe (D_2E-Lampe).

Prüfmittel

Für die Validierung **Wartung economic** werden folgende Standards benötigt:

- Zertifizierter Filtersatz für die photometrische Messung des Vis-Spektralbereichs und zertifizierter Holmiumoxid-Glasfilter für die Wellenlängenmessung (HELLMA Standardfiltersatz)

HINWEIS

Für die zertifizierten Standards geben die Hersteller auf den Zertifikaten einen Temperaturbereich für die Verwendung an. Halten Sie bei der Validierung unbedingt diesen Temperaturbereich ein. Eine Validierung außerhalb der angegebenen Temperaturtoleranzen kann zu falschen Messergebnissen führen!

13.4.2 Validierungsparameter eingeben

Zu Beginn der Validierung müssen Sie die Zertifikatdaten des verwendeten Prüfmittels eingeben.

- Im Hauptfenster Menüpunkt **Gerät** | **Prüfung** | **Validierung** | **Wartung economic** wählen.
- Auf **Einstellen** klicken.
- Im Fenster **Einstellungen** die zu den Prüfmitteln nötigen Einstellungen vornehmen (siehe unten).
- Mit **Ok** die Validierungsparameter bestätigen.

  ✓ Das Fenster **Einstellungen** wird geschlossen und die Schaltfläche **Start** freigeschaltet.

Tab Allgemein

Auf dem Tab **Allgemein** können Sie einen Benutzernamen und eine Bemerkung zur Validierung eingeben. Außerdem finden Sie hier eine Übersicht der Prüfparameter. Der Umfang der Prüfungen ist durch den Hersteller festgelegt.

Tab Akzeptanzkriterien

Auf dem Tab **Akzeptanzkriterien** finden Sie die Werte, die entsprechend der Herstellerspezifikation zu erreichen sind.

Tab Photometrische Richtigkeit bei 465 nm

Tragen Sie hier die Kenndaten des Graufiltersatzes ein.

Filterparameter	Identifikationsnummer der Filter entsprechend Datenblatt
Prüfwellenlängen und Sollwerte der Absorbanz:	Wellenlängen und Sollwerte für die Prüfung entsprechend Datenblatt eintragen.

Tab Wellenlängen

Tragen Sie hier die Kenndaten des Holmiumoxidglasfilters ein.

Bezeichnung Id.	Identifikationsnummer des verwendeten Holmiumoxidglasfilters
Prüfwellenlängen	Sollwerte der Spektrenpeaks entsprechend Datenblatt

Tab Spektrale Auflösung

Dieser Tab enthält Informationen zu den Messbedingungen des Prüfpunkts.

13.4.3 Validierung ausführen

HINWEIS

Um optimale Ergebnisse zu erhalten, beachten Sie folgende Hinweise:

- Starten Sie die Validierung nach einer Geräte-Einlaufzeit von 2 Stunden. In dieser Zeit müssen beide Lampen des SPECORD PLUS eingeschaltet sein.
- Führen Sie unmittelbar vor dem Öffnen des Fensters Validierung eine Grundkorrektur, bzw. beim SPECORD 250 PLUS eine Gitter- und Grundkorrektur, durch.

Filter und Küvetten platzieren

Alle verwendeten Filter und Küvetten mit Standardlösungen, auch Referenzen, sind immer in den Mess-Strahlengang zu setzen. Der Referenzstrahlengang bleibt bei allen Messungen frei!

Validierung ausführen

Nach der Eingabe der Validierungsparameter im Fenster **Einstellungen** wird das Icon **Start** freigeschaltet. Die Validierung erfolgt programmgeführt. Entsprechend Ihrer Auswahl der Prüfparameter im Fenster **Einstellungen** werden die Messungen nacheinander durchgeführt.

- Validierung mit Klick auf starten.
- Den weiteren Anweisungen zur Verwendung von Filtern und Küvetten in den Fenstern folgen.
- Im Anschluss an jeden Teilschritt der Validierung werden in einem Fenster die Prüfergebnisse und die festgelegten Toleranzen angezeigt. Das Prüfergebnis-Fenster bietet folgende Optionen für das weitere Validierungsverfahren:

Option	Beschreibung
Wiederholen	Prüfpunkt wiederholen Die bisher aufgenommenen Messwerte des aktuellen Prüfpunktes werden verworfen. Die Wiederholung eines Prüfpunktes wird im Audit Trail dokumentiert.
Fortsetzen	Messung des nächsten Prüfparameters starten
Abbrechen	Validierung abbrechen Bisher aufgenommene Messwerte sind jedoch temporär gespeichert und werden auf den Tabs der Validierung angezeigt.

Validierungsergebnisse anzeigen

Nach dem die Validierung beendet ist, werden die Ergebnisse auf den Tabs des Fensters **Wartung economic** angezeigt.

In der Liste **Validierungsteil** wird die Gruppe der anzuzeigenden Prüfparameter gewählt. Der Tab **Ergebnisse** zeigt die digitalen Messergebnisse im Vergleich zu den zulässigen Toleranzen. Auf dem Tab **Messwerte** werden die Spektren dargestellt. Mit dem Menüpunkt **Datei** | **Übersicht** können Sie sich die Ergebnisse der Validierung in einer kompakten Übersicht anzeigen lassen.

Audit Trail anzeigen

- Im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Audit Trail anzeigen** wählen.
- Auf den Tab **Audit Trail** klicken.
  - ✓ Unabhängig vom gewählten Validierungsteil wird der komplette Audit Trail angezeigt.

Hinweis: Der Audit Trail wird bei Auswahl der Druckvorlage "Detailed.lst" mitgedruckt.

Validierungsergebnisse exportieren

- Im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Export** wählen.
- Im Fenster **ASCII-Export** den Namen der Exportdatei und das Dezimaltrennzeichen eingeben und mit **Ok** bestätigen.

✓ Die Daten werden exportiert.

Validierungsergebnisse drucken

- Im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Drucken** wählen.
- Im Fenster **Öffnen** im Ordner \\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect UV\Reports\Wartung economic die Druckvorlage "Compact.lst" oder "Detailed.lst" wählen.
- Im Fenster **LLPrint Preview** die Optionen **Alle Seiten drucken** wählen.

✓ Das Protokoll wird gedruckt.

14 Benutzerverwaltung und elektronische Signaturen

Das optional erhältliche Modul FDA 21 CFR Part 11 Compliance beinhaltet die Benutzerverwaltung und bietet die Möglichkeit der elektronischen Signatur der Messergebnisse.

