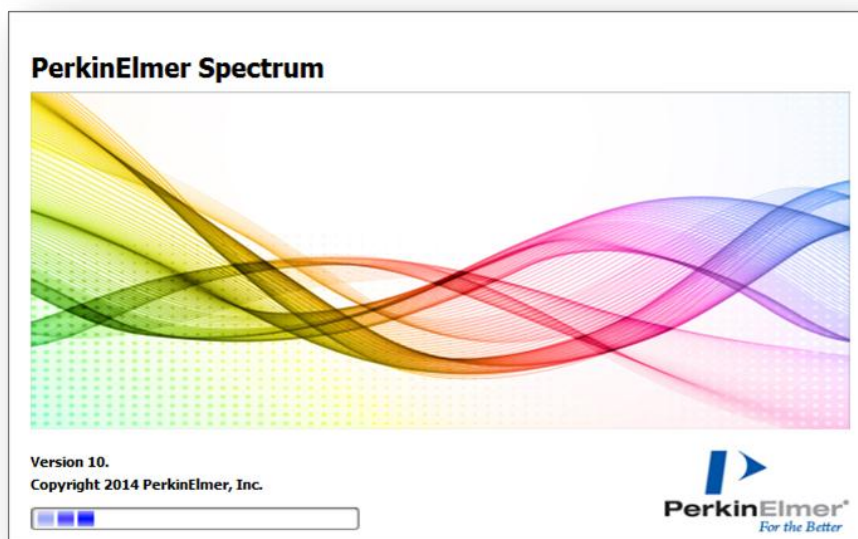


## Spectrum 10 – Spectroscopy Software



### Kurzanleitung

Version 2.1  
Stand September 2015

Claudia Ries, Applikation Materialcharakterisierung

## Inhalt

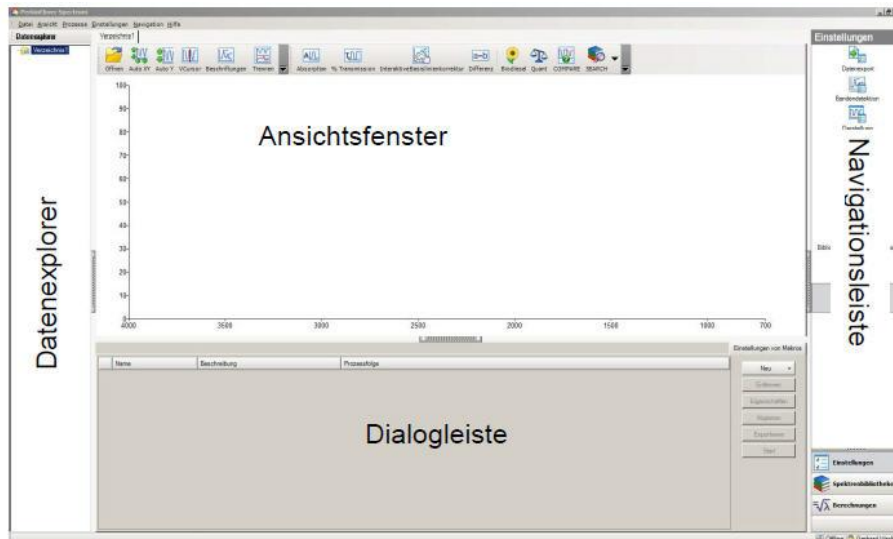
1. Allgemeines.....	4
1.1. Arbeitsoberfläche.....	4
1.1.1. Werkzeuggesten .....	4
1.2. Benutzerverwaltung.....	5
1.3. Einstellung zur Spektrendarstellung .....	6
1.4. Spektrometereinstellung .....	7
1.5. Spektrometertests .....	9
1.5.2. Instrument Performance Verification (IPV) Test.....	9
1.5.3. Abszissentest.....	9
1.5.4. Ordinatenest (Werte nicht übertragbar!).....	9
1.5.5. Rauschtest.....	9
1.5.6. Bereitschaftstest .....	9
2. Spektrenaufnahme .....	10
2.1. Funktionen zur Spektrendarstellung.....	10
3. Mikroskopsteuerung.....	12
3.1. Einrichten des Mikroskops.....	12
3.1.1. Strahlengang .....	12
3.1.2. Initialisierung.....	12
3.2. Ansichten im Mikroskopmodus .....	13
3.2.3. Stage View.....	13
3.2.4. Camera View .....	14
3.2.5. Mikroskop Einstellungen.....	15
3.2.6. Microscope Accessory toolbar .....	16
3.3. Übersicht des visuellen Bildes.....	17
3.4. Punktmarkierungen, Linescans und Maps .....	17
3.4.7. Bearbeiten der Eigenschaften einer Markierung.....	18
3.4.8. Datenaufnahme von Markierungen.....	19
3.4.8.1. Übersicht über die Messergebnisse.....	19
3.4.9. Scanlyze/Scan Marker .....	19
3.5. Image Analysis.....	20
3.6. Funktionen im Spotlight 200i.....	22
3.6.10. Stage Lighting.....	22
3.6.11. Automated ATR/Weighbridge Control.....	22

3.6.12.	Software behaviour in ATR Mode .....	23
3.6.13.	Crystal Control.....	23
3.6.14.	ATR Auto-Pressure - Run.....	23
3.6.15.	ATR Auto-Pressure – Contact Sample .....	25
3.6.16.	IR Monitor Using the ATR/Weighbridge .....	25
3.6.17.	ATR Point Mode Scanning.....	26
4.	Spektrenbearbeitung .....	27
4.1.	Funktionen zur Spektrenbearbeitung .....	28
4.1.1.	Funktionen für bessere Spektrenvergleichbarkeit.....	28
4.1.2.	Funktionen für ergebnisorientierte Messwerte .....	29
4.1.3.	Kontrastverstärkende Funktionen .....	29
4.1.4.	Funktionen zur Vorbereitung Spektrenauswertung .....	30
5.	Spektrenauswertung.....	30
5.1.	Qualitative Stoffanalyse .....	30
5.1.1.	COMPARE – Rechnerischer Spektrenvergleich .....	30
5.1.2.	Suchen.....	30
5.1.3.	MultiSearch .....	31
5.2.	Quantitative Bestimmung.....	32
5.2.4.	Bandenauswertung (Peak-Fläche/-Höhe).....	32
5.2.5.	Quantitative Auswertung mit Spectrum Quant .....	34
5.2.5.1.	Methodenerstellung in Spectrum Quant .....	34
5.3.	Spektrenrechner .....	35
5.4.	Schichtdickenbestimmung.....	36
6.	Makros .....	37
6.1.	In einer Touch APP .....	40
6.2.	Limitationen der Einstellungen von Makros .....	41
7.	Adulterant Screen .....	42
8.	Ergebnisausgabe .....	44
8.1.	Exportieren.....	44
8.2.	Report Erstellung .....	44
8.3.	Seitenansicht drucken.....	45
9.	Spektreninterpretation .....	46

## 1. Allgemeines

### 1.1. Arbeitsoberfläche

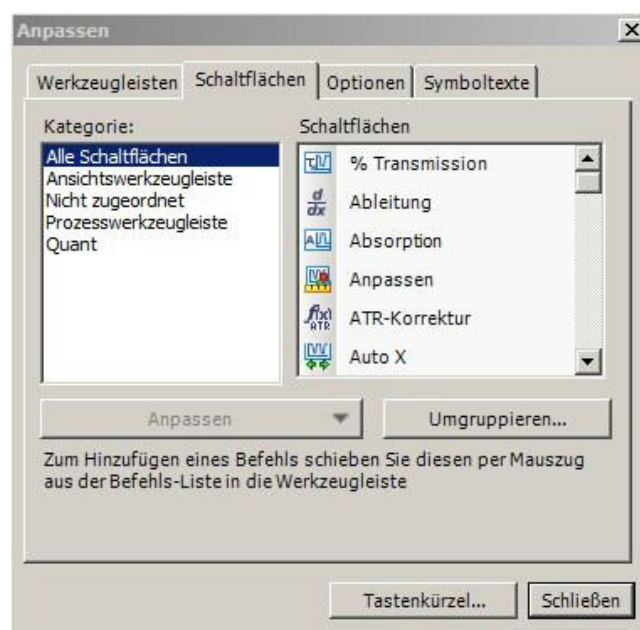
4 Teilbereiche in Arbeitsoberfläche vorhanden: Datenexplorer, Ansichtsfenster, Dialogleiste, Navigationsleiste



#### 1.1.1. Werkzeugleisten

individuelle Einstellung von Funktionen in Ansichtswerkzeugleiste; Spektrometereinstellungen, Datenaufnahme, Zubehöre, Ansichten und Prozesse

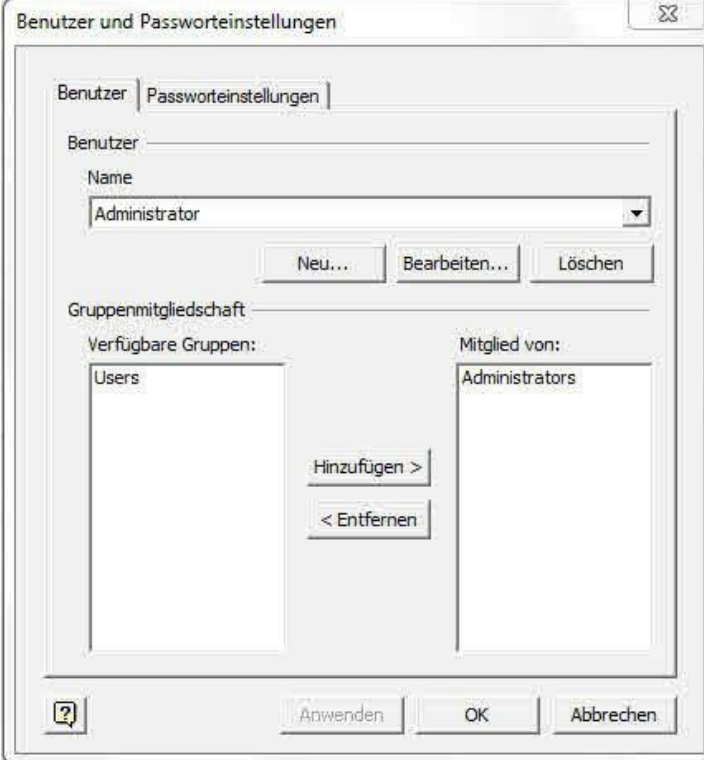
*Ansicht – Werkzeugleisten – Anpassen*




## 1.2. Benutzerverwaltung

Anlegen und Bearbeitung von Profile sowie Passwordeinstellungen

*Einstellung – Verwaltung – Benutzerverwaltung*



The screenshot shows the 'Benutzer und Passwordeinstellungen' dialog box with the 'Benutzer' tab selected. The 'Name' dropdown menu is set to 'Administrator'. Below it are buttons for 'Neu...', 'Bearbeiten...', and 'Löschen'. The 'Gruppenmitgliedschaft' section shows 'Verfügbare Gruppen' with 'Users' and 'Mitglied von:' with 'Administrators'. There are 'Hinzufügen >' and '< Entfernen' buttons between the lists. At the bottom are 'Anwenden', 'OK', and 'Abbrechen' buttons.




The screenshot shows the 'Benutzer und Passwordeinstellungen' dialog box with the 'Passwordeinstellungen' tab selected. The 'Art der Anmeldung:' dropdown is set to 'PerkinElmer Anmeldung' and there is a 'Kontosperrung...' button. The 'Maximales Passwortalter:' section has radio buttons for 'Das Passwort wird niemals ungültig' and 'Das Passwort wird ungültig nach (Tagen):' with a value of 42. The 'Minimales Passwortalter:' section has radio buttons for 'Das Passwort darf sofort geändert werden' and 'Ein Wechsel ist erst erlaubt nach (Tagen):' with a value of 1. The 'Minimale Passwortlänge:' section has radio buttons for 'Leere Passwörter zulassen' and 'Mindestanzahl zu benutzender Zeichen:' with a value of 6. The 'Einzigartigkeit des Passworts:' section has radio buttons for 'Nicht an benutzte Passwörter erinnern' and 'Mindestzahl zu erinnernder Passwörter:' with a value of 24. At the bottom are 'Anwenden', 'OK', and 'Abbrechen' buttons.

### 1.3. Einstellung zur Spektrendarstellung

Einstellungen zur Spektrendarstellung wie Achsenskalierung, Achsenbeschriftung, Farbpalette, etc

#### Einstellung – Darstellung

Einstellungen der Achsen	Einstellung der Darstellungsmerkmale	Erweiterte Einstellungen der Darstellung
<b>Darstellungsoption</b> <input type="checkbox"/> Einheiten der X-Achse ausblenden <input type="checkbox"/> Einheiten der Y-Achse ausblenden <input type="checkbox"/> Zahlenwerte der X-Achse ausblenden <input type="checkbox"/> Zahlenwerte der Y-Achse ausblenden	<b>Tooltips anzeigen</b> <input checked="" type="checkbox"/> Spektrenname anzeigen <input checked="" type="checkbox"/> Koordinaten anzeigen <input checked="" type="checkbox"/> Tooltip anzeigen	Aktualisieren Alle aktualisieren Zurücksetzen
<b>Datenpunkte</b> Darstellung Niemals darstellen Form Kreuz	<b>Linie</b> Interpolierung Kubisch Größe 1 Art Durchgezogen	

Einstellungen der Achsen	Einstellung der Darstellungsmerkmale	Erweiterte Einstellungen der Darstellung
<input checked="" type="checkbox"/> Rasterung		Aktualisieren Alle aktualisieren Zurücksetzen
<b>Text und Linien</b> Element: Untergrund <input type="text" value=""/> Farbe.. Größe: Automatisch		
<b>Farbpalette</b> Doppelklick in die Palette ändert die Farbe 		

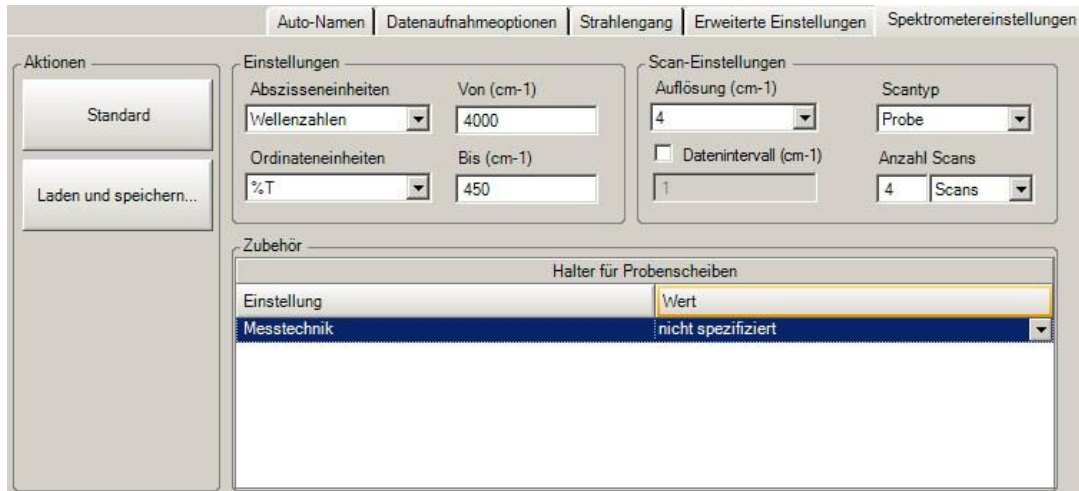
Einstellungen der Achsen	Einstellung der Darstellungsmerkmale	Erweiterte Einstellungen der Darstellung
<b>X-Achse</b> <input type="checkbox"/> Autoweite X <input checked="" type="checkbox"/> Skalierungsänderung bei 2000 cm <sup>-1</sup> Links: 4000 Rechts: 500 Einheiten: Automatisch	<b>Y-Achse</b> <input type="checkbox"/> Autoweite Y Obere: 100 Untere: 0 Einheiten: Automatisch	<b>Darstellungsmodus</b> <input checked="" type="radio"/> Überlagert <input type="radio"/> Getrennt
		Aktualisieren Alle aktualisieren Zurücksetzen

## 1.4. Spektrometereinstellung

Grundlegende Einstellungen zum Spektrometer und Spektrenaufnahme

Einstellung – Spektrometer

- Spektrometereinstellungen: Scaneinstellungen, Wellenzahlbereich, Ordinaten-/Abzissen



Auto-Namen | Datenaufnahmooptionen | Strahlengang | Erweiterte Einstellungen | **Spektrometereinstellungen**

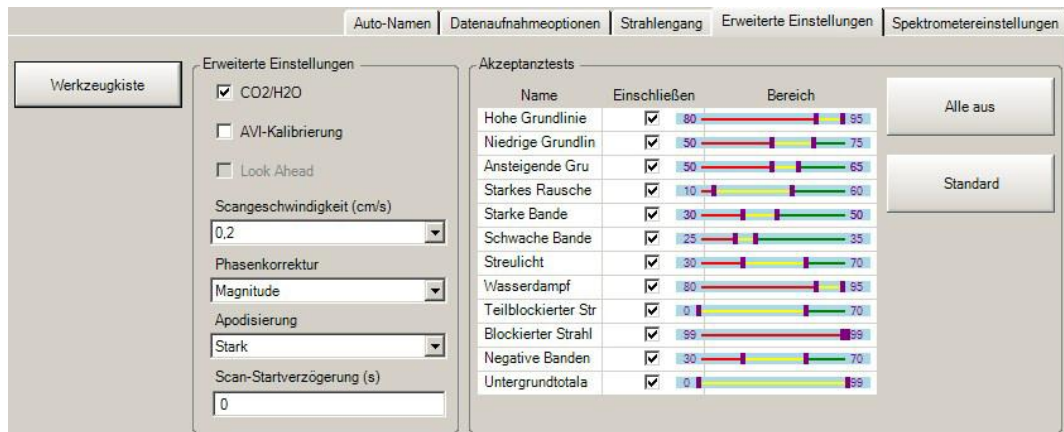
Aktionen: Standard, Laden und speichern...