14.1 Benutzerverwaltung

14.1.1 Vorinstallierte Benutzer

Die Benutzerverwaltung ASpect UV erlaubt eine flexible Vergabe von Benutzerrechten. Jedem Benutzer kann aus dem vollen Funktionsumfang von ASpect UV der Zugriff auf die einzelnen Funktionen erlaubt oder verboten werden.

Standardmäßig angelegte Benutzer

In der Installation des Moduls FDA 21 CFR Part 11 Compliance sind Benutzer mit verschiedenen Zugriffsrechten angelegt, die direkt oder als Beispiel für eine eigene Rechteverwaltung genutzt werden können. Für die Anmeldung dieser Benutzer sind bereits Logins und Passwörter vergeben, die jedoch bearbeitet und ggf. deaktiviert werden können.

Tipp

Deaktivieren Sie diese Benutzer, um mit Hilfe der Funktion **Berechtigung übernehmen** Vorlagen für Benutzerprofile mit verschiedenen Rollen zu definieren. Diese Profile können Sie dann auf tatsächlich existierende Benutzer übertragen.

AJ Service

Der **AJ Service** ist ein Benutzer der über alle Rechte verfügt, also eine Kombination aus Administrator und Researcher. Dieser Benutzer wird von Service-Mitarbeiter der AJ bei Wartungsarbeiten und für Tests bei der Softwarequalifizierung verwendet.

Administrator

Der **Administrator** kann vollständig auf die Benutzerverwaltung zugreifen und Benutzerprofile anlegen, bearbeiten und übertragen. Er hat keinen Zugriff auf die Messmodule und kann keine Methoden erstellen oder Messungen starten.

Login: Admin

Passwort: admin

User Level 1 (Researcher)

Der **User Level 1 (Researcher)** hat uneingeschränkten Zugriff auf die Funktionen von ASpect UV. Er kann die Benutzerverwaltung einsehen, jedoch kein neues Benutzerprofil anlegen oder bestehende Benutzerprofile ändern.

Login: User1

Passwort: user1

User Level 2 (TechAssistent)

Der **User Level 2 (TechAssistent)** hat Zugriff auf folgende Funktionen:

- Ergebnisse öffnen
- Methoden öffnen
- Module öffnen
- Messungen starten
- Messungen auswerten

Er darf nicht:

- Methoden erstellen
- Gerätekorrekturen vornehmen
- Benutzerverwaltung einsehen

Login: User2

Passwort: user2

User Level 3 (Laboratory Supervisor)

Der **User Level 3 (Laboratory Supervisor)** hat Zugriff auf folgende Funktionen:

- Ergebnisse öffnen
- Methoden öffnen
- Module öffnen
- Methoden erstellen
- Messungen auswerten
- Messungen in der Schnellmessung starten, die keine speicherbaren Ergebnisse liefert

Er darf nicht:

- Messungen in den Modulen von ASpect UV starten
- SPECORD PLUS prüfen und korrigieren
- Benutzerverwaltung einsehen

Login: User3

Passwort: user3

User Level 4 (Service)

Der **User Level 4 (Service)** ist für den Service eingerichtet. Er hat Zugriff auf folgende Funktionen:

- Einfache Messung ausführen
- SPECORD PLUS korrigieren
- SPECORD PLUS prüfen
- Energiemessung starten und auswerten
- Benutzerliste einsehen

Er darf nicht:

- Die Module Photometrie, Spektrum, Farbmetrik, Thermometrie oder Kinetik öffnen
- Auf Methoden und Ergebnisse dieser Module zugreifen

Login: User4

Passwort: user4

14.1.2 Funktionen der Benutzerverwaltung

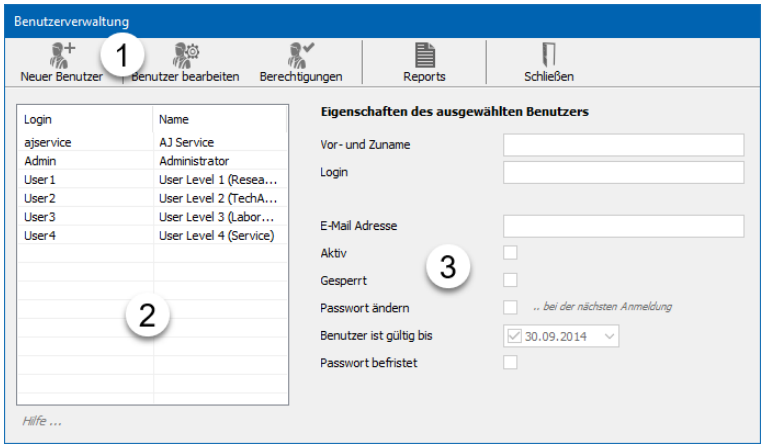
Die Benutzerverwaltung kann nur von einem Benutzer organisiert werden, dem die entsprechenden Rechte zugewiesen wurden. Vorinstalliert ist in diesem Fall der Benutzer **Administrator**. Die Benutzer **User Level 1 (Researcher)** und **User Level 4 (Service)** können die Einträge der Benutzerverwaltung einsehen, jedoch nicht editieren.

Benutzerverwaltung öffnen

▶ Im Hauptfenster den Menüpunkt **Benutzer** | **Benutzerverwaltung** wählen.

✓ Die Benutzerverwaltung wird geöffnet. Je nach Zugriffsrechten können Benutzer neu angelegt und editiert werden oder nur die Benutzerliste eingesehen werden.

Fenster Benutzerverwaltung



Nr.	Beschreibung
1	Menüleiste
2	Liste der angelegten Benutzerprofile
3	Eigenschaften eines ausgewählten Behutzerprofils

In der Menüleiste sind alle Funktionen für das Anlegen und Editieren von Benutzerprofilen angeordnet:

Icon	Beschreibung
Neuer Benutzer	Neues Benutzerprofil anlegen
Benutzer bearbeiten	Eigenschaften eines Benutzerprofils ändern
Berechtigungen	Für einen ausgewählten Benutzer die Zugriffsberechtigung auf jede Funktion in ASpect UV freischalten oder verbieten Benutzerprofile übertragen
Reports	Reports über die Anmeldungen in ASpect UV und die Benutzerverwaltung erstellen
Schließen	Benutzerverwaltung schließen

14.1.3 Benutzer anlegen und bearbeiten

Nur Benutzer mit vollständigen Zugriffsrechten auf die Benutzerverwaltung können einen neuen Benutzer anlegen. Nutzen Sie dazu bspw. den vorinstallierten Benutzer **Administrator**.

Wenn Sie einen Benutzer in ASpect UV anlegen, können Sie sich entscheiden, ob Sie die Benutzereigenschaften (z. B Login und Passwort) im ASpect UV verwalten oder die Eigenschaften des bestehenden Active Directory Domain Services verwenden möchten.

Wenn ein Benutzer erstellt wurde, müssen Sie ihm im Anschluss die Benutzerrechte in ASpect UV zuweisen. Damit verbieten oder erlauben Sie einem Benutzer die Verwendung jeder einzelnen Funktion in ASpect UV. Sie können Beispielbenutzerprofile erstellen und deren Rechte auf einen Benutzer übertragen.

Benutzer in ASpect UV anlegen und verwalten

- Im Hauptfenster den Menüpunkt **Benutzer** | **Benutzerverwaltung** wählen.
- Auf **Neuer Benutzer** klicken.
- Folgende Einstellungen im Fenster **Benutzer** vornehmen.

Option	Beschreibung
Login	Login des Benutzers
Benutzermanagement	**ASpect UV** Benutzereigenschaften innerhalb von ASpect UV verwalten
Vor- und Zuname	Name des Benutzers
E-Mail Adresse	E-Mail-Adresse des Benutzers
Aktiv	Aktivieren, wenn das Benutzerprofil verwendet werden soll.
Gesperrt	Aktivieren, wenn das Benutzerprofil nicht verwendet werden darf. Mit einem gesperrten Benutzerprofil kann sich dann der Benutzer nicht mehr im Programm anmelden.

Option	Beschreibung
Passwort ändern	Aktivieren, wenn der Benutzer bei der ersten Anmeldung mit diesem Profil ein eigenes Passwort erstellen soll. Die Option muss ebenfalls aktiviert werden, wenn der Benutzer nach einer Sperrung/Ablauf der Gültigkeit vom Admin neu aktiviert wurde.
Benutzer ist gültig bis	Aktivieren und Ablaufdatum einstellen, wenn das Benutzerprofil nur eine bestimmte Zeitspanne gültig sein soll. Gültigkeit bis einschließlich Ablauftag 23:59 Uhr
Passwort / Passwort ändern	Passwort und Passwortwiederholung für die Anmeldung des Benutzers im Programm

- Benutzereinstellungen mit **Ok** bestätigen.
- Für die Berechtigungseinstellungen in ASpect UV Rechte eines anderen Nutzers übernehmen oder die Rechte im Anschluss manuell einstellen.
  - ✓ Der neue Benutzer ist angelegt. Sie können die Benutzerrechte in ASpect UV weiter editieren.

Benutzer mit Active Directory verwalten

- Auf **Neuer Benutzer** klicken.
- Für den Parameter **Benutzermanagement** die Option **Domäne** wählen.
- Im Feld **Login** den Login des existierenden Benutzers im Active Directory eintragen.
- Im Feld **Domäne** den Domänennamen eintragen.
- Für die Berechtigungseinstellungen in ASpect UV Rechte eines anderen Nutzers übernehmen oder die Rechte im Anschluss manuell einstellen.
  - ✓ Der neue Benutzer ist angelegt und kann sich mit dem Login aus dem Active Directory in ASpect UV anmelden. Sie können die Benutzerrechte in ASpect UV weiter editieren.

Benutzereigenschaften ändern

Die Eigenschaften eines Benutzers, der innerhalb von ASpect UV verwaltet wird, können Sie nachträglich ändern. Sie können bspw. einen Benutzer sperren oder sein Passwort zurücksetzen. Eigenschaften von Benutzern, die im Active Directory verwaltet werden, können Sie nur dort ändern.

- Benutzer in der Benutzerliste des Fensters **Benutzerverwaltung** auswählen.
- Auf **Benutzer bearbeiten** klicken.
- Einstellungen im Fenster **Einstellungen des Benutzers** ändern.
  - ✓ Die Benutzereigenschaften wurden geändert.

14.1.4 Benutzerrechte zuweisen

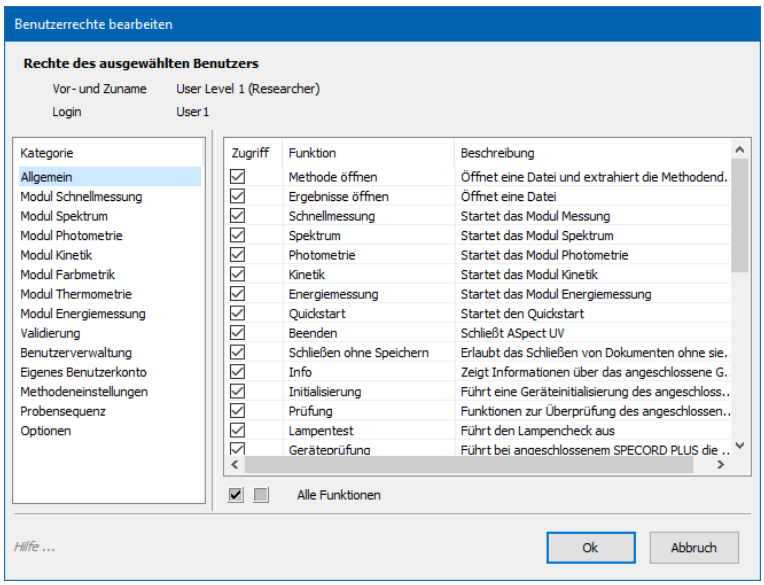
Benutzerrechte zuweisen

Jedem Benutzer kann individuell Zugriff auf die Funktionen von ASpect UV gewährt werden.

Hinweis: Die Optionen in der Kategorie **Allgemein** sind dem Hauptfenster von ASpect UV zugeordnet. Wenn Sie einem Benutzer die Rechte **Methode öffnen** oder **Ergebnisse öffnen** entziehen bzw. zuweisen wollen, müssen Sie diese Optionen auch in den einzelnen Modulen dementsprechend (de-)aktvieren.

- Benutzer in der Benutzerliste des Fensters **Benutzerverwaltung** auswählen.
- Menüpunkt **Berechtigungen** | **Berechtigungen einstellen** wählen.
- Auf der linken Seite des Fensters **Benutzerrechte bearbeiten** jeweils die Kategorie auswählen und auf der rechten Seite alle Funktionen aktivieren, auf die der Benutzer Zugriff erhalten soll.