Einstellungen:
   
Abszisseneinheiten: Von (cm<sup>-1</sup>)
   
Wellenzahlen: 4000
   
Ordinatenheiten: Bis (cm<sup>-1</sup>)
   
%T: 450

Scan-Einstellungen:
   
Auflösung (cm<sup>-1</sup>): 4
   
Scantyp: Probe
   
Datenintervall (cm<sup>-1</sup>): 1
   
Anzahl Scans: 4 Scans

Zubehör:
   
Halter für Probenscheiben
   
Einstellung | Wert
   
Messtechnik | nicht spezifiziert

- Erweiterte Einstellungen: AVC, Scangeschwindigkeit (0,2 cm/s), Phasenkorrektur (Magnitude), Apodisierung (stark), Startverzögerung



Auto-Namen | Datenaufnahmooptionen | Strahlengang | **Erweiterte Einstellungen** | Spektrometereinstellungen

Werkzeugkiste

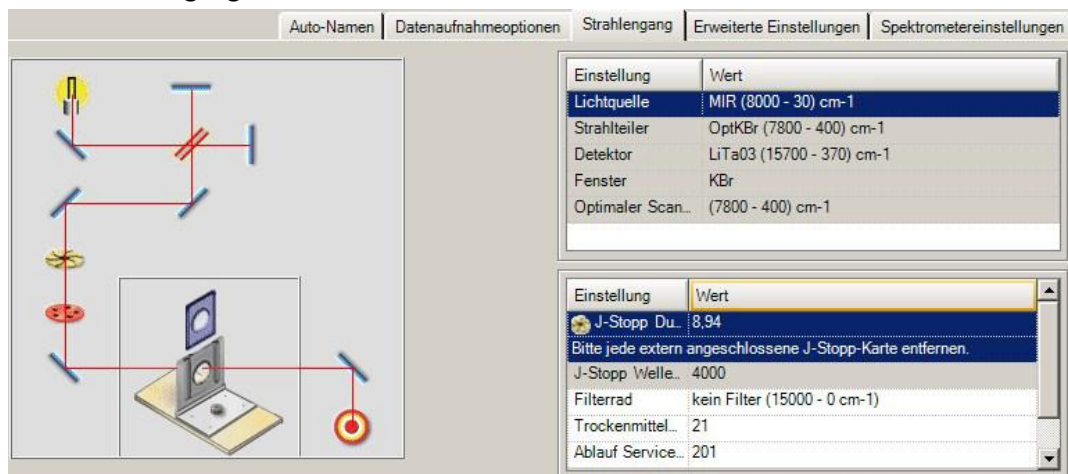
Erweiterte Einstellungen:
   
 CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O
   
 AVI-Kalibrierung
   
 Look Ahead
   
Scangeschwindigkeit (cm/s): 0,2
   
Phasenkorrektur: Magnitude
   
Apodisierung: Stark
   
Scan-Startverzögerung (s): 0

Akzeptanztests:

Name	Einschließen	Bereich
Hohe Grundlinie	<input checked="" type="checkbox"/>	80 - 95
Niedrige Grundlin	<input checked="" type="checkbox"/>	50 - 75
Ansteigende Gru	<input checked="" type="checkbox"/>	50 - 65
Starkes Rausche	<input checked="" type="checkbox"/>	10 - 60
Starke Bande	<input checked="" type="checkbox"/>	30 - 50
Schwache Bande	<input checked="" type="checkbox"/>	25 - 35
Streulicht	<input checked="" type="checkbox"/>	30 - 70
Wasserdampf	<input checked="" type="checkbox"/>	80 - 95
Teilblockierter Str	<input checked="" type="checkbox"/>	10 - 70
Blockierter Strahl	<input checked="" type="checkbox"/>	89 - 99
Negative Banden	<input checked="" type="checkbox"/>	30 - 70
Untergrundtotala	<input checked="" type="checkbox"/>	10 - 99

Alle aus, Standard

- Strahlengang



Auto-Namen | Datenaufnahmooptionen | **Strahlengang** | Erweiterte Einstellungen | Spektrometereinstellungen

Einstellung | Wert

Lichtquelle	MIR (8000 - 30) cm <sup>-1</sup>
Strahlteiler	OptKBr (7800 - 400) cm <sup>-1</sup>
Detektor	LiTa03 (15700 - 370) cm <sup>-1</sup>
Fenster	KBr
Optimaler Scan...	(7800 - 400) cm <sup>-1</sup>

Einstellung | Wert

J-Stopp Du.	8,94
Bitte jede extern angeschlossene J-Stopp-Karte entfernen.	
J-Stopp Welle..	4000
Filterrad	kein Filter (15000 - 0 cm <sup>-1</sup> )
Trockenmittel..	21
Ablauf Service..	201

- Datenaufnahme: Untergrundoptionen, automatisches Speichern (Speicherort, exportieren)



**Untergrundoptionen**

- Falls erforderlich
- Nach einer Anzahl von Proben  
10
- Nach einem Zeitablauf (Minuten)  
60

Ergänzend zu diesen Tests kann auch die Änderung einer Spektrometereinstellung die aktuelle Untergrundaufnahme ungültig machen.

**Automatisches Speichern**

- Speichern nach jeder Datenaufnahme
- Speicherort: C:\pel\_data\spectra\Wien\_09-11\_S2
- Exportieren
- Dateiformat: Kommagetrennte Werte (.csv)
- Exportziel speichern: C:\pel\_data\export

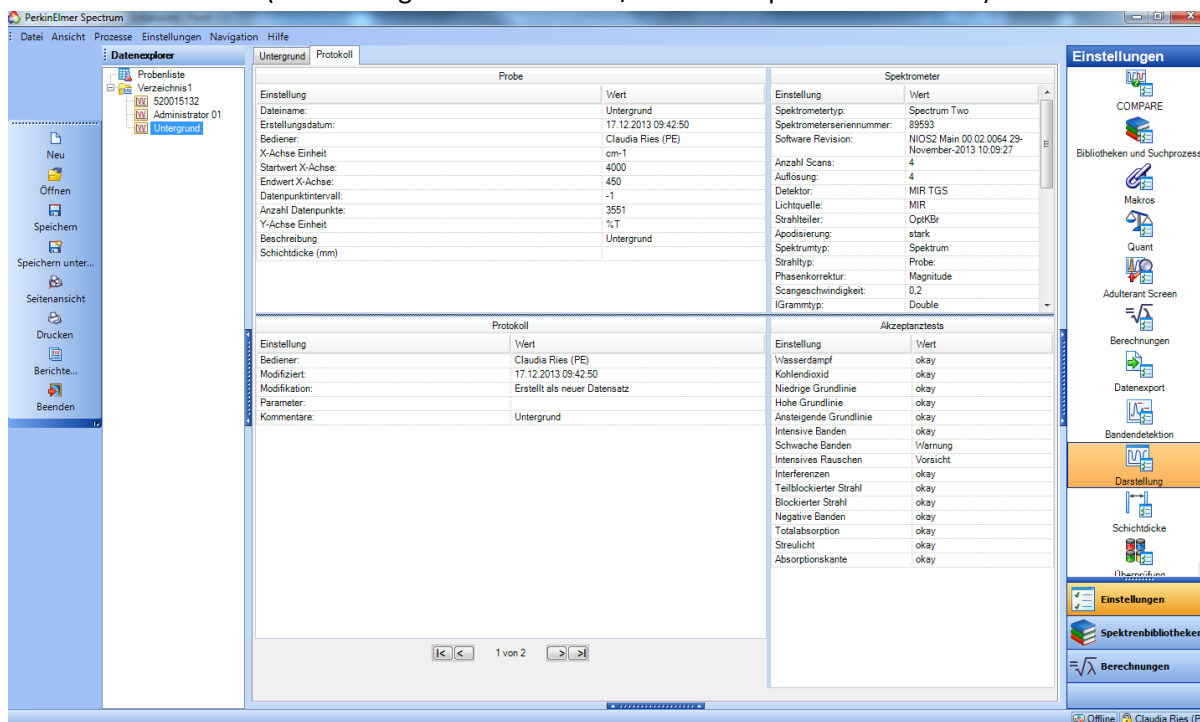
**Allgemeine Einstellungen**

Falls Sie diese Option wählen, wird nach jedem Start einer Messung die laufende Datenaufnahme angezeigt.

- Laufende Darstellung anzeigen

- Auto-Namen

- Protokoll (Alle wichtigen Informationen/Daten zur Spektrenaufnahme)



**Probenliste**

Probenname	Wert
Untergrund	Untergrund

**Spektrometer**

Einstellung	Wert
Spektrometertyp:	Spectrum Two
Spektrometerseriennummer:	88593
Software Revision:	NIOS2 Main 00.02.0064 28-November-2013 10:09:27
Anzahl Scans:	4
Auflösung:	4
Detektor:	MIR TGS
Lichtquelle:	MIR
Strahlteiler:	OptKBr
Apodisierung:	stark
Spektrumtyp:	Spektrum
Strahltyp:	Probe
Flaschenkorrektur:	Magnitude
Scangeschwindigkeit:	0.2
IGrammtyp:	Double

**Protokoll**

Einstellung	Wert
Bediener:	Claudia Ries (PE)
Modifiziert:	17.12.2013 09:42:50
Parameter:	Erstellt als neuer Datensatz
Kommentare:	Untergrund

**Akzeptanztests**

Einstellung	Wert
Wasserdampf	okay
Kohlendioxid	okay
Niedrige Grundlinie	okay
Hohe Grundlinie	okay
Ansteigende Grundlinie	okay
Intensive Banden	okay
Schwache Banden	Warnung
Intensives Rauschen	Vorsicht
Interferenzen	okay
Teilblockierter Strahl	okay
Blockierter Strahl	okay
Negative Banden	okay
Totalabsorption	okay
Streulicht	okay
Absorptionskante	okay

### Exkurs: Apodisation

In der IR Spektrometrie liegen endliche Interferogramme vor, die das Produkt eines unendlichen Interferometers mit einer Kastenfunktion sind. Innerhalb des endlichen Interferogrammintervalls sind die Ordinatenwerte der Kastenfunktion gleich 1, außerhalb dieses Intervalls gleich 0. Durch die Multiplikation beider Funktionen (Interferogramm und Kastenfunktion) kann es zu Störungen in den Spektren und Nebenmaxima kommen. Diese Nebenmaxima können durch geeignete Apodisationsfunktionen unterdrückt werden. Ein scharfer Übergang an den Interferogrammenden, die aufgrund der Kastenfunktion vorliegen, werden durch einen gleitenden Übergang ersetzt um die



Nebenmaxima zu reduzieren. Dies bringt jedoch einen Nachteil mit sich, da eine schlechtere spektrale Auflösung und breitere Banden daraus resultieren.

### 1.5. Spektrometertests

Einstellung – Spektrometerüberprüfung oder Bereitschaftstest

#### 1.5.2. Instrument Performance Verification (IPV) Test

Spektrometerüberprüfung (Überprüfung von Gerät und Zubehör)

Abzissenprüftest einrichten | Ordinatentest einstellen | Rauschen-Prüftest einrichten | Einstellungen des ASTM-Tests (E1421-99) Stufe 0 | IPV-Prüftests einstellen

Messtechnik

Interne APV

Probenraum

Testreport

Report sofort anzeigen

Report sofort drucken

IPV-Prüftests

Abszisse

Ordinate

Rauschen

ASTM-Test (E1421-99) Stufe 0

MIR-Pharmakopöe

Generische MIR-Test

Spektralen und Log-Dateien

Speicherort:

C:\pel\_data\Instrument Verification

#### 1.5.3. Abszissentest

Abzissenprüftest einrichten | Ordinatentest einstellen | Rauschen-Prüftest einrichten | Einstellungen des ASTM-Tests (E1421-99) Stufe 0 | IPV-Prüftests einstellen

Algorithmus

Interpolierte Bande

Schwerpunktsuche

	Einschließen	Nominal (cm-1)	Untere Grenzwerte (cm-1)	Obere Grenzwerte (cm-1)
1	<input checked="" type="checkbox"/>	3060,00	3058,00	3062,00
2	<input checked="" type="checkbox"/>	1601,00	1598,00	1603,00
3	<input checked="" type="checkbox"/>	1028,00	1025,00	1030,00

#### 1.5.4. Ordinatentest (Werte nicht übertragbar!)

Ordinatentest einstellen | Rauschen-Prüftest einrichten | Einstellungen des ASTM-Tests (E1421-99) Stufe 0 | IPV-Prüftests einstellen

	Test	Position (cm-1)	Nominalwert (%T)	Unterer Grenzwert (%T)	Oberer Grenzwert (%T)
1	<input checked="" type="checkbox"/>	3990,00	70,00	60,00	80,00
2	<input checked="" type="checkbox"/>	3030,00	35,00	25,00	45,00
3	<input checked="" type="checkbox"/>	2000,00	0,00	-5,00	5,00

#### 1.5.5. Rauschtest

Ordinatentest einstellen | Rauschen-Prüftest einrichten | Einstellungen des ASTM-Tests (E1421-99) Stufe 0 | IPV-Prüftests einstellen

Bereich

Von (cm-1)

2600

Bis (cm-1)

2500

Thresholds				
	Statistik	Einschließen	Nominal	Grenzwert
1	RMS (%T)	<input checked="" type="checkbox"/>	0,0000	0,5000
2	Peak-zu-Peak (%T)	<input checked="" type="checkbox"/>	0,0000	0,5000
3	Drift (%T/cm-1)	<input checked="" type="checkbox"/>	0,0000	0,5000

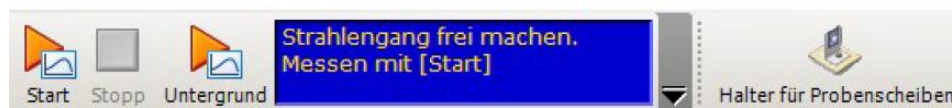
#### 1.5.6. Bereitschaftstest

Nachweis über leistungsgerechte Funktion des Messplatzes (der Anwendung entsprechend)

## 2. Spektrenaufnahme








Beispiel zur Anordnung von Funktionen zur Spektrenaufnahme:

Von (cm-1)	Bis (cm-1)	Anzahl Scans	Probename	Beschreibung	<input checked="" type="checkbox"/> Vorschau zeigen
4000	450	4 Scans	bg		



### 2.1. Funktionen zur Spektrendarstellung

Überblick über grundlegende Funktionen

	Anpassen Ermöglicht die Formatierung der Spektrengrafik im Ansichtsfenster
	Auto XY Zeigt den gesamten Spektral- und Messbereich aller dargestellten Spektren
	Auto X Zeigt den gesamten Spektralbereich der dargestellten Spektren
	Auto Y Zeigt optimierte Y-Achse (Ordinate) für die dargestellten Spektren
	Autoskalierung Y Skaliert die Ordinate, um alle Spektren relativ zu einander darzustellen. Diese „Autoskalierung“ wird durch erneutes Drücken des Buttons wieder aufgehoben.
	Optimieren Ordinatenoptimierung mit Kompensation der atmosph. Störbanden kombiniert mit ganzzahliger Abszissenoptimierung
	Zurück Veranlasst zu vorherigen Spektrendarstellung zurückzukehren

 Offset aufheben	Offset aufheben Alle Spektren werden mit gleicher Ordinatenkala dargestellt.
 Trennen	Trennen Umschalten zwischen überlappender und getrennter Darstellung mehrere Spektren.
 VCursor	VCursor Ein- und Ausblenden des vertikalen Cursor
 Cursor	Cursor Ein- und Ausblenden des horizontalen Cursor
 Beschriftungen	Beschriftungen Ein- und Ausblenden der Bandenbeschriftung <sup>7</sup>
 Text	Text Erlaubt das Einfügen oder Bearbeiten von Textelementen in einer Spektrendarstellung

Peaktabelle als tabellarische Darstellung des Spektrums: Einstellung – Bandendetektion, erfordert Schwellenwert, Art der Beschriftung kann gewählt werden