  ✓ Dem Benutzerprofil werden individuelle Rechte zugewiesen.



Benutzerrechte übertragen

Die Benutzerrechte eines Benutzerprofils können Sie auf ein anderes übertragen. Auf dieses Weise können Sie sich Musterprofile/Rollen mit unterschiedlichen Zugriffsberechtigungen erstellen und diese neuen Benutzerprofilen zuweisen. Als Grundlage für diese Benutzerprofile können Sie auch die vorinstallierten Benutzerprofile User 1 ... User 4 verwenden.

- Das Zielprofil im Fenster **Benutzerverwaltung** markieren.
- Menüpunkt **Berechtigungen** | **Berechtigungen übernehmen** wählen.
- Im Fenster **Rechteübernahme** das Ausgangs-/Rollenprofil für die Benutzerrechte auswählen und mit **Ok** bestätigen.

  ✓ Die Benutzerrechte des ausgewählten Profils werden auf das Zielprofil übertragen.

Besonderheiten bei Signaturen

Das Recht, ein Dokument mit einer Signatur zu versehen, muss für jeden Benutzer separat freigeschaltet werden. Dabei wird zwischen Signaturen, die in einer definierten Reihenfolge erfolgen müssen, und Signaturen ohne Reihenfolge unterschieden. Die Kategorie **Signaturen** ist erst sichtbar, wenn im Fenster **Optionen** | **Erweitert** | **Signaturen** bereits Signaturen angelegt wurden.

- Benutzer in der Benutzerliste des Fensters **Benutzerverwaltung** auswählen.
- Menüpunkt **Berechtigungen** | **Berechtigungen einstellen** wählen.

- In der Kategorie **Signaturen** alle Signaturen für den ausgewählten Benutzer aktivieren.
- Wenn Sie eine Signatur aktivieren, die nicht in der Signaturreihenfolge steht, müssen Sie in der Kategorie **Eigenes Benutzerkonto** die Option **Signieren außerhalb der Signatursequenz** aktivieren. Nur dann kann der Benutzer diese Signaturen verwenden. Anderenfalls ist die Signatur trotz Aktivierung in der Kategorie **Signaturen** für den Benutzer nicht verfügbar.

Sehen Sie dazu auch

Signaturen anlegen [▶ 147]

14.1.5 Reports in der Benutzerverwaltung erstellen

In der Benutzerverwaltung können Sie verschiedene Reports erstellen und ausdrucken.

- Audit Trail der Benutzerverwaltung
- Liste der Anmeldungen in ASpect UV
- Liste aller Benutzer
- Rechte des ausgewählten Benutzers

Das Recht der Reporteinsicht muss für einen Benutzer in den Benutzerrechten freigeschaltet werden.

Audit Trail

Im Audit Trail sind alle Änderungen an den Benutzerprofilen dokumentiert.

- Im Fenster **Benutzerverwaltung** den Menüpunkt **Reports** | **Audit Trail** | **Ansicht** wählen.
- Über die Filtereinstellungen können die Einträge nach ausführendem **Admin**, geändertem Benutzerprofil und Datum sortiert, gefiltert und ausgedruckt werden. Dazu die Einstellungen vornehmen und auf **Aktualisieren** klicken.
- Für den Druck/Export des gesamten Audit Trail den Menüpunkt **Reports** | **Audit Trail** | **Drucken** und Report "UM_Audit Trail.lst" im Pfad \\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect UV\Reports\Benutzerverwaltung wählen.

Liste der Anmeldungen

In der Liste der Anmeldungen sind alle erfolgreichen und nicht erfolgreichen Benutzeran- und abmeldungen in ASpect UV mit Zeitpunkt dokumentiert.

- Im Fenster **Benutzerverwaltung** den Menüpunkt **Reports** | **Liste der Anmeldungen** | **Ansicht** wählen.
- Über die Filtereinstellungen können die Einträge nach Benutzern, Anmeldezeiträumen und Anmeldestatus (**abgewiesen**, **erfolgreich** oder **abgemeldet**) sortiert, gefiltert und ausgedruckt werden. Dazu die Einstellungen vornehmen und auf **Aktualisieren** klicken.
- Für den Druck/Export der gesamten Liste den Menüpunkt **Reports** | **Liste der Anmeldungen** | **Drucken** und Report "UM_LoginList.lst" im Pfad \\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect UV\Reports\Benutzerverwaltung wählen.

Liste aller Benutzer

Die Liste aller Benutzer beinhaltet die angelegten Benutzerprofile mit Informationen zum Status, dem Datum der Erstellung und dem Datum der letzten Anmeldung in ASpect UV. Die Liste der Benutzer kann nur gedruckt/exportiert werden.

- Im Fenster **Benutzerverwaltung** den Menüpunkt **Reports** | **Liste aller Benutzer** | **Drucken** und den Report "UM_UserList.lst" im Pfad \\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect UV\Reports\Benutzerverwaltung wählen.

Rechte des ausgewählten Benutzers

Mit dem Rechte-Report können Sie eine Übersicht über die Rechte eines ausgewählten Benutzers ausdrucken/exportieren.

- Im Fenster **Benutzerverwaltung** ein Benutzerprofil markieren.

- Den Menüpunkt **Reports** | **Rechte des ausgewählten Benutzers** | **Drucken** und den Report "UM_UserRights.lst" im Pfad \\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect UV\Reports\Benutzerverwaltung wählen.

14.1.6 Benutzer abmelden

Mit der Funktion **Abmelden** kann sich ein Benutzer vom laufenden Programm ASpect UV abmelden. Danach kann sich ein anderer oder der gleiche Benutzer erneut anmelden. Dieses Recht sollte für jeden Benutzer freigeschaltet sein.

Zum Abmelden ist es erforderlich vorher alle Dokumentenfenster der Module zu schließen.

- Im Hauptfenster den Menüpunkt **Benutzer** | **Abmelden** wählen.
  - ✓ Das Hauptfenster von ASpect UV wird gesperrt.
- Zum erneuten Anmelden auf **Login** klicken.
- Login und dazugehöriges Passwort eingeben.
  - ✓ Das Programm ASpect UV ist für weitere Aktionen freigegeben.