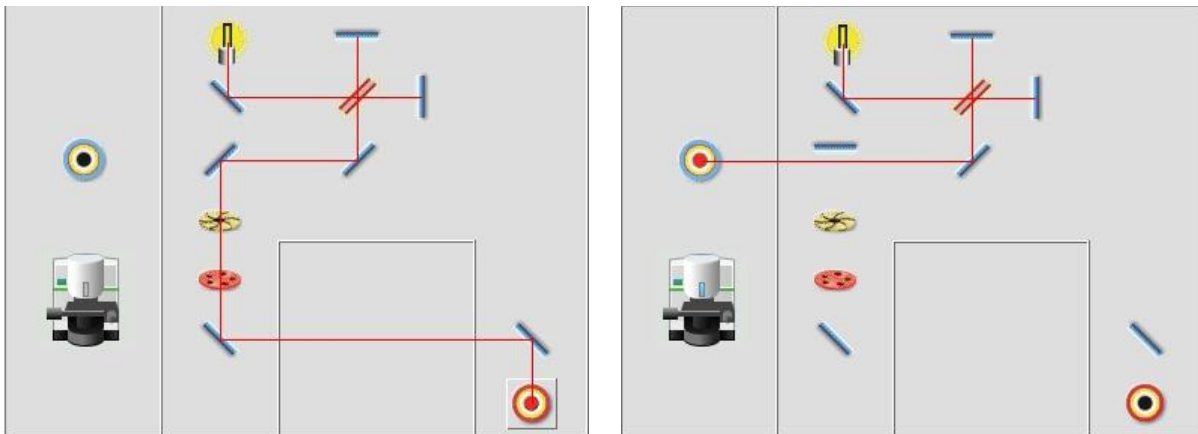
### 3. Mikroskopsteuerung

#### 3.1. Einrichten des Mikroskops

##### 3.1.1. Strahlengang

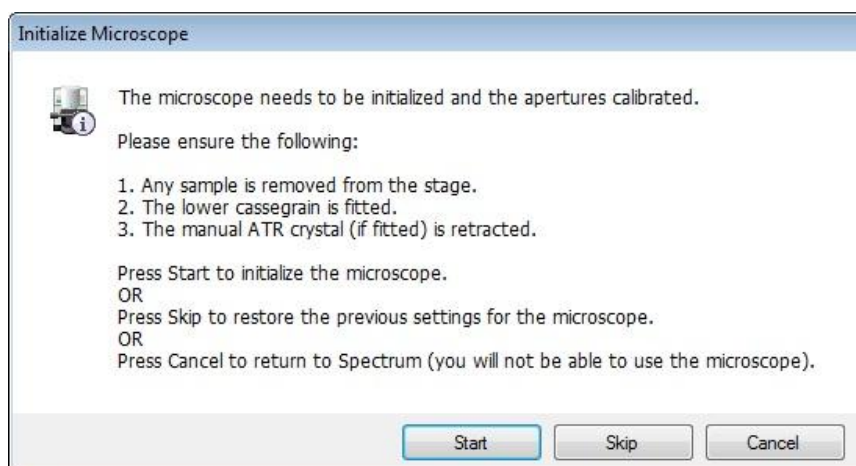
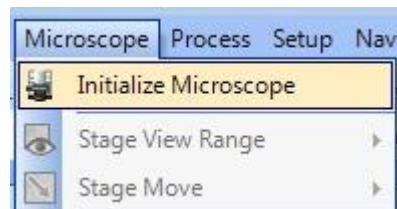
Um das Mikroskop nutzen zu können muss der Strahlengang auf den Detektor des Mikroskop gestellt werden

*Einstellungen – Spektrometer - Strahlengang*



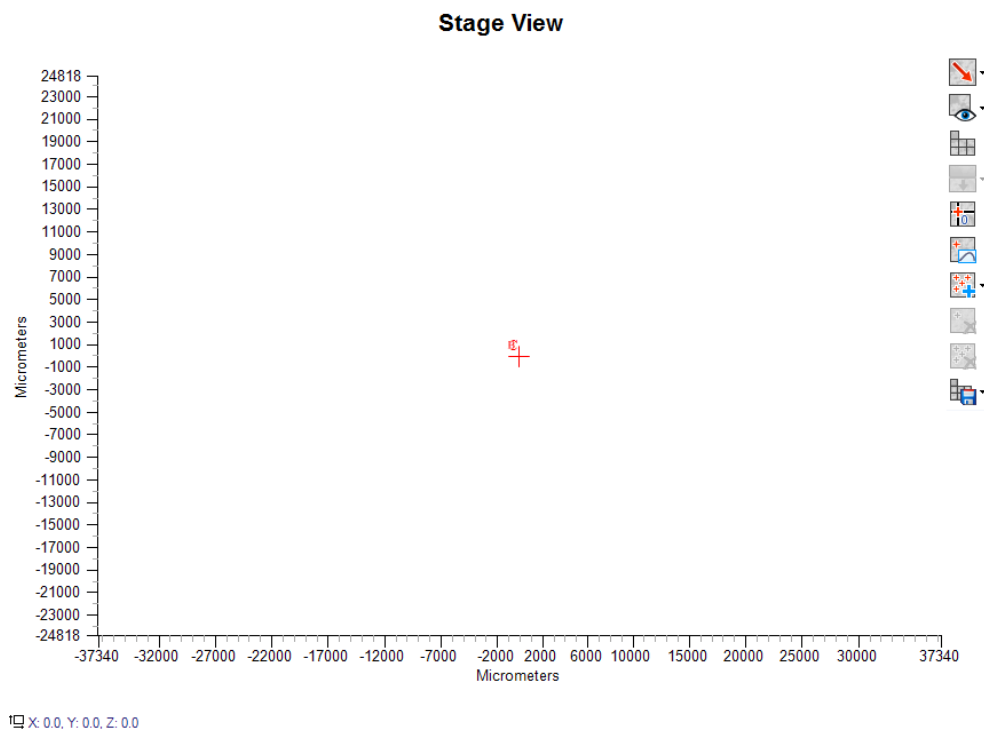
##### 3.1.2. Initialisierung

Ist der Strahlengang auf das Mikroskop gestellt, kann das Mikroskop initialisiert werden, entweder über das Mikroskop-Icon oder im Menu *Mikroskop*












## 3.2. Ansichten im Mikroskopmodus

### 3.2.3. Stage View

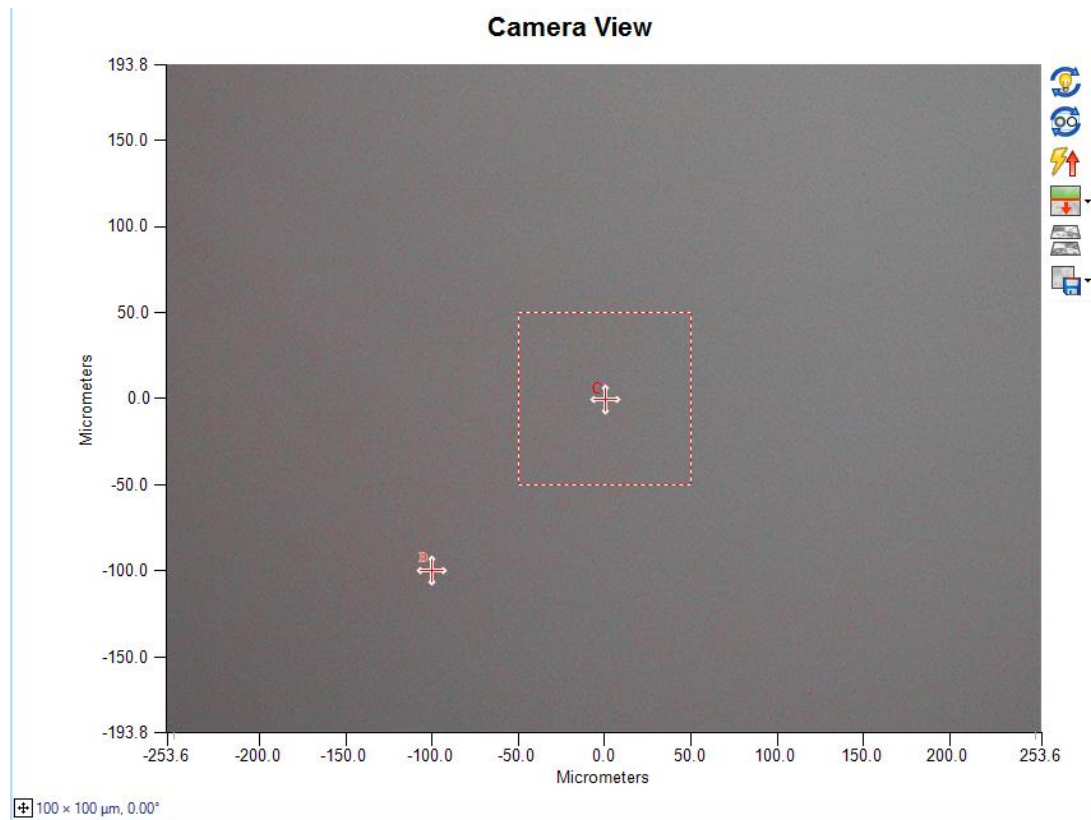


Visuelles Bild der Probe bzw. Probentisch

**Stage specific controls are listed in a panel on the right hand side of the stage view:**

-  Stage Move – allows the user to move the stage to various locations
-  View – set the size of the current stage view
-  Image Survey – collect a visible image survey
-  Analyse Image – Analyse the collected image survey for particles, layers etc.
-  Set Stage Origin – set the current position as the stage origin
-  Set Background Position – set the current position as the background position
-  Add – Add a point marker, a line or a map
-  Remove selected marker – deletes the selected marker
-  Remove all markers – deletes all markers, lines and maps
-  Save View – save the current view either with or without markers as a bmp or png file

### 3.2.4. Camera View



Live Display der Kamera

Camera specific controls are listed in a panel on the right hand side of the camera view:



Auto Illumination – Optimizes the illumination for the current view



Auto focus – Optimizes the visible focus for the current view



Maximise energy – Adjusts lower cassegrain height to maximise the IR energy



Analyse Image – Analyses the live camera view for particles, layers etc.



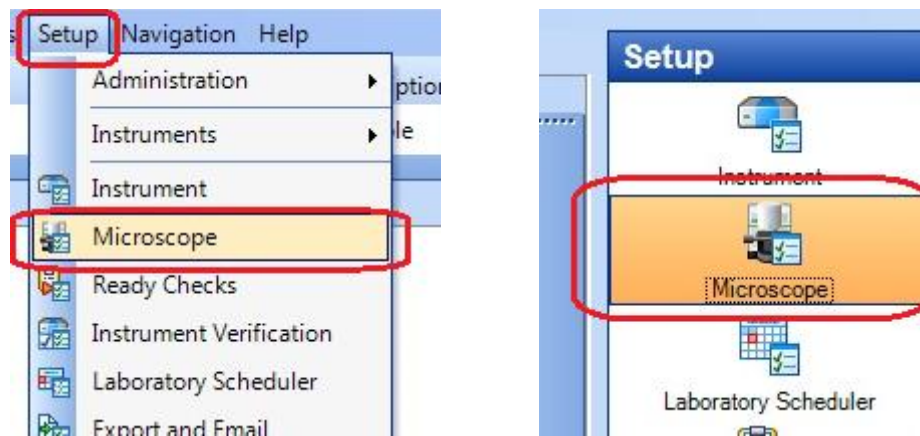
Collect Background Image – collect a image to subtract from images collected during an image survey to help eliminate artefacts in the image



Save Image – save a bmp or png of the current camera view

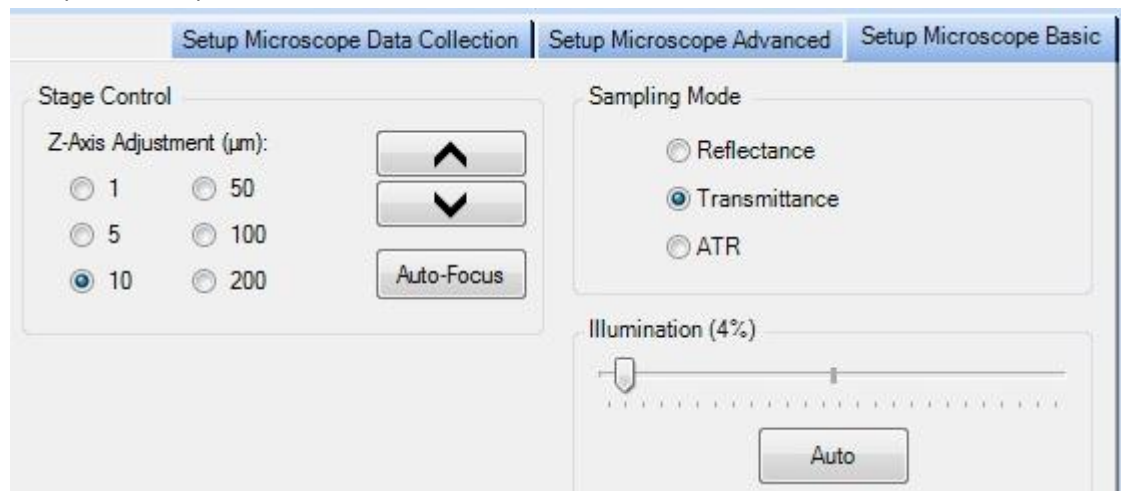
### 3.2.5. Mikroskop Einstellungen

Einstellungen können im Menu Einstellungen – Mikroskop vorgenommen werden



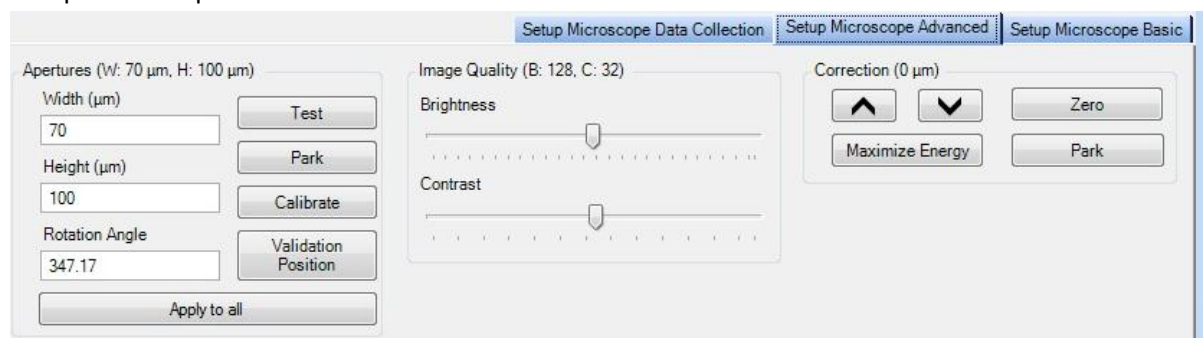
Drei Tabs stehen dann zur Verfügung

- Setup Microscope Basic



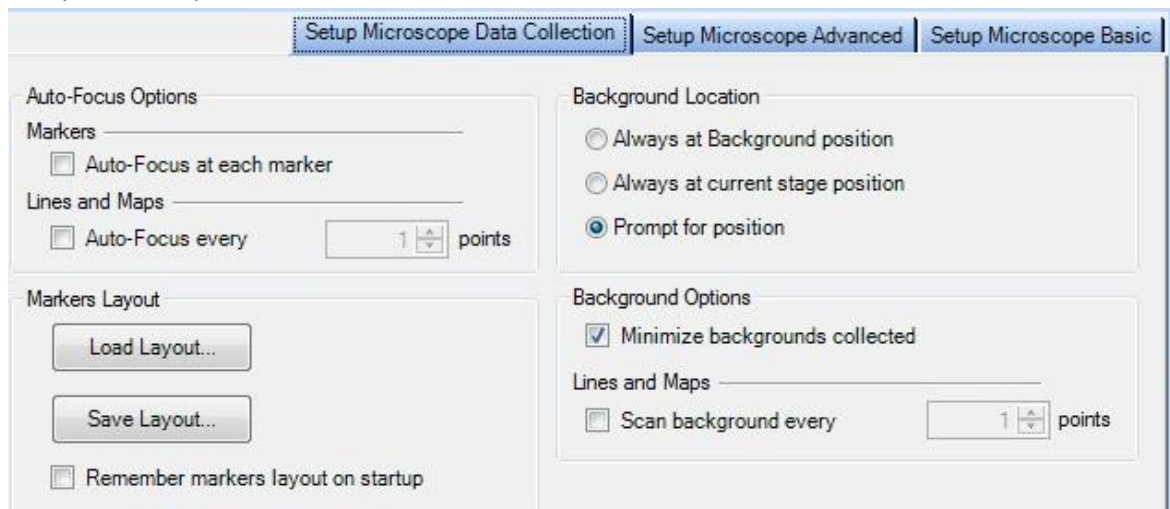
Einstellungen des Messmodus, Beleuchtung oder Position des Probenstischs

- Setup Microscope Advanced



Einstellung der Position des unteren Cassegrains sowie des Kamerabildes und die Blendeneinstellungen

- Setup Microscope Data Collection



#### Einstellung der Untergrundposition sowie Optionen zur Untergrundaufnahme

- Grundsätzlich wird für jede Blendeneinstellung ein separater Untergrund aufgenommen
- **Minimize Backgrounds Collected** – bei einer Differenz kleiner als 10% zwischen zwei Blendeneinstellungen werden beide Punkten mit nur einer Blendeneinstellung gemessen
- Lines and Maps – hier kann eine Anzahl von Messpunkten definiert werden, nach denen bei einem LineScan oder Mapaufnahme erneut ein Untergrund aufgenommen werden soll

#### Auto-Focus Optionen

Ausführen eines Autofocus während der Datenaufnahme

#### Markers Layout

Abspeichern eines Layout von Markern (Punktmarkierungen, Linien oder Maps) um mit dem gleichen Layout wiederholt messen zu können

Blendeneinstellungen und Messpositionen werden in einem \*.slf-File gespeichert

#### 3.2.6. Microscope Accessory toolbar

Funktionen zur Steuerung des Probenstisch (Adjust up & down) oder Auswahl des Messmodus



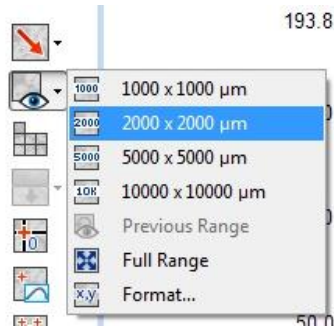
Bei Bedarf können beliebige weitere Funktionen hinzugefügt werden




### 3.3. Übersicht des visuellen Bildes

Übersicht über die Proben, wird im Stage View aufgenommen

- Auswahl der gewünschten Größe des Bildes oder den gewünschten Bereich mit der Maus markieren



Ausführen über Image survey 

### 3.4. Punktmarkierungen, Linescans und Maps

Können im Stage view oder Camera View hinzugefügt werden

Punktmarkierungen – Scan eines einzelnen Punktes

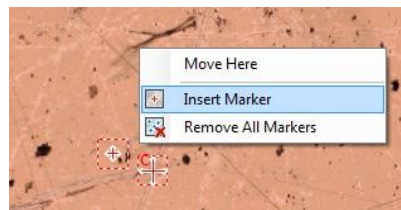
Linescan – Scan einer Serie von Markierungen in einer Linie

Maps – Scan einer Fläche

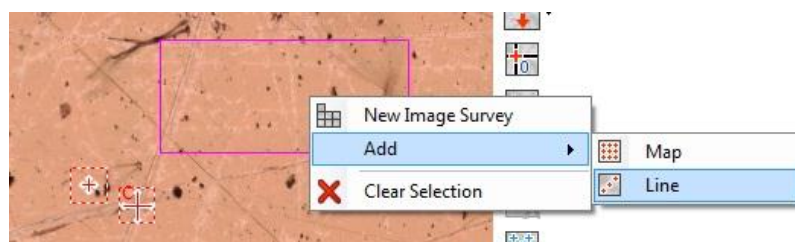
Alle drei Optionen können in einer Datenaufnahme kombiniert werden

Hinzufügen der Optionen

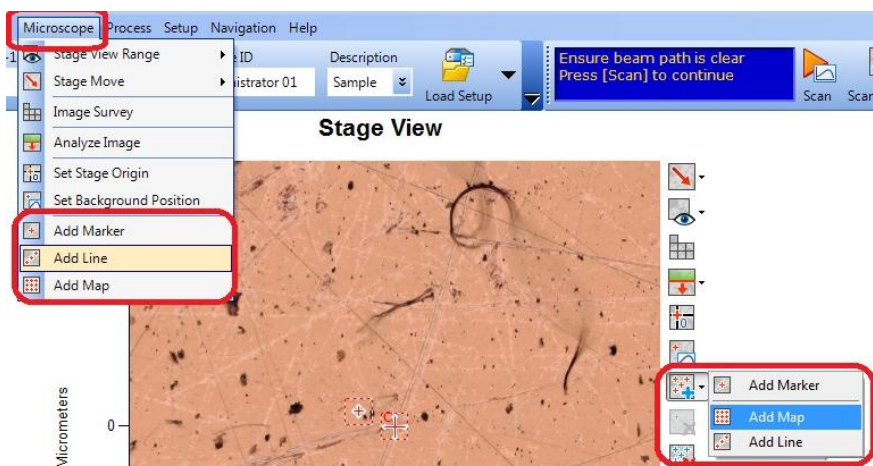
- Rechtsklick im Stage View



- Hinzufügen einer Box mit der Maus

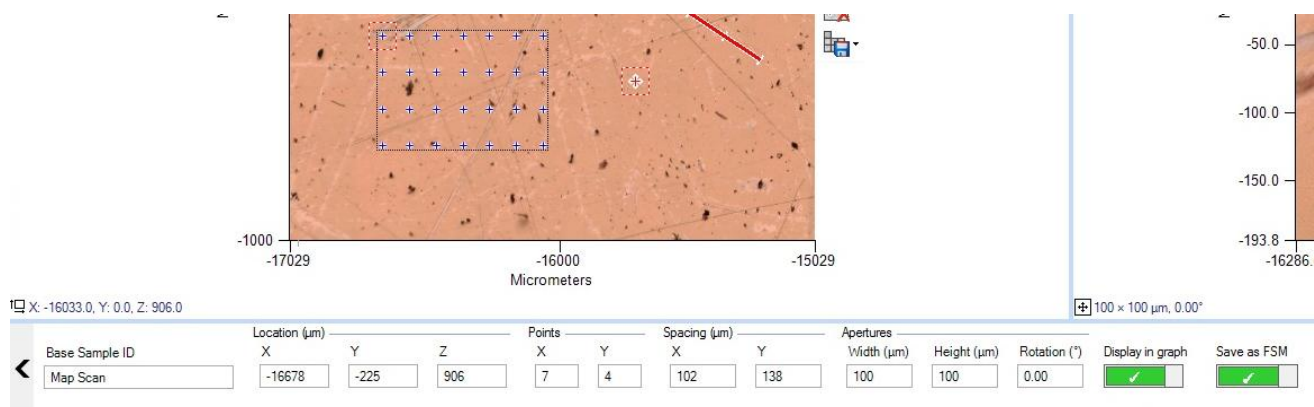


- Hinzufügen einer Markierung im Zentrum des Bildes



### 3.4.7. Bearbeiten der Eigenschaften einer Markierung

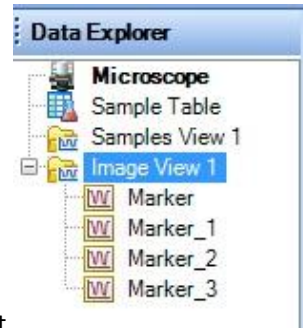
Auswahl der Markierung (die Markierung erscheint blau), Einstellungen erscheinen unter der Stage View



- Punktmarkierungen – Probenname; x, y, z Position Blendeneinstellung
- Linien – Probenname; x, y, z Position Blendeneinstellung; Anzahl der Punkte sowie Abstand der Messpunkte, Option zum Abspeichern eines LSC Files (zur Auswertung on SpectrumImage Viewer)
- Maps – Probenname; x, y, z Position Blendeneinstellung, Anzahl der Messpunkte in X und Y Richtung sowie Abstand der Messpunkte, Option zum Abspeichern eines FSM Files (zur Auswertung on SpectrumImage Viewer)

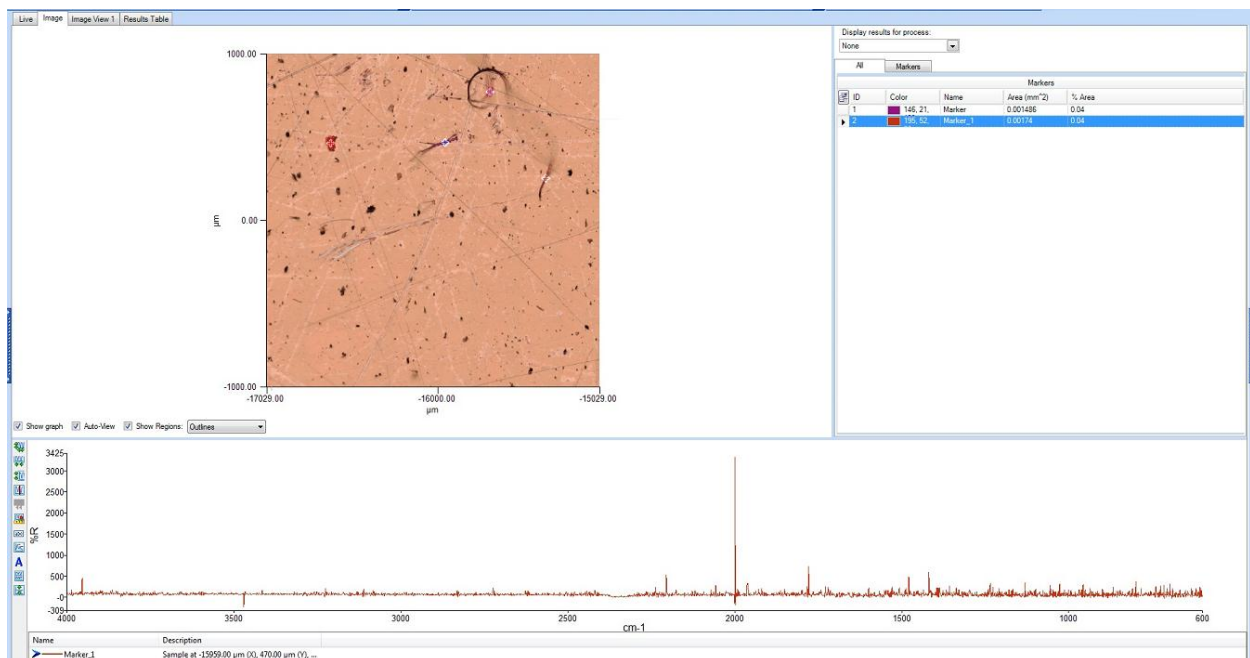
### 3.4.8. Datenaufnahme von Markierungen

Start der Datenaufnahme über Scan Marker (alle benötigten Untergrundaufnahmen und Spektrenaufnahmen werden automatisch durchgeführt)



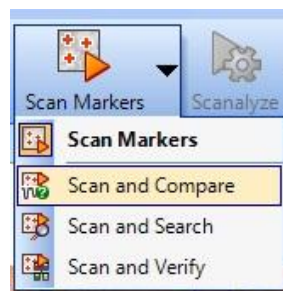
Spektren werden in einem neuen ImageView dargestellt

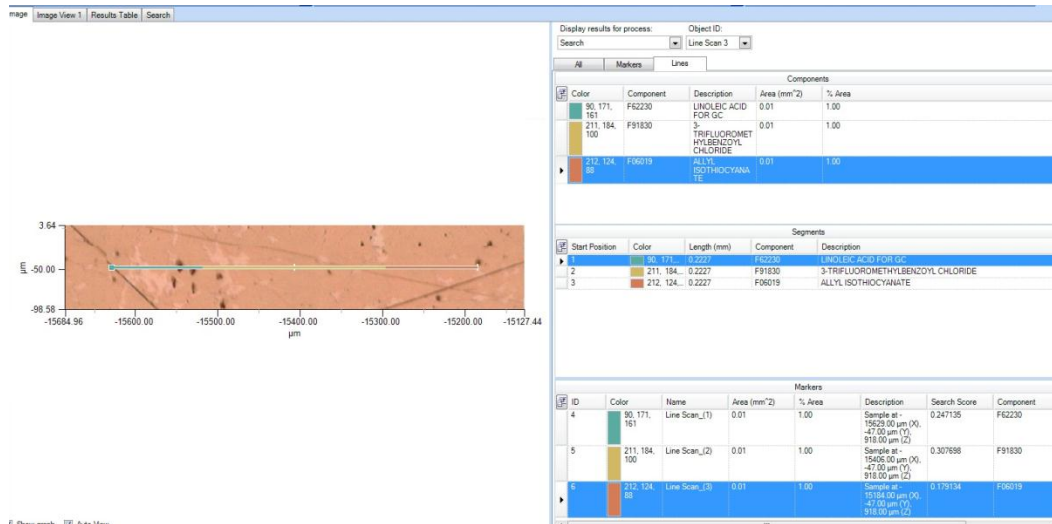
#### 3.4.8.1. Übersicht über die Messergebnisse



### 3.4.9. Scanlyze/Scan Marker

Scan der Markierungen sowie anschließende Datenauswertung über Compare, Search oder Adulterant Screen (Verify; nur mit entsprechender Lizenz möglich)



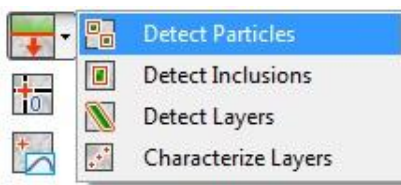


### 3.5. Image Analysis

Option zur Einrichtung von Messpunkten über das Kamerabild oder die Probenübersicht (Stage View)

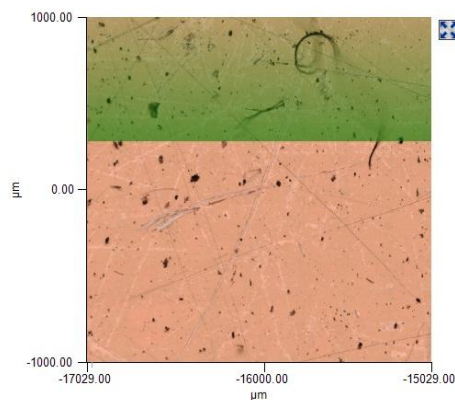
- Detect Particles
- Detect Inclusions
- Detect Layers (Analyse von Mehrschichtsystemen, mit jeweils größtmöglicher Blendeneinstellung für bestes S/N)
- Characterize layers (LineScan über alle Schichten eines Mehrschichtsystems)

Auswahl über Analyse Image:



Ansicht während des Analyseprozess

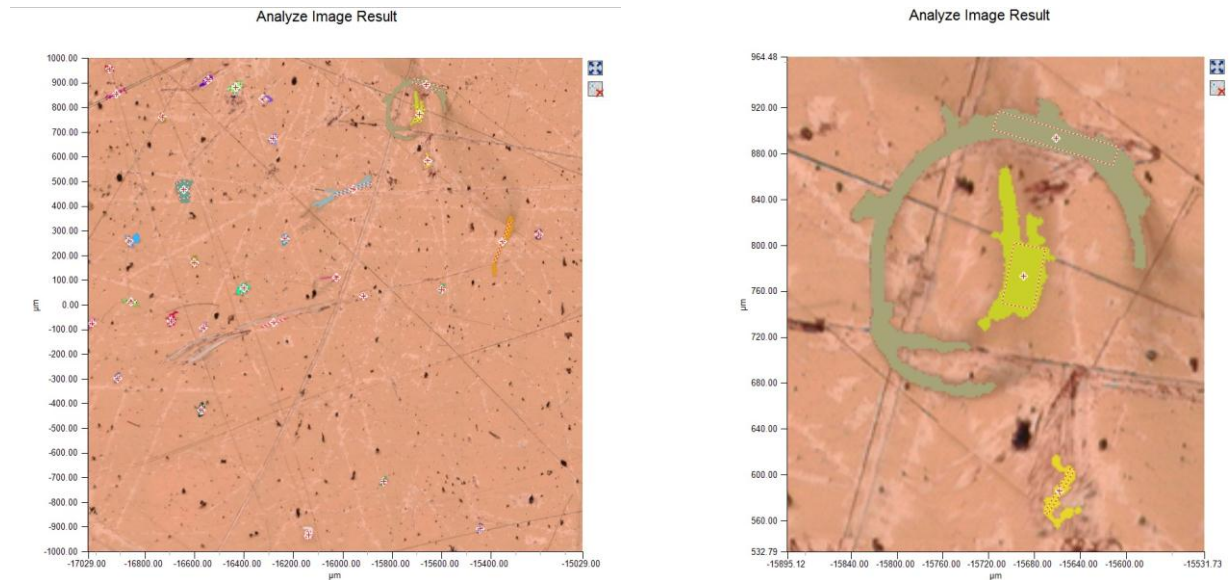
Analyze Image Source



Ansicht nach dem Analyseprozess

Ergebnis wird im rechten Bild dargestellt (hier am Beispiel einer Partikelanalyse)

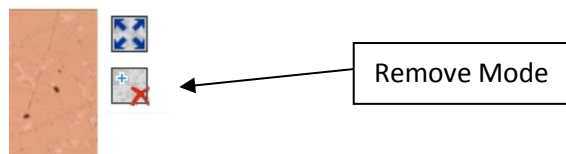
Für jeden Partikel wird die Blende größtmöglich angepasst um das S/N zu maximieren