14.1.7 ASpect UV sperren

Mit der Funktion **ASpect UV sperren** wird das laufende Programm ASpect UV gesperrt, bis sich der gleiche oder ein anderer Benutzer erneut anmeldet. Das Recht zum Entsperren durch einen anderen Benutzer muss für den entsprechenden Benutzer in der Benutzerverwaltung vorher aktiviert sein

Laufende Messungen werden im gesperrten Zustand bis zu Ende abgearbeitet.

- Im Hauptfenster den Menüpunkt **Benutzer** | **ASpect UV sperren** wählen.
- Das Hauptfenster von ASpect UV wird gesperrt.
  - ✓ Zum erneuten Anmelden auf **Login** klicken.
- Login und dazugehöriges Passwort eingeben.
  - ✓ Das Programm ASpect UV ist für weitere Aktionen freigegeben.

14.1.8 Passwörter in ASpect UV

Gültigkeitskriterien für Passwörter

Die Kriterien für die Gültigkeit von Passwörtern können Sie im Fenster **Optionen** | **Erweitert** | **Passwortverwaltung** einstellen, wenn in Ihrem Benutzerprofil die Berechtigung freigeschaltet ist.

Login

Nach drei falschen Anmeldeversuchen wird das betreffende Benutzerkonto gesperrt. Die Sperrung kann nur durch den Benutzer mit den Zugriffsrechten der Administrator-Ebene aufgehoben werden.

Passwort ändern

Ein Benutzer kann das Passwort ändern, wenn die Funktion in seinem Benutzerprofil freigeschaltet ist.

- Im Hauptfenster den Menüpunkt **Benutzer** | **Passwort ändern** wählen.
- In den Feldern **Passwort** und **Passwort bestätigen** das neue Passwort eingeben.
  - ✓ Das neue Passwort wird übernommen.

Sehen Sie dazu auch

Eigenschaften von Passwörtern konfigurieren [▶ 146]

14.2 Elektronische Signatur

Was ist eine Signatur?

Im optionalen Modul FDA 21 CFR Part 11 Compliance ist es möglich, Dokumente zu signieren.

Durch eine Signatur werden die Dateien mit einer elektronischen Unterschrift (Logindaten des signierenden Benutzers) versehen und gleichzeitig die Möglichkeiten eingeschränkt, eine Datei weiter zu bearbeiten. Die Einschränkungen der Bearbeitung können die Datenverwaltung, Messungen oder Auswertungen auf den Arbeitsblättern betreffen und können für jede Signatur definiert werden. Wenn die Funktionalität einer Datei durch eine Signatur eingeschränkt wurde, kann diese Einschränkung nicht durch eine weitere Signatur wieder aufgehoben werden. Optional kann für Signaturen eine verbindliche Reihenfolge festgelegt werden, von der im Signaturprozess nicht abgewichen werden kann.

Die Signatur einer Datei hat Auswirkungen für einen angemeldeten Benutzer. Er kann nur Funktionen für eine Datei verwenden, die sowohl durch die Signatur der Datei als auch durch die Rechte seines Benutzerprofils erlaubt sind.

Das Recht, eine Datei mit einer bestimmten Signatur zu versehen, muss jedem Benutzer separat in seinem Benutzerprofil zugewiesen werden. Einem Benutzer können mehrere Signaturen zugewiesen werden.

Signaturen im Programm anlegen

Die Signaturen werden im Fenster **Optionen** | **Erweitert** | **Signaturen** verwaltet. Hier können Sie Signaturen erstellen, editieren oder löschen. Außerdem können Sie festlegen, in welcher Reihenfolge die Signaturen anzuwenden sind.

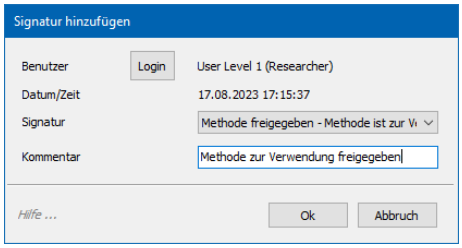
Signaturrechte zuweisen

Das Recht, eine oder mehrere Signaturen zu verwenden, muss im Benutzerprofil zugewiesen werden.

Dokument signieren

Voraussetzung für das Signieren ist die Anmeldung als Benutzer in ASpect UV.

- Im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Dokument signieren** wählen.
- Im Fenster **Signatur hinzufügen** auf **Login** klicken und sich mit den eigenen Logindaten anmelden.
  - ✓ Die Signaturen des Benutzers werden angezeigt.
- In der Liste **Signaturen** die Signatur wählen.
- Optional im Eingabefeld **Kommentar** eine Bemerkung eintragen und mit **Ok** bestätigen.
- Wenn das weitere Speichern des Dokuments durch die Signatur verboten wird, erscheint eine Meldung, dass die Datei jetzt letztmalig zu speichern ist. Nach Bestätigen der Meldung mit **Ja** im Fenster **Speichern unter** die Datei speichern.
  - ✓ Das Dokument ist nun durch den Benutzer signiert. Die weitere Bearbeitung des Dokuments ist entsprechend der gewählten Signatur eingeschränkt.

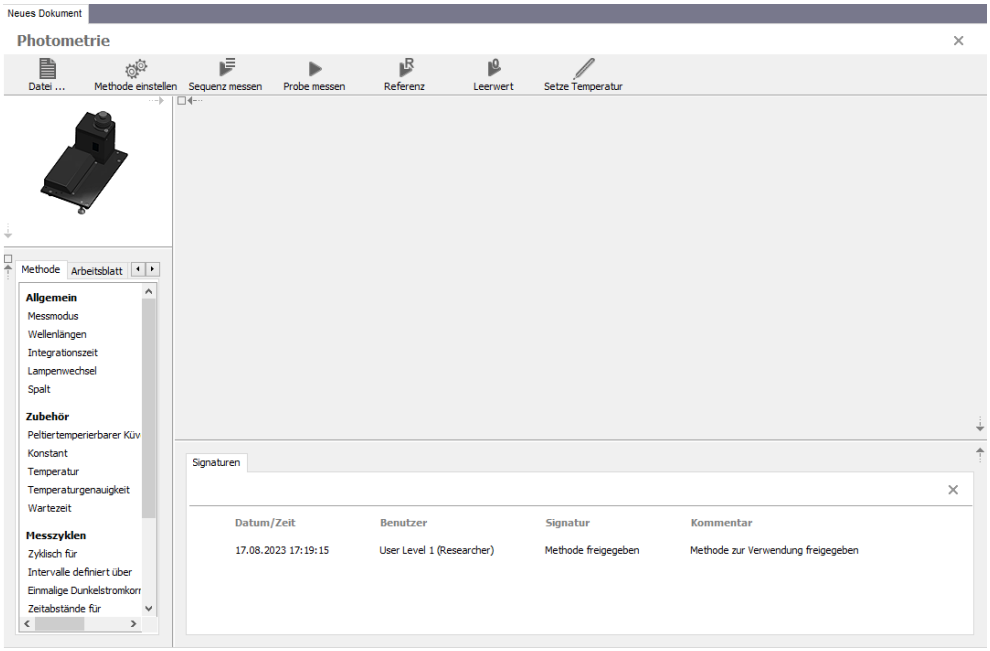


Signaturen anzeigen

Signaturen werden im unteren Teil des Dokumentfensters neben den Tabs für die Datenauswertung angezeigt.