*Einstellungen für die Partikelanalyse:*

<b>Source Image</b> <input checked="" type="radio"/> Survey Image <input type="radio"/> Camera View	<b>Process Type</b> <input checked="" type="radio"/> Detect Particles <input type="radio"/> Detect Inclusions <input type="radio"/> Detect Layers <input type="radio"/> Characterize Layers	<b>Result Image</b> <input type="checkbox"/> Reverse Contrast <input checked="" type="checkbox"/> Show Apertures <input checked="" type="radio"/> Overlay <input type="radio"/> Outline Opacity (100%)	<b>Particles</b> <input checked="" type="radio"/> Largest Particles 100 <input type="radio"/> Filter Particle Size 202.00 ————— 3.137.00 202                      1670                      3137	<b>Advanced Particle Settings</b> <input type="checkbox"/> Use Advanced Settings Minimum Area (200) [Slider] Minimum Contrast (0.18) [Slider] Threshold (0.4) [Slider] Split Factor (0) [Slider]
---	---	--	--	---

*Entfernen von Markierungen über Remove*

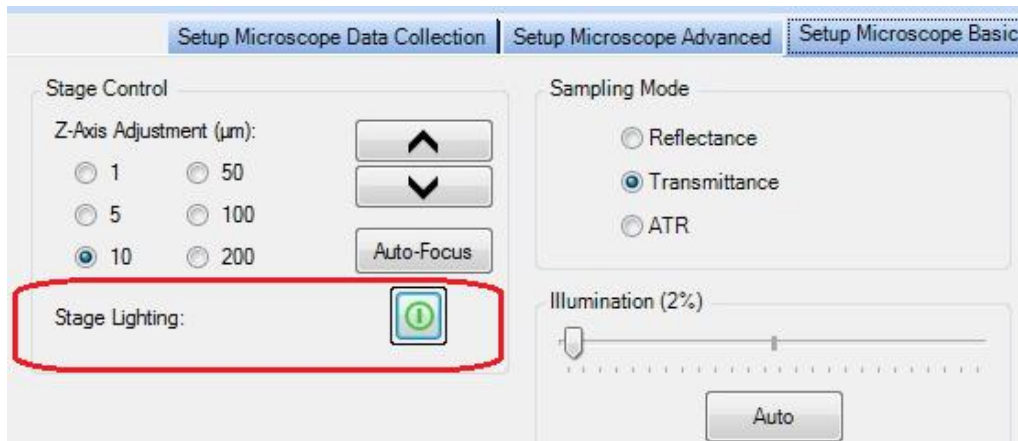


Abschluss der Einstellungen über *OK*, Start der Messungen über *Scan Marker*

### 3.6. Funktionen im Spotlight 200i

#### 3.6.10. Probentischbeleuchtung

Zusätzliche Funktion wenn die ATR Elektronik vorhanden ist  
Kontrolle der Beleuchtungs LED für den Probentisch:

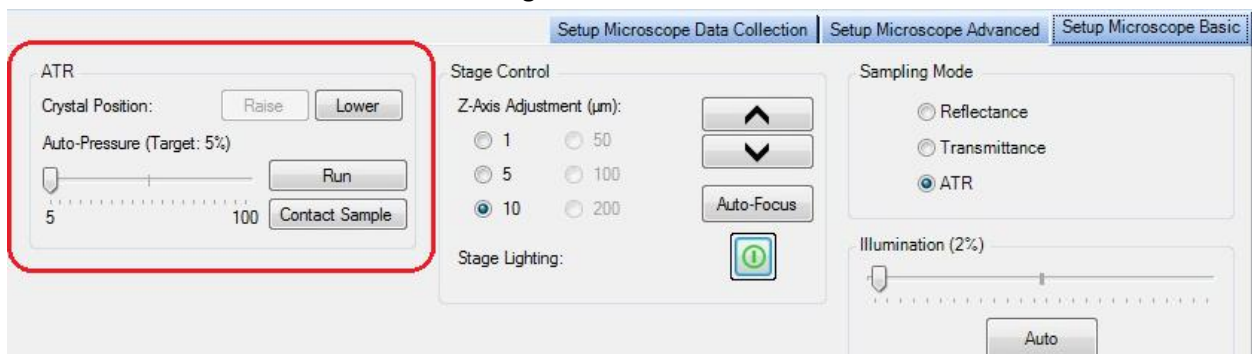


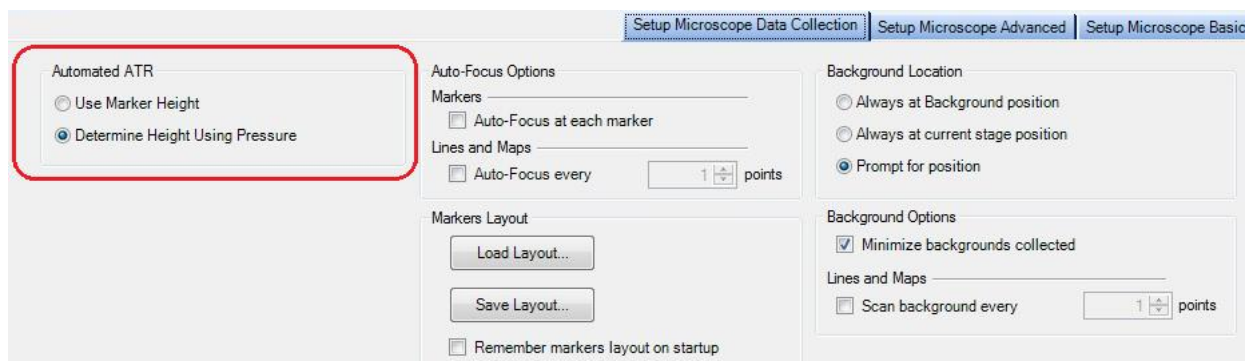
#### 3.6.11. Automated ATR/Weighbridge Control

ATR spezifische Funktionen im Modus ATR:

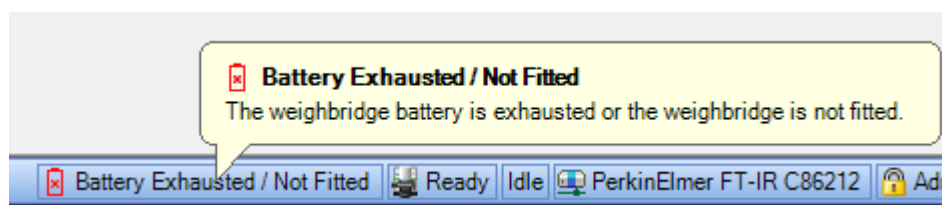
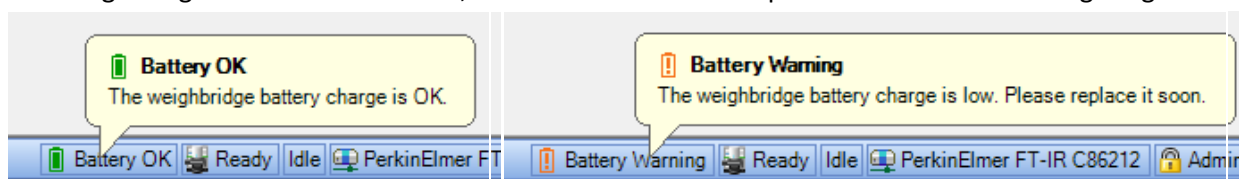


ATR Funktionen sind im Tab Basiseinstellungen zu finden:





Die Weighbridge ist batteriebetrieben, der Status wird auf der Spectrum 10 Oberfläche angezeigt



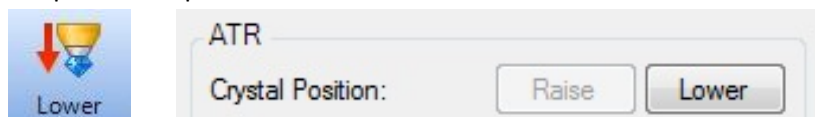
### 3.6.12. Software behaviour in ATR Mode

When using the ATR there are certain restrictions built into the software and hardware to help minimize the risk of damaging the ATR crystal.

When the crystal is in the Raised (upper) position, the stage can be moved in all directions (x, y and z); when the crystal is in the Lowered position, a hardware cut out is tripped which disables the X and Y joystick control of the stage. The stage will still move up and down.

### 3.6.13. Crystal Control

The ATR crystal can be controlled manually using the toolbar button or by using the Raise and Lower buttons on the Setup Microscope Basic tab:



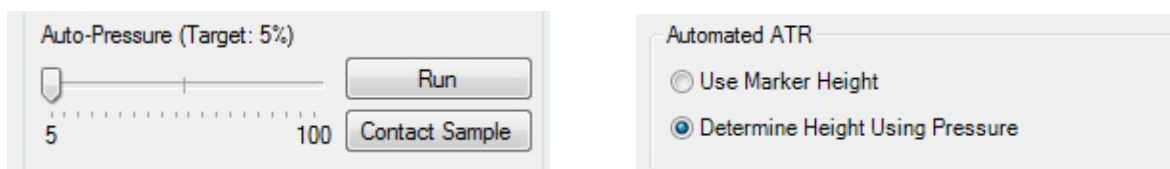
When the Lower button is pressed, the stage will automatically lower slightly to avoid a collision with the crystal.

### 3.6.14. ATR Auto-Pressure - Run

When the ATR is used with the Weighbridge stage insert, advanced operations are possible.

On the Setup Microscope Basic tab, the user can define a % pressure that should be applied to the sample during ATR scanning (between 5 and 100%)

NOTE: in order for the Auto-pressure to be applied during a Scan Markers process, the **Determine Height Using Pressure** option must be selected on the Setup Microscope Data Collection tab.



The pressure is varied by adjusting the slider. The user can apply the defined pressure to the sample at any time by clicking the **Run** button (useful for single measurements).

Upon clicking Run, the sequence of operations is:

1. Software performs some sanity checks (check ATR motor is fitted, check Weighbridge communications, switch off ATR LED)
2. If lowered, raise the ATR crystal
3. Perform an Auto-Focus
4. Tare (zero) the weighbridge
5. Lower the ATR crystal
6. Move the stage to 50 $\mu$ m below the auto-focus height
7. Locate the contact point with the sample. Steps up in increments of 20 $\mu$ m until the weighbridge shows a change in weight from the tare, then steps back 20 $\mu$ m, re-collects the tare then increments in 1  $\mu$ m until contact is re-established.
8. Uses the Weight/Calibration stored in the weighbridge to predict how many steps we need to raise to achieve the user's desired target pressure.
9. Moves the stage, re-reads the weighbridge and loops between steps 8 & 9 until desired pressure is achieved.
10. Upon completion, leaves the crystal in contact with the sample.

During the above process, the pressure on the weighbridge will be displayed in the software at the bottom of the stage view section. While the crystal is not touching the sample the display text is orange:

↓ Sample Force: 0%, 0 kg/mm<sup>2</sup>, 0 kpsi

Once the ATR comes into contact with the sample, the weighbridge will measure a pressure and the text will turn green and display the current pressure reading (stays green between 1 and 100%):

↓ Sample Force: 25%, 6.4 kg/mm<sup>2</sup>, 9.1 kpsi



NOTE: the pressure reading is only updated when a stage move is performed. Once the stage stops moving, the last pressure reading taken will remain displayed on screen, but it is no longer a live reading. This is to conserve the battery life of the weighbridge.

### 3.6.15. ATR Auto-Pressure – Contact Sample

This button will drop the stage, lower the ATR crystal and then step up until contact with the sample is established. This is essentially identical to the ATR Auto-Pressure command above, but will not perform an Auto-Focus and will stop as soon as contact is established.

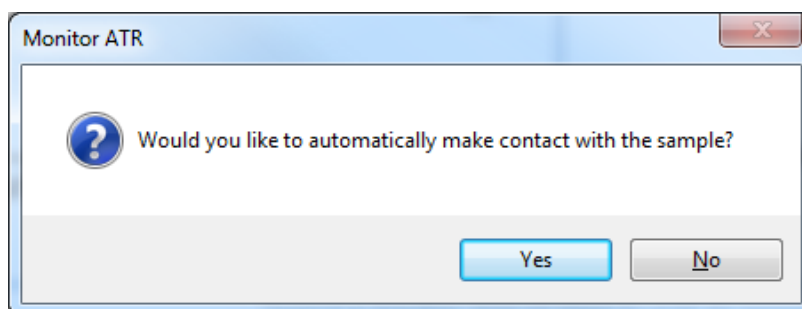
This process completes with the crystal lowered and just in contact with the sample.

Primarily this is intended for use in Monitor mode

**NOTE: The auto-pressure processes are only available once the weighbridge has been calibrated in the Spotlight configuration tool (performed by service engineers at installation of the system).**

### 3.6.16. IR Monitor Using the ATR/Weighbridge

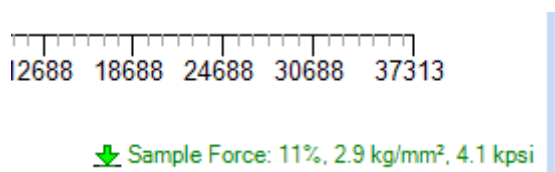
If *Sampling Mode* is set to ATR and you have an Automated ATR fitted then upon clicking Monitor, a prompt will be displayed:



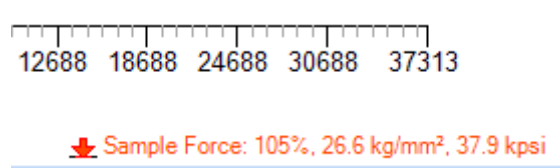
If *Yes* is selected, the stage will drop, the ATR crystal will be lowered and the **Contact Sample** routine described above will be run.

If *No* is selected, the stage will drop and the ATR crystal will be lowered.

In either case, while monitoring the user is able to adjust the stage Z-axis using the *Adjust Up* and *Adjust Down* buttons in the increments specified in the Stage Control setup. The weighbridge status bar will be updated after each move with the new pressure on the sample:



It is possible to over-pressure the sample in this mode. In this case the status bar will be shown in red:



At some point the Sample Force will appear to stop climbing. This means you are no longer compressing the weighbridge but instead pushing the crystal up against its spring.

IR monitor mode can be used by the user to identify either the optimum pressure to set for the Auto-Pressure routine for their particular sample or to identify the optimum Z-axis height to set their markers to when setting up a Scan Markers experiment.

Upon halting Monitor, the ATR crystal will be raised to return the UI to live camera view.

### 3.6.17. ATR Point Mode Scanning

When a background scan is collected the stage will always lower a safe distance away from the crystal then the crystal lowered. The *Background Location* on the Setup Microscope Data Collection tab will be ignored, the X/Y coordinate will not change.

Upon completing the background scan, the crystal will be raised and the stage will be returned to the original Z-axis height.

When pressing the *Scan* button the IR data collection will take place at the current stage position. If the crystal is currently raised when Scan was pressed then the stage should lower, the crystal lowered then the Z-axis height restored.

Upon completing the sample scan, the crystal will be raised.

## 4. Spektrenbearbeitung

### Grundlagen:

Die primäre Messgröße in der IR Spektrometrie ist die optische Durchlässigkeit, auch als Transmission bezeichnet. Dabei handelt es sich um einen Vergleich des Strahlungsflusses der in die Probe eintritt und aus der Probe austritt. Aus der Transmission kann die Extinktion abgeleitet werden, welche sich linear zu den Probeneigenschaften verhält. Daher müssen Extinktionsspektren für quantitative Analysen und für Spektrenberechnungen genutzt werden.

### Zusammenhang von Transmission, Absorption und Extinktion

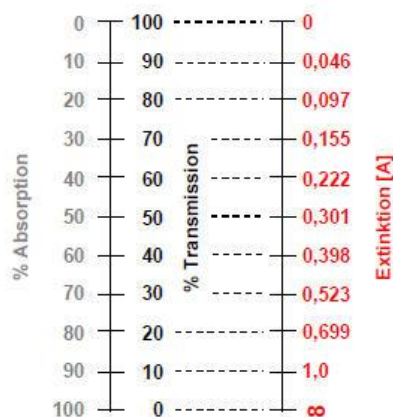
- Transmission T: „Durchlässigkeit“, Maß für die „durchgelassene“ Intensität beim durchtreten eines Mediums; ( $\Phi_a$  = austretender Strahlungsfluss,  $\Phi_e$  = eintretender Strahlungsfluss)
- Absorption: Pendant zur Transmission, Maß für „abgeschwächte“ Intensität beim durchtreten eines Mediums
- Extinktion: Maß für die Abschwächung von Strahlung beim durchtreten eines Mediums

Gleichung 1  $T = \tau = \frac{\Phi_a}{\Phi_e}$

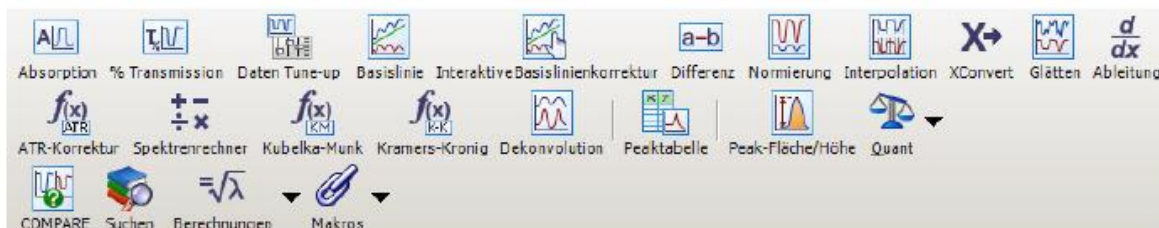
Gleichung 2  $\alpha = \frac{\Phi_e - \Phi_a}{\Phi_e}$

Gleichung 3  $A = -\ln T = \ln \frac{\Phi_e}{\Phi_a}$

Während sich absorbierende Komponenten (spezifische und nicht-spezifische (Untergrund) im Messmodus Extinktion additiv verhalten, verhalten diese sich im Messmodus Transmission multiplikativ.



## 4.1. Funktionen zur Spektrenbearbeitung



### 4.1.1. Funktionen für bessere Spektrenvergleichbarkeit

 Basislinie	Basislinie Automatische Basislinienkorrektur
 Interaktive Basislinienkorrektur	Interaktive Basislinienkorrektur Basislinienkorrektur nach den Vorgaben des Anwenders
 Normierung	Normierung ...erlaubt zur besseren Vergleichbarkeit der Spektren auf der Basis einer Bezugsbande den gleichen Ordinatenwert festzulegen
 Glätten	Glätten Rechnerische Verbesserung des S/N-Verhältnisses.

 ATR-Korrektur	ATR-Korrektur ...wandelt ATR-Spektren in vergleichbare Transmissionsspektren
 XConvert	XConvert ...erlaubt die Abszisse der Spektren umzuwandeln z.B. von Wellenzahl zu Wellenlänge.
 Interpolation	Interpolation ...erlaubt zur Anpassung der Spektrendateien <ul style="list-style-type: none"> <li><b>a</b> den Datenabstand zu ändern bzw. anzupassen</li> <li><b>b</b> den Spektralbereich zu ändern bzw. anzupassen</li> </ul>

#### 4.1.2. Funktionen für ergebnisorientierte Messwerte

 Absorption	Absorption Umwandlung in ein Extinktionsspektrum ( <u>A</u> bsorbance)
 % Transmission	% Transmission Umwandlung in ein Durchlichtspektrum
 ATR-Korrektur	ATR-Korrektur ...wandelt ATR-Spektren in vergleichbare Transmissionsspektren
 Kubelka-Munk	Kubelka-Munk Korrekturfunktion für Spektren aus diffuser Reflexion und Umwandlung zu vergleichbaren Extinktionsspektren
 Kramers-Kronig	Kramers-Kronig Ordinatenumwandlung von Spektren aus gerichteter Reflexion zu Extinktionsspektren

##### Exkurs: Kubelka Munk




Korrekturfunktion für DRIFT Spektren um Unterschiede zu Transmissionsspektren zu kompensieren, stellt linearen Zusammenhang zwischen Absorption und diffuser Reflexion her

$$f(R) = \frac{(1-R)^2}{2R} = \frac{k}{s} \quad (R - \text{absolute Reflexion, } k - \text{molarer Absorptionskoeffizient, } s - \text{Streukoeffizient),}$$

##### Exkurs: Kramers-Kronig

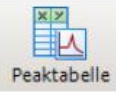
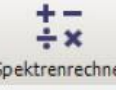

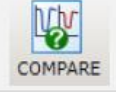

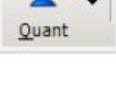
Korrekturfunktion für Spektren aus gerichteter Reflexion zu Transmissionsspektren, Trennung spektraler Information nach Brechungs- und Absorptionsindex um interpretierbare Absorptionsspektren zu erhalten

#### 4.1.3. Kontrastverstärkende Funktionen

 Differenz	Differenz Bildet die Differenz zwischen zwei Spektren.
 Ableitung	Ableitung Rechnerische Umwandlung der Spektren in Ableitungsspektren zur <b>a</b> Kontrastverstärkung z.B. Signal- bzw. Peaktrennung <b>b</b> Auswertung unaufgelöster Peaks
 Dekonvolution	Dekonvolution Rechnerische Verbesserung der Auflösung zur Darstellung unaufgelöster Peaks bzw. zu deren Intensitätsbestimmung

Differenzspektrum = Mischungsspektrum – Lösungsmittelspektrum

#### 4.1.4. Funktionen zur Vorbereitung Spektrenauswertung

 Peaktable	Peaktabelle Zur automatischen Generierung von Peaktabellen aus dem/den vorgelegten Spektrum/en
 Spektrenrechner	Spektrenrechner ...erlaubt mit Spektren zu rechnen, z.B. zur Bildung eines Mittelwert-Spektrums
 Peak-Fläche/Höhe	Peak-Fläche/Höhe Berechnung der Fläche bzw. Höhe eines Peaks nach vorgegebenen Randbedingungen
 COMPARE	Compare Rechnerischer Spektrenvergleich zur Identitätsprüfung
 Suchen	Suchen Starten einer Bibliotheksuche
 Quant	Quant Methodenaufzur zur quantitativen IR-Analytik

## 5. Spektrenauswertung

### 5.1. Qualitative Stoffanalyse

#### 5.1.1. COMPARE – Rechnerischer Spektrenvergleich

Maß der Spektrenübereinstimmung: Korrelationskoeffizient K, Differenzfaktor D halbquantitatives Maß für Übereinstimmung Konzentration bzw. Schichtdicke

*Einstellung – COMPARE*

Gewichtung nach: Auflösung, Intensität, Rauschen, H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>O ausblenden nur wenn 1600 cm<sup>-1</sup> (Deformationsschwingung) irrelevant

Spektrenüberlappungsbereich (wo passen beide Spektren zusammen?) oder nur ausgewählter Bereich

COMPARE Standards: Vergleichsspektren für Probespektren

#### 5.1.2. Suchen

Probenspektrum mit Spektrensammlung auf Identität prüfen, Bibliotheksdateien „.dlb“ oder Bibliotheksordner; *Suchen – Bibliothekssuche*



Benutzerdefinierte Bibliothek (Bibliotheksordner)



Schreibgeschützte kommerzielle Spektrenbibliothek (z.B. vom Typ „DLB“)

## Einstellung – Bibliotheken und Suchprozesse

Spektrenbibliothek – Hinzufügen, Option Einschließen um Bibliothek zu durchsuchen

Einstellung SEARCH-Parameter: Überlappend oder festgelegte Bereiche, Leerbereich einfügen für CO<sub>2</sub> ausblenden

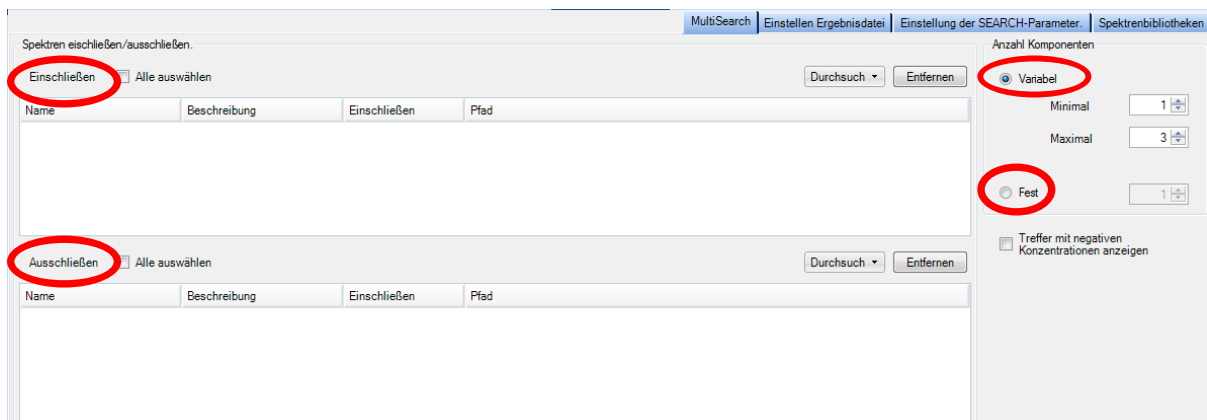
Gemischtspektrensuche: Differenzbildung mit anschließender Bibliothekssuche

### 5.1.3. MultiSearch

Spektrum eines Multikomponentengemisch auf Identität prüfen, kann bis zu 10 Komponenten nebeneinander detektieren

Hinterlegte Spektrenbibliotheken (wie für normale Suche) werden verwendet

Spektren können für die Suche eingeschlossen (auf jeden Fall enthalten) oder ausgeschlossen (in keinem Fall vorhanden) werden



The screenshot shows the 'MultiSearch' configuration window. It has several tabs: 'MultiSearch', 'Einstellen Ergebnisdatei', 'Einstellung der SEARCH-Parameter', and 'Spektrenbibliotheken'. The 'Spektrenbibliotheken' tab is active. It contains two sections for managing libraries: 'Spektren einschließen/ausschließen.' and 'Spektren ausschließen/ausschließen.'. Each section has a table with columns for 'Name', 'Beschreibung', 'Einschließen', and 'Pfad'. In the 'Spektren einschließen/ausschließen.' section, the 'Einschließen' radio button is selected and circled in red. In the 'Spektren ausschließen/ausschließen.' section, the 'Ausschließen' radio button is selected and circled in red. To the right, there are settings for 'Anzahl Komponenten' (Number of Components), with 'Variabel' (Variable) selected and circled in red, and 'Minimal' set to 1 and 'Maximal' set to 3. The 'Fest' (Fixed) option is also circled in red. There are also buttons for 'Durchsuch' (Search) and 'Entfernen' (Remove) for each section.

Anzahl der Komponenten kann variabel eingestellt werden oder als feste Anzahl festgelegt werden

## 5.2. Quantitative Bestimmung

Chemometrie – Multivariate Datenanalyse

Chemometrie: Verwendung mathematische und statistischer Methoden zur Auswahl optimaler Messverfahren und Gewinnung maximaler chemischer Information bei der Analyse chemischer Daten

Multivariate Datenanalyse: gleichzeitige Analyse verschiedener statistischer Zufallsvariablen, Analyse eines funktionalen Zusammenhangs zwischen X- und Y-Variablen

### **Kalibrierung:**

- *Multiple lineare Regression (MLP)*, Analyse funktionalen Zusammenhangs einer Zielgröße Y und mehreren unabhängigen X-Variablen
- *Hauptkomponentenregression (PCR)*, verbindet Hauptkomponentenanalyse (PCA) mit MLP (Berechnung des funktionalen Zusammenhanges einer Zielgröße Y und den Scores aus PCA mithilfe MLP)
- *Partial Least Square Regression (PLS)*, PCA mit X und Y Daten (X-PCA enthält Y-Information, Y-PCA wird von X-Daten beeinflusst)

### **Validierung:**

- *Kreuzvalidierung*
- *Einfluss-Korrektur*
- *Separater Datensatz*

### 5.2.4. Bandenauswertung (Peak-Fläche/-Höhe)

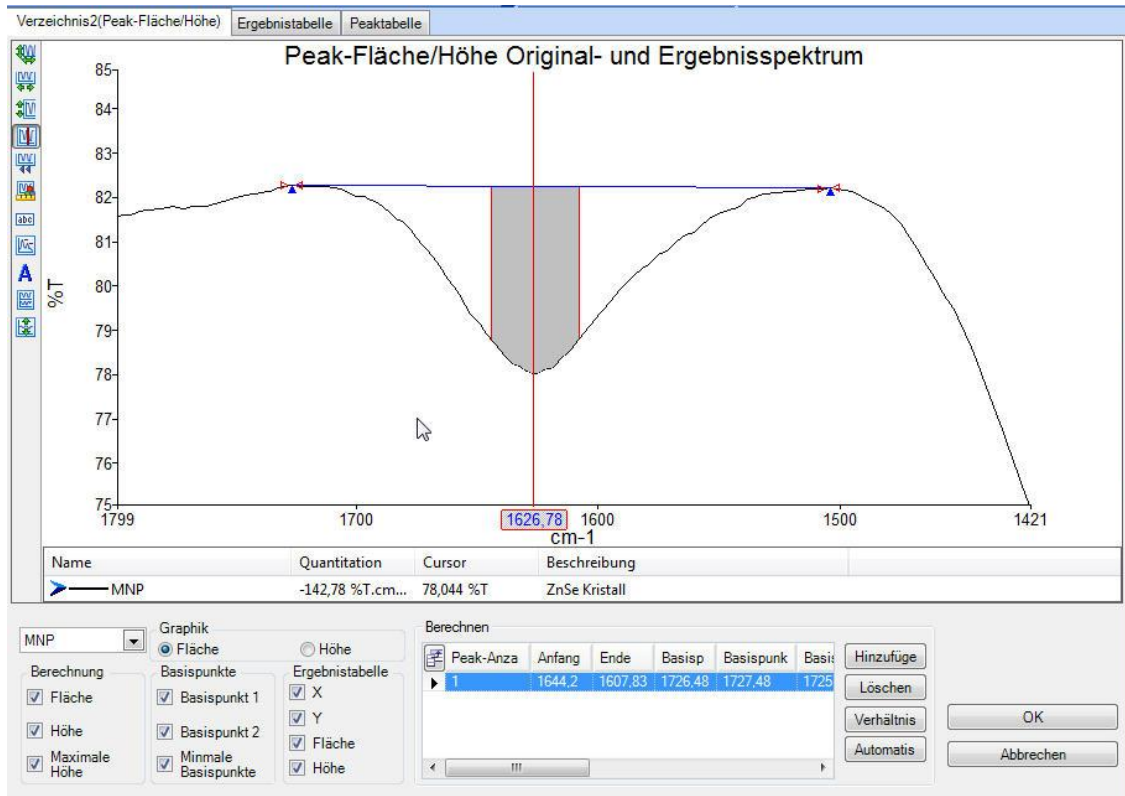
Auswertung von Banden nach gegebenen Parametern (*Prozesse – Peak-Fläche/-Höhe*)

Einstellung von

- Berechnung (Fläche, Höhe, max Höhe),
- Basiskorrektur (1 oder 2 Basispunkte) und
- Ergebnistabelle

( $\Delta$  als Grenze für Basislinienkorrektur, I als Grenze für Intervall für maximale Höhe)





Weitere Peaks über hinzufügen

Verhältnis: Verhältnisbildung zweier Peaks (Rangfolge beachten (a/b oder b/a))

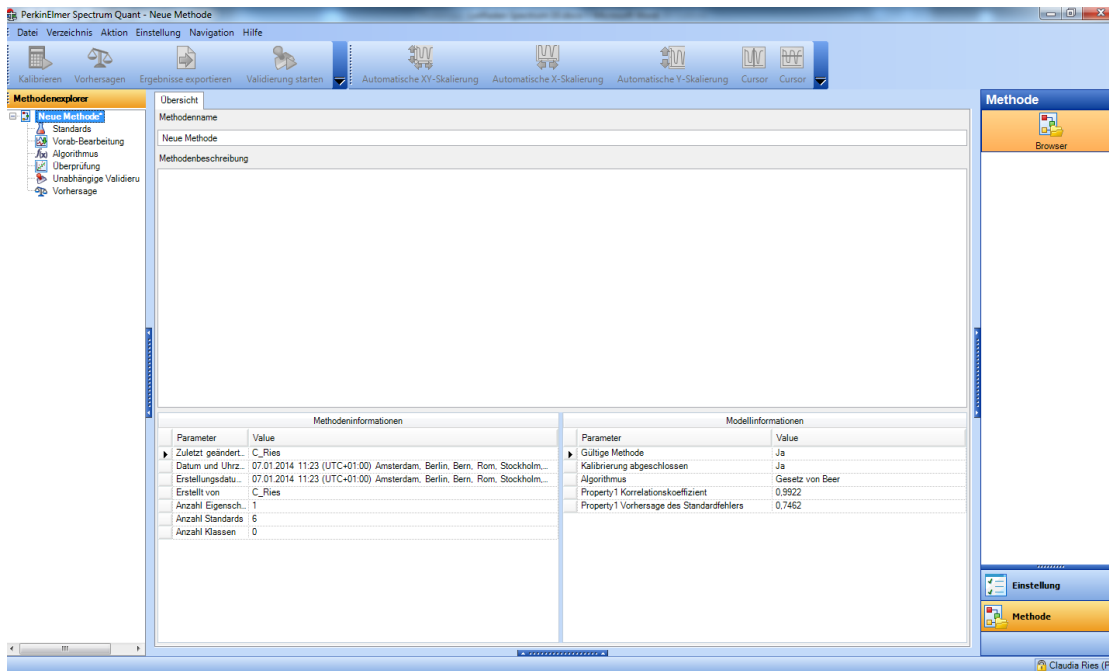
Isospestischer Punkt: ein gemeinsamer Punkt verschiedener Spektren