- Für die Anzeige der Signaturen im Dokumentfenster den Menüpunkt **Datei** | **Signaturen anzeigen** wählen.

- Um die Anzeige zu schließen, auf ✕ auf dem Tab **Signaturen** klicken oder den Menüpunkt **Datei | Signaturenanzeige schließen** wählen.



15 AJ File Protection

Die optionale Software AJ File Protection schützt Dateien gegen beabsichtigte und unbeabsichtigte Datenmanipulation, z.B. Löschen oder Verändern von Daten. Dabei erlaubt ein Filtertreiber Verzeichniszugriffe durch hierfür autorisierte Anwendungen, Zugriffe durch andere Anwendungen werden blockiert. Die Funktion von Virenscannern sowie professioneller Replikations-, Synchronisations- oder Datensicherungssoftware wird bei Einhaltung der Microsoft-Standards nicht beeinträchtigt.

AJ File Protection muss durch den Systemadministrator installiert und konfiguriert werden. Die Installation erfordert Administratorrechte.

Eine detaillierte Beschreibung der Installation und der Konfiguration der Software finden Sie auf der Installations-CD.

In Verbindung mit den im optionalen Modul "FDA 21 CFR Part 11 Compliance" einstellbaren separaten Rechten zum automatischen Speichern und Exportieren gewährleistet die Software AJ File Protection eine lückenlose Datensicherheit von der Methodenerstellung, der Datenaufnahme und Auswertung bis zur Archivierung.

16 Optionales Modul SOAP

Mit dem optionalen Modul SOAP können Sie das SPECORD PLUS mit ASpect UV fernsteuern. In ASpect UV ist ein Webserver integriert, der mit dem Netzwerkprotokoll SOAP angesprochen werden kann. Dazu muss der PC, auf dem ASpect UV installiert ist und der mit dem SPECORD PLUS verbunden ist, mit dem Netz verbunden sein.

Webserver verwenden

- Das SPECORD PLUS einschalten und ASpect UV starten.
  - ✓ Das SPECORD PLUS wird initialisiert.
- Den Webserver über den Menüpunkt **Module** | **SOAP** starten.
- Im Fenster **SOAP-Webservice** auf **Start** klicken.
  - ✓ Der Webserver in ASpect UV kann jetzt vom Netzwerkprotokoll SOAP angesprochen werden und Messungen mit SPECORD PLUS initiieren.

Wenn Sie Interesse an dieser Funktion haben, setzen Sie sich mit ihrem Vertriebspartner der Analytik Jena in Verbindung.

17 Revisionsübersicht

Version	Änderungen
00.15	Erste Ausgabe
01.16	■ Neu: Modul Thermometrie, Modul Farbmetrik
02.16	■ Änderung Farbmetrik: Korrektur der verwendeten Normen Herausgabe der englischen Version
03.19	■ Neu: Datenexport in CSV-Format ■ Änderung: Probensequenzen ■ Änderung: Lampenwechsel in den Messparametern verfügbar ■ Neu: Validierung des SPECORD PLUS nach Herstellerspezifikation, Ph. Eur., USP und Wartung economic ■ Neu: Korrektur der Unendlichabsorbanz ■ Neu: AJ File Protection ■ Neu: Reports in der Benutzerverwaltung für Audit Trail, Anmeldungen, Benutzerprofile und Benutzerrechte
04.20	■ Änderung: Gerätevalidierung nach Ph. Eur. Ausgabe 10 ■ Neu: Gerätevalidierung nach USP Version 42 verfügbar
A (02/2021)	■ Erweiterte Funktionen in der Benutzerverwaltung ■ Erweiterte Signaturen und Signatursequenzen ■ Automatische Archivierung ■ Gerätevalidierung gemäß USP-Ausgabe USP-NF 2021 ist verfügbar
B (09/2023)	■ Rechtsformänderung des Herstellers
C (02/2024)	■ Gerätevalidierungen gemäß USP-Ausgabe USP-NF 2022 und USP-NF 2023 sind verfügbar
D (08/2024)	■ Gespeicherte Referenzen können auf andere Messdaten angewendet werden ■ Referenzen müssen mit einem Namen versehen werden ■ Zeitzyklische Messungen sind in den Modulen Photometrie und Spektrum möglich ■ Messwiederholungen sind für jeden Probentyp einstellbar ■ In Formeln können Werte verschiedener Proben miteinander verknüpft werden ■ Im Formeleditor sind die Funktionen AREA, TIME und Y neu verfügbar ■ Bei zyklischen Messung kann die Dunkelstrommessung einmalig vor der ersten Messung oder vor jeder Messung innerhalb des Zyklusses erfolgen ■ Auswertungen und mathematische Bearbeitungen sind im Dokumentfenster auf dem Arbeitsblatt Messung möglich ■ Die Funktion WebApp ist nicht mehr verfügbar
E (03/2026)	■ Gerätevalidierungen gemäß USP-Ausgabe USP-NF 2024, USP-NF 2025 und USP-NF 2026 sind verfügbar ■ Gerätevalidierung nach Ph. Eur. Ausgabe 12.3

I Anhang

I.1 Vorinstallierte Methoden

Die Installation von ASpect UV enthält vorbereitete Methoden für verschiedene Applikationen. Nach einer Standardinstallation sind diese "*.auv"-Dateien in folgenden Ordnern abgelegt:

C:\Program Files (x86)\Analytik Jena\ASpect UV\Methoden

und C:\Users\Public\Documents\Analytik Jena\ASpect UV\Methoden

Je nach Sprachauswahl während der Installation werden die Methoden in Deutsch oder Englisch installiert.

Enzymatik

Die Enzymatikmethoden sind für Analysen mit Testkits von R-Biopharm geeignet. Die Testkits können im Internet unter der Adresse r-biopharm.com bestellt werden.