## 5.2.5. Quantitative Auswertung mit Spectrum Quant

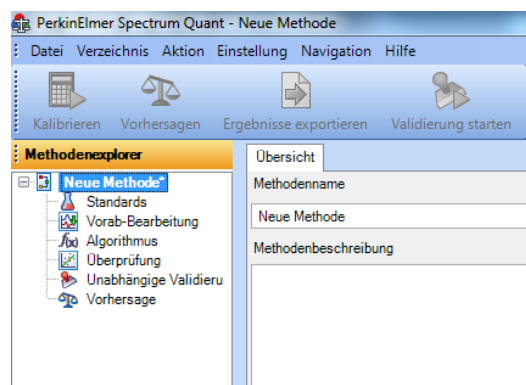
Bestimmung von Analytgehalten auf Basis einer geeigneten Kalibrierung, benötigt Methode die mit Spectrum Quant erstellt wurde (*Einstellung – Quant*)

### 5.2.5.1. Methodenerstellung in Spectrum Quant

Allgemeine Oberfläche der Spectrum Quant Software:



Einstellungen erfolgen über Menü im Methodenexplorer:



Neue Methode – Methodenname

**Standards:** Standards zur Kalibrierung, *Standards hinzufügen* entsprechender Spektren, *Property* gibt auszuwertende Eigenschaft (z.B. Gehalt, Konzentration, etc), für verschiedene Angaben Spalten hinzufügen möglich

**Vorab-Bearbeitung:** ermöglicht Spektrenbearbeitung (z.B. Basislinienkorrektur) der Standards

**Algorithmus:** Auswahl verschiedener Algorithmen (Gesetz von Beer standardmäßig), Übersicht zeigt alle ausgewählten Parameter, unter *Gesetz von Beer* Peak-Parameter einstellen:

- Fläche, Höhe, Peak-Verhältnis
- Punkte der Basislinie
- Regressionsparameter (Anpassung der Regression z.B. linear)

Nach Abschluss der Parametereinstellungen Methode abspeichern (Datei – Speichern oder Speichern unter)

**Kalibrieren** zur Ausführung der Kalibration auf Grundlagen der ausgewählten Parameter

**Überprüfen:** zeigt die Kalibrierung: Kalibrierungsgrafik, Restwertgrafik, Kalibrierungsreport

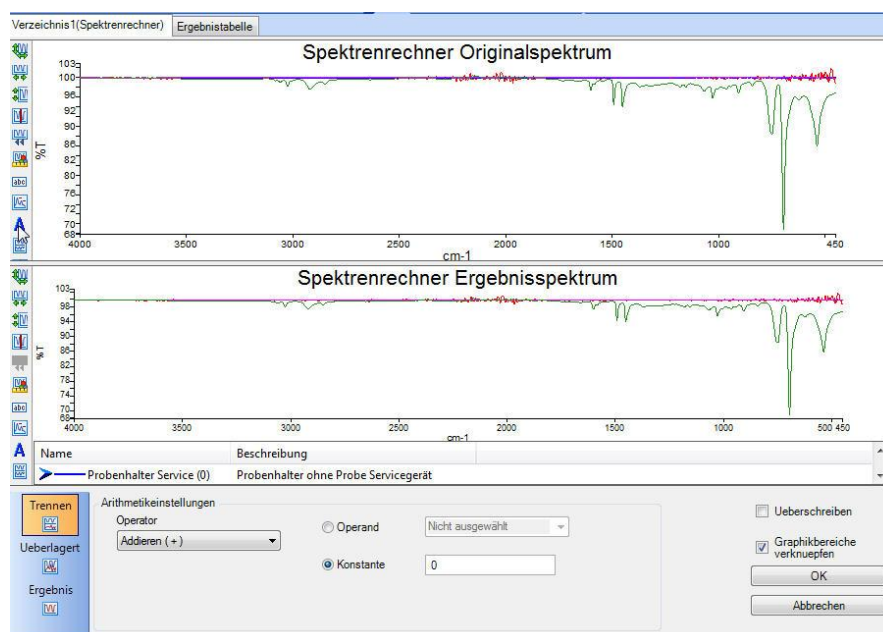
Anwendung der Methode in Spectrum Software: Einstellung – Quant, Hinzufügen (vorher erstellten Quant-Methode), Start zur Analyse

### 5.3. Spektrenrechner

*Prozesse – Spektrenrechner*

- Operator: Rechenart,
- Operand: zweites zu verwendendes Spektrum,
- Konstante: Faktor zur Berechnung

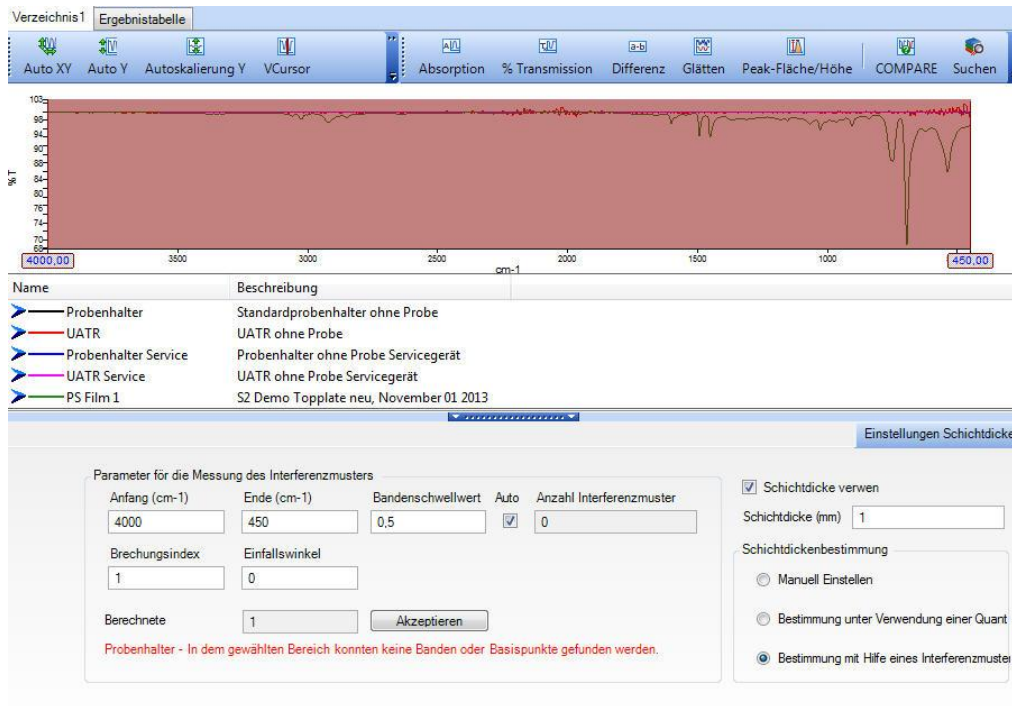
**Mittelwertspektrum:** Spektrenrechner – Operator Addieren – Operand Spektrum auswählen (verschiedene Standards einzeln addieren!), erst abschließend durch die Anzahl der Spektren dividieren



## 5.4. Schichtdickenbestimmung

### Einstellung – Schichtdicke

Bestimmung mit Hilfe Interferenzmuster: Angabe Anfang und Ende Spektralbereich mit Interferenzmuster, Bandenschwellwert für Stärke des Interferenzmusters (auto automatische Einstellung), Brechungsindex (1 bei Leerküvetten) und Einfallswinkel zur Berücksichtigung Material und Messtechnik



Verzeichnis1 Ergebnistabelle

Auto XY Auto Y Autoskalierung Y VCursor

Absorption % Transmission Differenz Glätten Peak-Fläche/Höhe COMPARE Suchen

100  
96  
92  
88  
84  
80  
76  
72  
68

4000.00 3500 3000 2500 2000 1500 1000 450.00

cm-1

Name	Beschreibung
Probenhalter	Standardprobenhalter ohne Probe
UATR	UATR ohne Probe
Probenhalter Service	Probenhalter ohne Probe Servicegerät
UATR Service	UATR ohne Probe Servicegerät
PS Film 1	S2 Demo Topplatte neu, November 01 2013

Einstellungen Schichtdicke

Parameter für die Messung des Interferenzmusters

Anfang (cm-1) Ende (cm-1) Bandenschwellwert Auto Anzahl Interferenzmuster

4000 450 0,5  0

Brechungsindex Einfallswinkel

1 0

Berechnete 1

Probenhalter - In dem gewählten Bereich konnten keine Banden oder Basispunkte gefunden werden.

Schichtdicke verwenden

Schichtdicke (mm) 1

Schichtdickenbestimmung

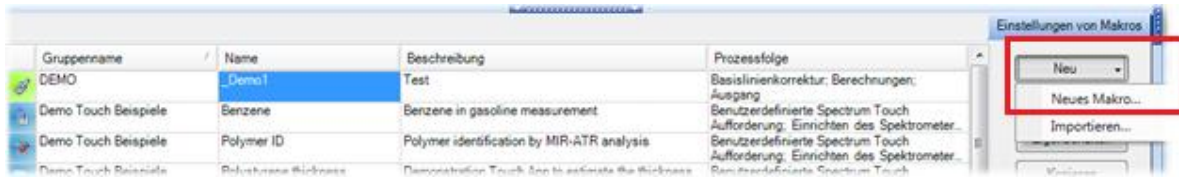
Manuell Einstellen

Bestimmung unter Verwendung einer Quant

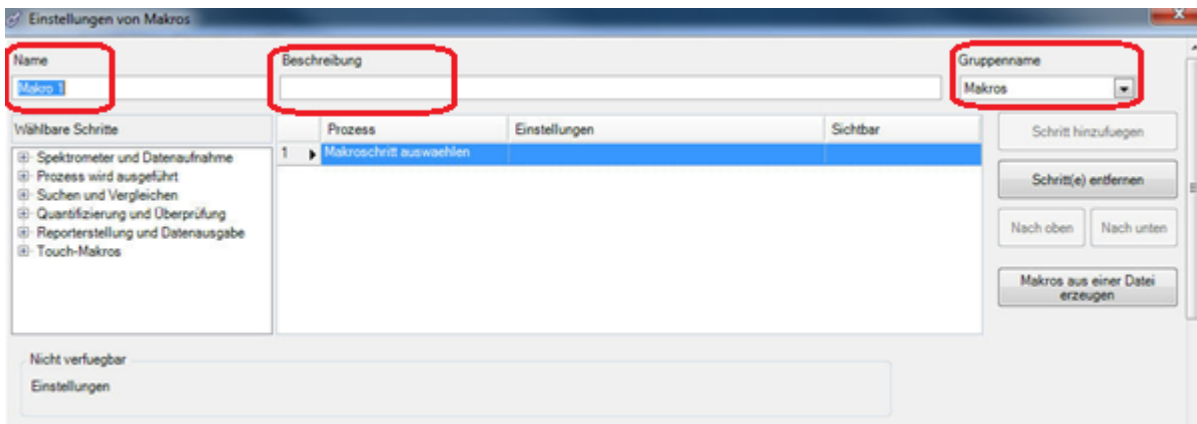
Bestimmung mit Hilfe eines Interferenzmusters

## 6. Makros

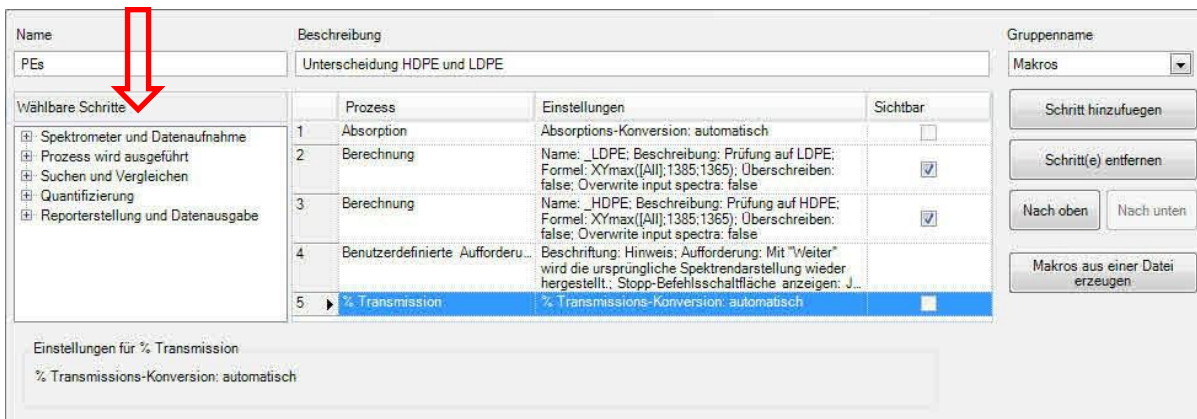
Sequentielles Abarbeiten unterschiedlicher Funktionen, *Einstellungen – Makro – Neu*

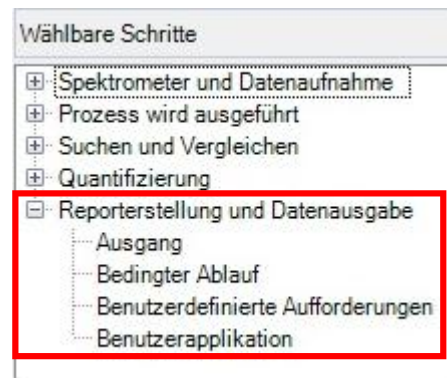
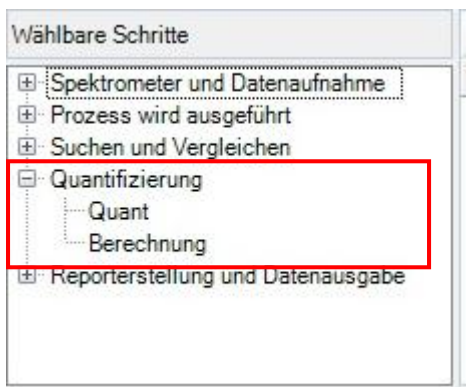
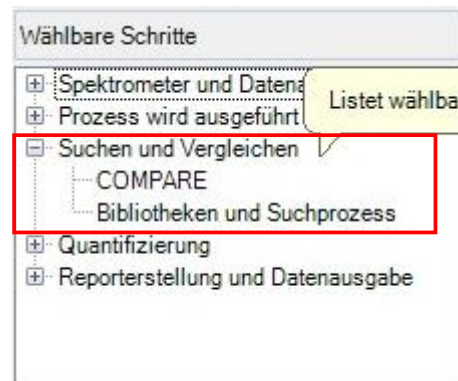
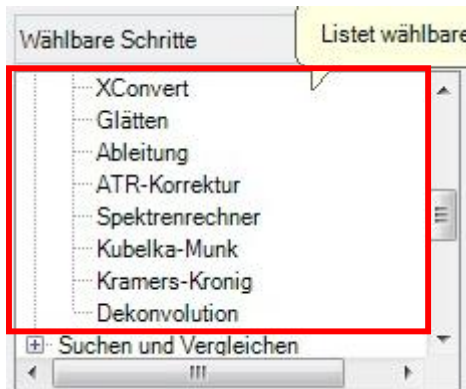
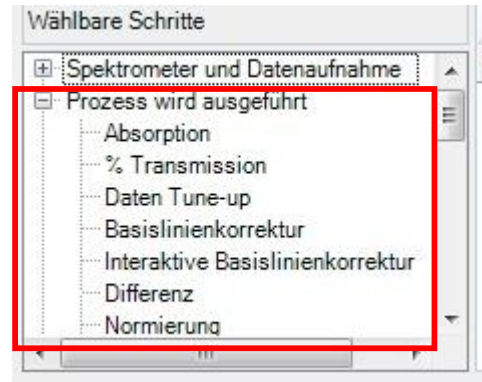
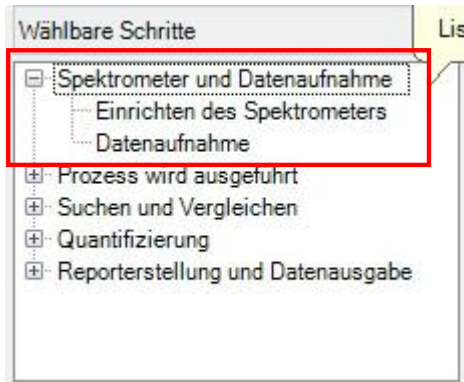