Für die Messungen sind folgende Zubehöre vorgesehen:
- 8fach-Küvettenwechsler
- 15fach-Küvettenkarussell

Die Methoden sind in folgenden Ordnern installiert:
- Deutsch
  \\ASpect UV\Methoden\Enzymatik\8xWechsler und
  \\ASpect UV\Methoden\Enzymatik\Küvettenkarussell
- Englisch
  \\ASpect UV\Methods\Enzymatic\8xcell changer und
  \\ASpect UV\Methods\Enzymatic\Cell carousel

Folgende Methoden sind installiert:

Nr.	Methode Deu	Methode Eng	Artikel-Nr.
1	Acetaldehyd	Acetaldehyde	Roche- Gelbe Linie 10668613035
2	Cholesterin	Cholesterol	Roche- Gelbe Linie 10139050035
3	Citronensäure	Citric acid	Enzytec Generic Line E1214
4	D-/L-Milchsäure	D-/L-Lactic acid	Enzytec Generic Line E1255
5	D-3-Hydroxybuttersäure	D-3-Hydroxybutyric acid	Roche- Gelbe Linie 10907979035
6	D-Äpfelsäure	L-Malic acid	Roche- Gelbe Linie 11215558035
7	D-Glucose	D-Glucose	Enzytec Generic Line E1210
8	D-Glucose/D-Fructose	D-Glucose/D-Fructose	Enzytec Generic Line E1245
9	D-Sorbit/Xylit	D-Sorbitol/Xylitol	Roche- Gelbe Linie 10670057035
10	Essigsäure	Acetic acid	Roche- Gelbe Linie 10148261035

Nr.	Methode Deu	Methode Eng	Artikel-Nr.
11	Ethanol	Ethanol	Roche- Gelbe Linie 10176290035
12	Glycerin	Glycerol	Enzytec Generic Line E1224
13	Harnstoff_Ammoniak	Urea/Ammonia	Roche- Gelbe Linie 10542946035
14	Lactose/D-Galactose	Lactose/D-Galactose	Enzytec Generic Line E1213
15	L-Äpfelsäure	L-Malic acid	Roche- Gelbe Linie 10139068035
16	L-Ascorbinsäure	L-Ascorbic acid	Enzytec Generic Line E1267
17	L-Glutaminsäure	Glutamic acid	Roche- Gelbe Linie 10139092035
18	L-Milchsäure	L-Lactic acid	Enzytec Generic Line E1254
19	Saccharose /D-Glucose	Saccharose/ D-Glucose	Enzytec Generic Line E1246
20	Saccharose/ D-Glucose/ D-Fructose	Saccharose/ D-Glucose/ D-Fructose	Enzytec Generic Line E1247
21	Stärke	Starch	Enzytec Generic Line E1268
22	Sulfit	Sulfite	Roche- Gelbe Linie 10725854035

Methoden für biochemische Analytik

Die Methoden für die biochemische Analytik sind für die Verwendung von passiven Zubehör (justierbarer Halter für Mikro-Kleinküvetten) vorgesehen.

Die Methoden sind in folgenden Ordnern installiert:

- Deutsch
  \\ASpect UV\ Methods \Bio
- Englisch
  \\ASpect UV\ Methods \Life Science

Folgende Methoden sind installiert:

Nr.	Methode Deutsch	Methode Englisch
1	Absorption 205 nm, Faktor 31	Absorption 205 nm, Factor 31
2	Absorption 215 nm, 225 nm	Absorption 215 nm, 225 nm
3	Absorption 260 nm, Faktor 33	Absorption 260 nm, Factor 33
4	Absorption 260 nm, Faktor 40	Absorption 260 nm, Factor 40
5	Absorption 260 nm, Faktor 50	Absorption 260 nm, Factor 50
6	Absorption 260 nm	Absorption 260 nm
7	Absorption 280 nm, Faktor 1,38	Absorption 280 nm, Factor 1,38
8	Absorption 280 nm	Absorption 280 nm
9	DNS-Reinheit	DNA-purity
10	Kalb und Bernlohr	Kalb and Bernlohr
11	Kalckar und Shafran	Kalckar and Shafran

Nr.	Methode Deutsch	Methode Englisch
12	Scopes-Formel	Scopes-Formula
13	Warburg-Christian-Formel (DNS)	Warburg-Christian-Formula (DNA)
14	Warburg-Christian-Formel (Eiweiß)	Warburg-Christian-Formula (Protein)
15	Whitaker und Granum	Whitaker and Granum

Wasseranalytik

Die Methoden für die Wasseranalytik sind für Analysen mit Spectroquant-Testkits geeignet. Die Testkits können im Internet unter http://www.merckmillipore.com/ bestellt werden.

Für die Messungen sind passive Zubehöre (Standardküvettenhalter) vorgesehen.

Die Methoden sind in folgenden Ordnern installiert:

- Deutsch
  \\ASpect UV\Methoden\Wasseranalytik
- Englisch
  \\ASpect UV\Methods\Water analysis

Folgende Methoden sind installiert:

Nr.	Methode Deu	Methode Eng	Artikel-Nr.	Bereich
1	Ammonium Test	Ammonia test	1.14752.	0.01 ... 3.00 mg/l NH4-N
2	Nitrat Test	Nitrate Test	1.09713.	0,1 ... 25,0 mg/l NO3-N
3	Phosphat Test	Phosphate Test	1.14848.	0,025 ... 5,00mg/l PO4-P
4	Sulfat Test	Sulfate Test	1.14791.	25,0 ... 300mg/l SO42-
5	Sulfit Test	Sulfite Test	1.01746.	1,0 ... 60,0mg/l SO32-

I.2 Messwertbildung und Aufnahme der Referenzwerte

Dieser Abschnitt gibt eine kurze Einführung in die Messwertermittlung beim Spektralphotometer und erläutert die Bedeutung der Basislinie und deren Korrektur.

Bei einer Absorptionsmessung wird bei jeder interessierenden Wellenlänge die eingestrahlte Energie I_0 (Referenzwert) und die von der Probe geschwächte Energie I gemessen. Das geschieht in willkürlichen Einheiten, da nur das Verhältnis eine Rolle spielt. Quantitativ wird das Absorptionsverhalten in Transmission **T[%]** oder Absorbanz ausgedrückt:

$D = \frac{I}{I_0}$	D – Durchlässigkeit I_0 – Energie ohne Schwächung (Basiswert) I – Energie, welche die Probe verlässt
$T[\%] = D * 100$	T[%] – Transmission in Prozent
$A = -\lg D$	Absorbanz

Messwertbildung bei einem Zweistrahlspektrometer

Um Messwertfehler durch Energieänderungen während der Messung (Drift) zu verringern, wurden Zweistrahlgeräte konstruiert. Mittels eines Vergleichs-Strahls wird dabei das Lampenspektrum "beobachtet". Die beiden ins Verhältnis gesetzten Energiewerte aus Mess- und Vergleichsstrahlengang kompensieren die Schwankungen der Lampenenergie.

Berechnung des Referenzwerts (auch Basislinie):

$D_R = \frac{I_{MR}}{I_{VR}}$	D_R – Durchlässigkeit für die Referenz I_{VR} – Energie des Vergleichsstrahls I_{MR} – Energie des Messstrahls

Berechnung des Probenwerts

$D_P = \frac{I_{MP}}{I_{VP}}$	D_P – Durchlässigkeit für die Probe I_{VP} – Energie des Vergleichsstrahls I_{MP} – Energie des Messstrahls

Berechnung des Messwerts

$D = \frac{D_P}{D_R}$	D – Durchlässigkeit D_P – Durchlässigkeit für die Probe D_R – Durchlässigkeit für die Referenz

Wohin mit der Referenzprobe bei Zweistrahlgeräten?

Bei einem Einstrahlgerät ist der Einsatz der Referenzprobe einfach. Stellen Sie die Referenzprobe in den Strahlengang und nehmen Sie die Referenzmessung vor. Tauschen Sie die Referenzprobe durch die Probe mit dem Analyten aus und nehmen Sie die Probenmessung vor.

Beim Zweistrahlgerät gibt es, in Abhängigkeit der späteren Probenmessung, verschiedene Kombinationen für den Einsatz der Referenz und damit leider auch Fehlermöglichkeiten:

Folgenden 3 Kombinationen sind denkbar und führen zu richtigen Ergebnissen:

Kombination	Referenzmessung		Probenmessung	
	Messstrahlengang	Vergleichsstrahlengang	Messstrahlengang	Vergleichsstrahlengang
1	Referenz	leer	Probe	leer
2	Referenz	Referenz	Probe	Referenz
3	leer	leer	Probe	Referenz

Korrektur der Unendlichabsorbanz

Die Korrektur der Undendlichabsorbanz hat für Proben mit einer sehr geringen Transmission Bedeutung und kann hier zu besseren Messergebnissen für die Absorbanz beitragen.

Bei sehr geringen Transmissionswerten nahe der 0%-Transmissionslinie verursacht das Signalrauschen eine Transmission von 0 oder eine negative Transmission. Da sich die Absorbanz als negativer dekadischer Logarithmus aus der Transmission errechnet (siehe oben), und dieser nur für Werte größer Null definiert ist, setzt man üblicher Weise für diese Transmissionswerte die Absorbanz auf die Größe der Rechengenauigkeit. In der ASpect UV liegt dieser Wert bei einer Absorbanz von 9.

In Abhängigkeit von der Energie (Spaltbreite und Wellenlänge der Strahlungsquelle) und der Empfindlichkeitskurve des Empfängers (Photodiode) liegt die untere Rauschgrenze in Absorbanz deutlich darunter. Dadurch werden hohe, stark springende Absorbanzwer-

te ausgegeben, die nicht durch die Absorbanz der Probe sondern durch das Signalrauschen und die Rechengenauigkeit verursacht werden. Peaks oder Kanten können in diesen verrauschten Spektren nur schlecht identifiziert und ausgewertet werden.

Um dies zu korrigieren, werden mit der Software Korrekturspektren ermittelt, mit denen der Effekt des Signalrauschens auf die Größe der unteren Rauschgrenze minimiert wird. Auf diese Weise ist es möglich, gut auswertbare Absorbanzspektren auch bei sehr hohen Absorbanzwerten (5 - 7) zu erzeugen.

Die Korrektur der Unendlichsabsorbanz wird insbesondere für die Streulichttests nach USP benötigt. Bei der Auswertung des Streulichts nach der Methode "10 mm gegen 5 mm" wird hier ein positiver Effekt erreicht, weil hier zwei stark absorbierende Proben sowohl als Referenz als auch als Probe zum Einsatz kommen.

I.3 Datenformat für den Import von Probeninformationen

Der Import von Probeninformationsdaten erfolgt im Methodenfesnter auf der Seite **Probensequenz**.

Format der Importdateien

Importiert werden können Daten aus den Formaten *.csv und *.txt.

Schlüsselworte

Werden in der ersten Zeile der Probeninformationsdatei Spalteninformationen gefunden (Semikolon separiert), werden alle folgenden Zeilen spaltenweise den entsprechenden Spalten in der Tabelle zugewiesen. Groß- und Kleinschreibung wird bei Schlüsselwörtern nicht berücksichtigt.

Folgende Schlüsselwörter für die Spalten sind zulässig:

Schlüsselwort	Bedeutung
type	Probentyp
name	Probenname
nomvalue	Standardkonzentration
notes	Probennotiz
initweight	Einwaage
dilution	Verdünnung
varA, varB, ... , varH	Variable A, Variable B, ... , Variable H

Folgende Schlüsselwörter sind den Probentypen zugeordnet. Groß- und Kleinschreibung wird auch bei diesen Schlüsselwörtern nicht berücksichtigt:

Schlüsselwort	Probentyp
meas	Messung
ref	Referenzprobe
wash	Spülprobe
calib	Kalibrationsstandard
nomeas	keine Messung
blank	Leerwertprobe

Beispiel

type;name;nomvalue;notes;initweight;dilution;varA;varB;varH;
ref;probe1a;0;note44;55;66;1;2;
calib;Standard1;55;note66;77;88;3;4;
calib;Standard2;75;note66;77;88;3;4;

	meas;probe2b;0;note55;66;77;2;3; blank;Leerwert;0;note66;77;88;4;5; wash;Waschloesung;0;note66;77;88;5;6;
Nur Probennamen importieren	Können keine Schlüsselwörter in der ersten Zeile identifiziert werden, werden alle Zeilen (inkl. der ersten) als Probennamen interpretiert und der Probentabelle fortlaufend zugewiesen **Beispiel** Probe 0815 Probe 0816 Probe 0817 Probe 0818 Probe 0819