Name, Beschreibung und Gruppenname können frei gewählt werden

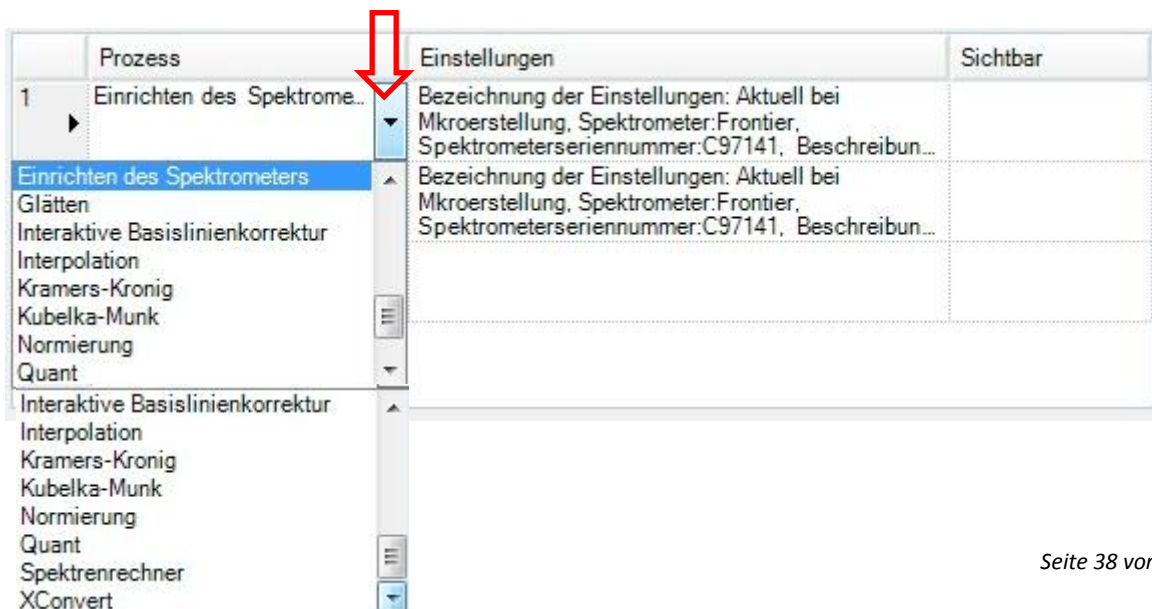


Schritt hinzufügen (mit Inhalt, Funktion verschiedener Kategorien (links), detaillierte Übersicht siehe unten))





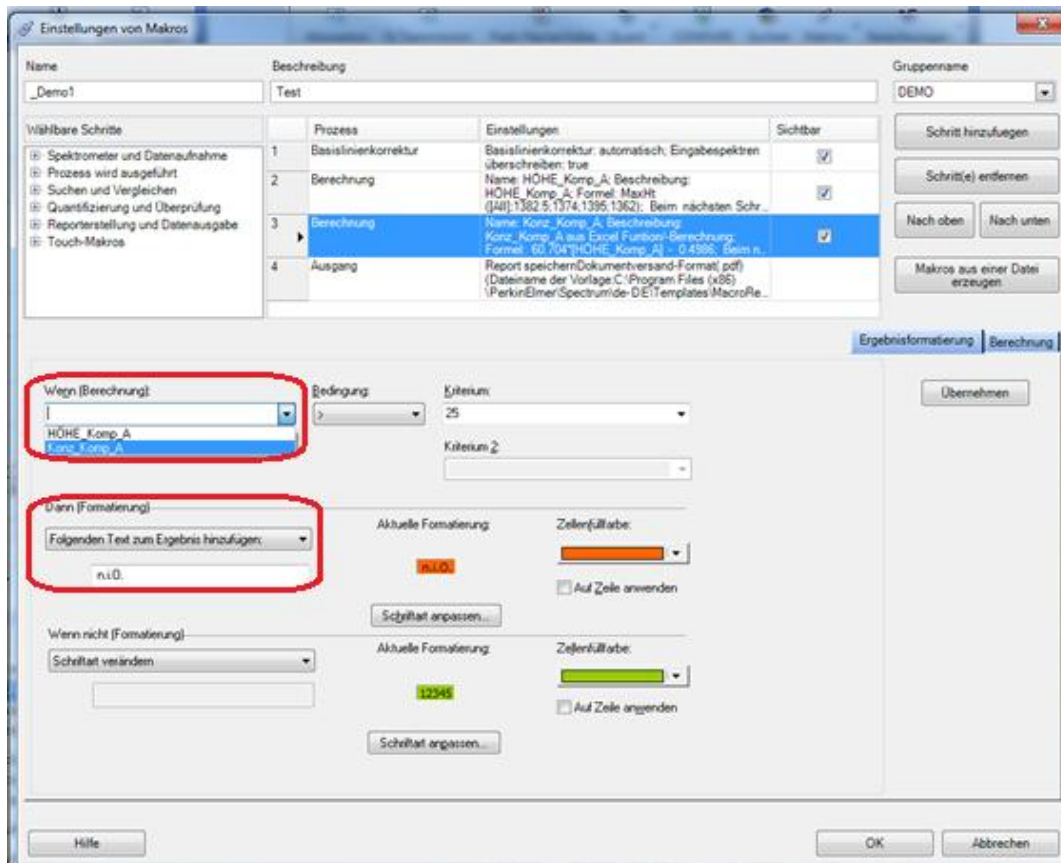
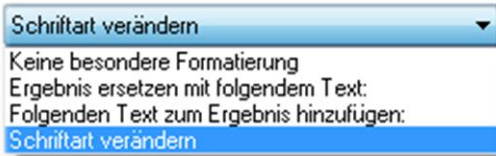
Auswahl von Funktionen und Befehlen auch über Drop-down-Menü möglich:



## Formatierung der Ergebnisdarstellung

Wenn → entsprechende Variable auswählen; sowie Bedingung und Kriterium für Ergebnisausgabe

Dann & wenn nicht → Ergebnisdarstellung bearbeiten, farbliche Markierung auswählbar



Makros aus einer Datei erzeugen: Makro aus History bereits bestehender Spektren erzeugen

## 6.1. In einer Touch APP

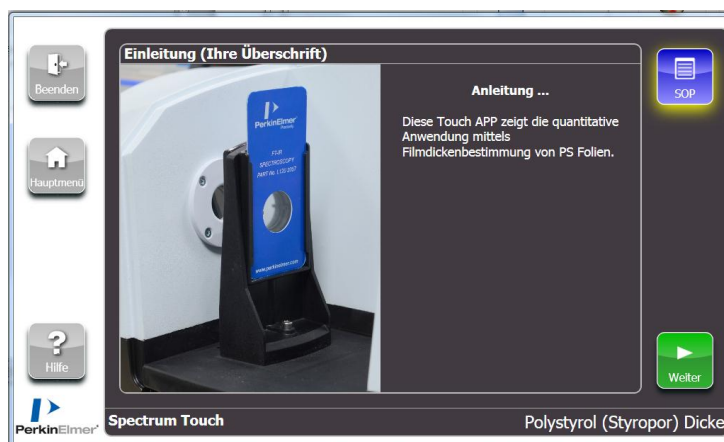
Dies soll nur ein kurzer Einblick in die Touch APP Funktionalität sein. Hier können neben Abfolgen von Prozessen auch Anleitungen/SOP mit Bildern definiert werden.



Die Touch Makros werden nach Makro Gruppen dargestellt.

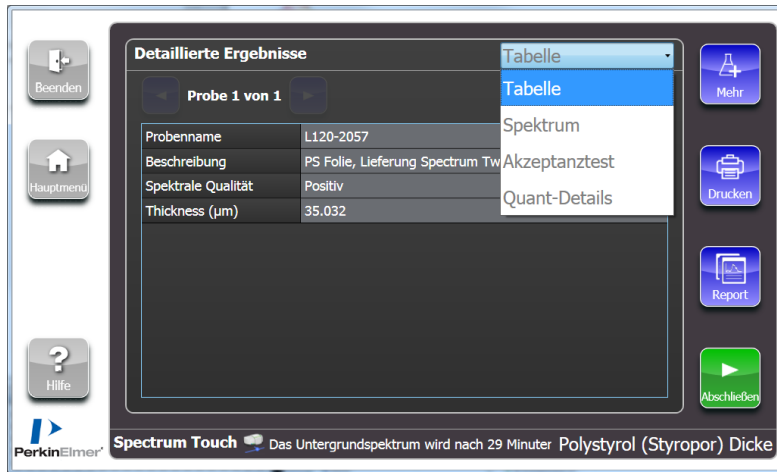


Die APPs funktionieren auf den Windows 7 und 8 Touch und Standard Rechnern. Sie können mit der Maus oder mit dem Finger bedient werden.



Die Einstellung erfolgt über das Spectrum 10 Makro Menü und könnte wie folgt enden:





**Detaillierte Ergebnisse**

Probe 1 von 1

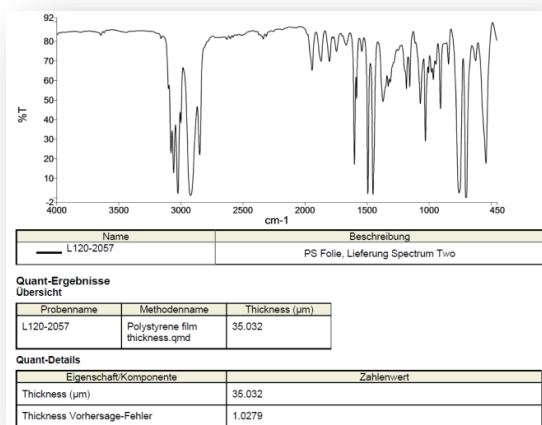
Probenname	L120-2057
Beschreibung	PS Folie, Lieferung Spectrum Two
Spektrale Qualität	Positiv
Thickness (µm)	35.032

Spektrum  
Akzeptanztest  
Quant-Details

Beenden  
Hauptmenü  
Hilfe

Mehr  
Drucken  
Report  
Abschließen

PerkinElmer® Spectrum Touch Das Untergrundspektrum wird nach 29 Minuten Polystyrol (Styropor) Dicke



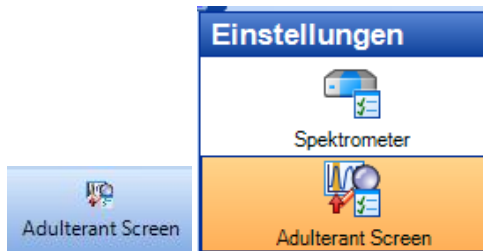
## 6.2. Limitationen der Einstellungen von Makros

- Auswertung pro Messung oder Spektrum
  - Keine Summenauswertung möglich
  - Keine Summenreports/-Berichte möglich
- Keine Spektrendarstellungsänderung (Zoom oder Spektralbereich),  
Spektren werden aus den Ansichten der Tabs genommen

## 7. Adulterant Screen

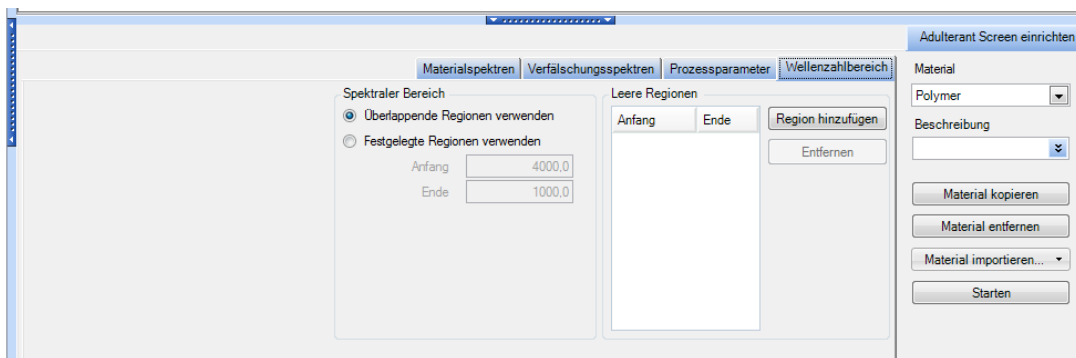
Über Button in Werkzeugliste oder Einstellungen – Adulterant Screen auswählen

10.4 mindestens und Touch nötig

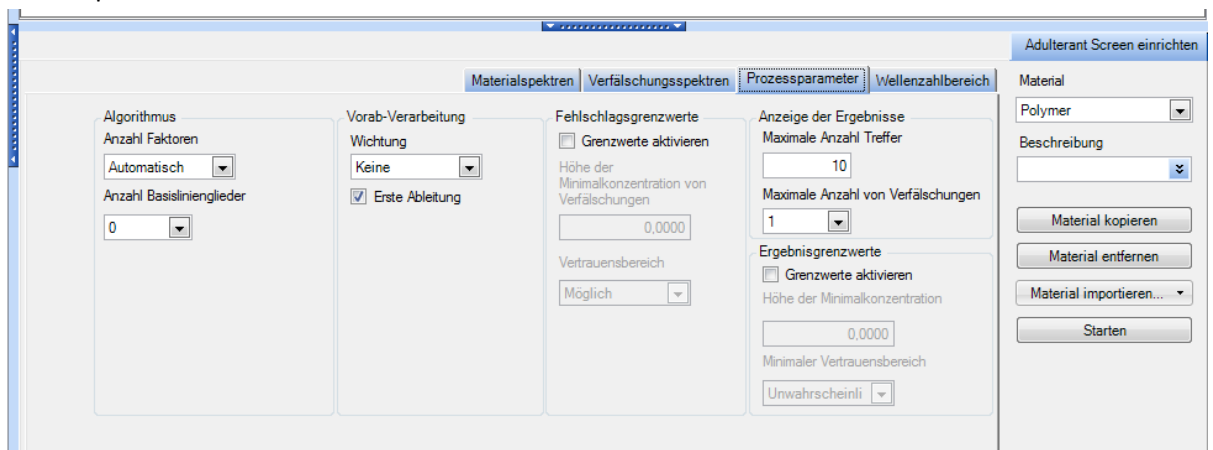


Verschiedene Messparameter definierbar:

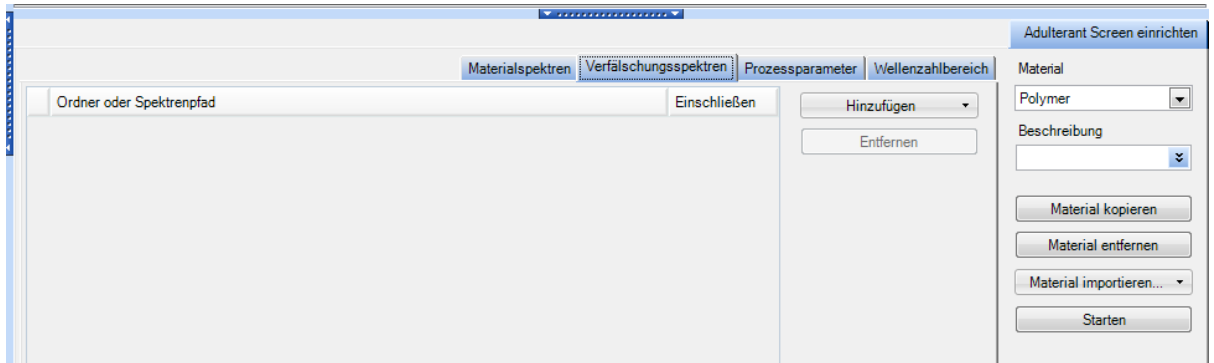
- Wellenzahlbereich



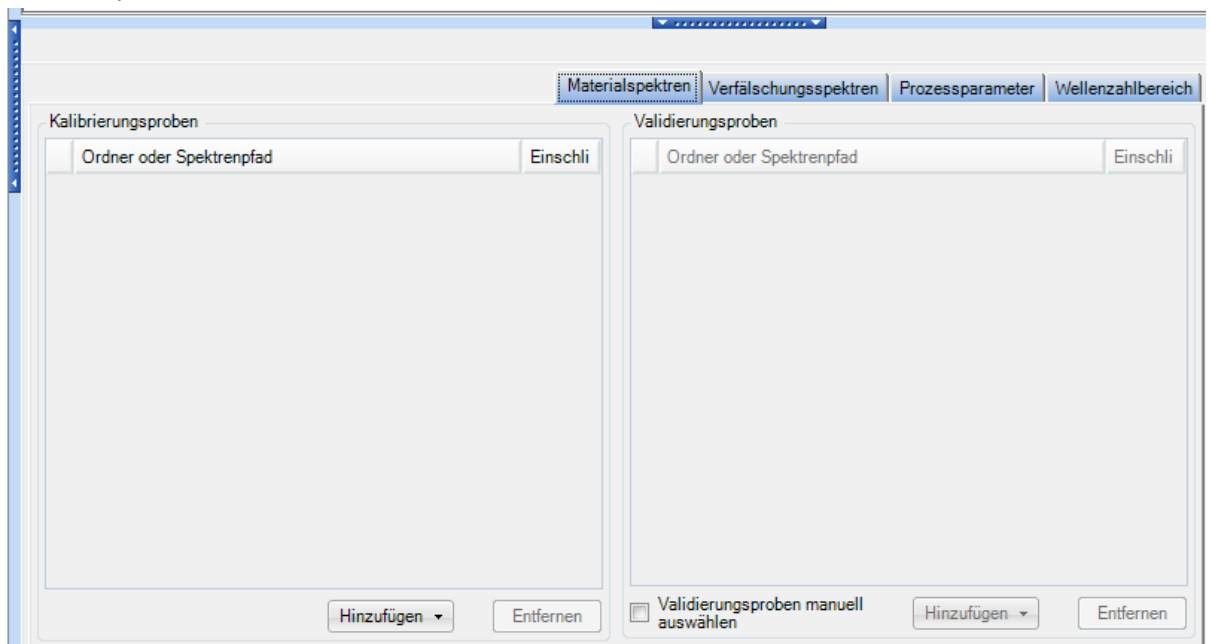
- Prozessparameter



- Verfälschungsspektren



- Materialspektren



Ausführen der Methode über Prozesse – Adulterant Screen oder das entsprechende Icon:



## 8. Ergebnisausgabe

### 8.1. Exportieren

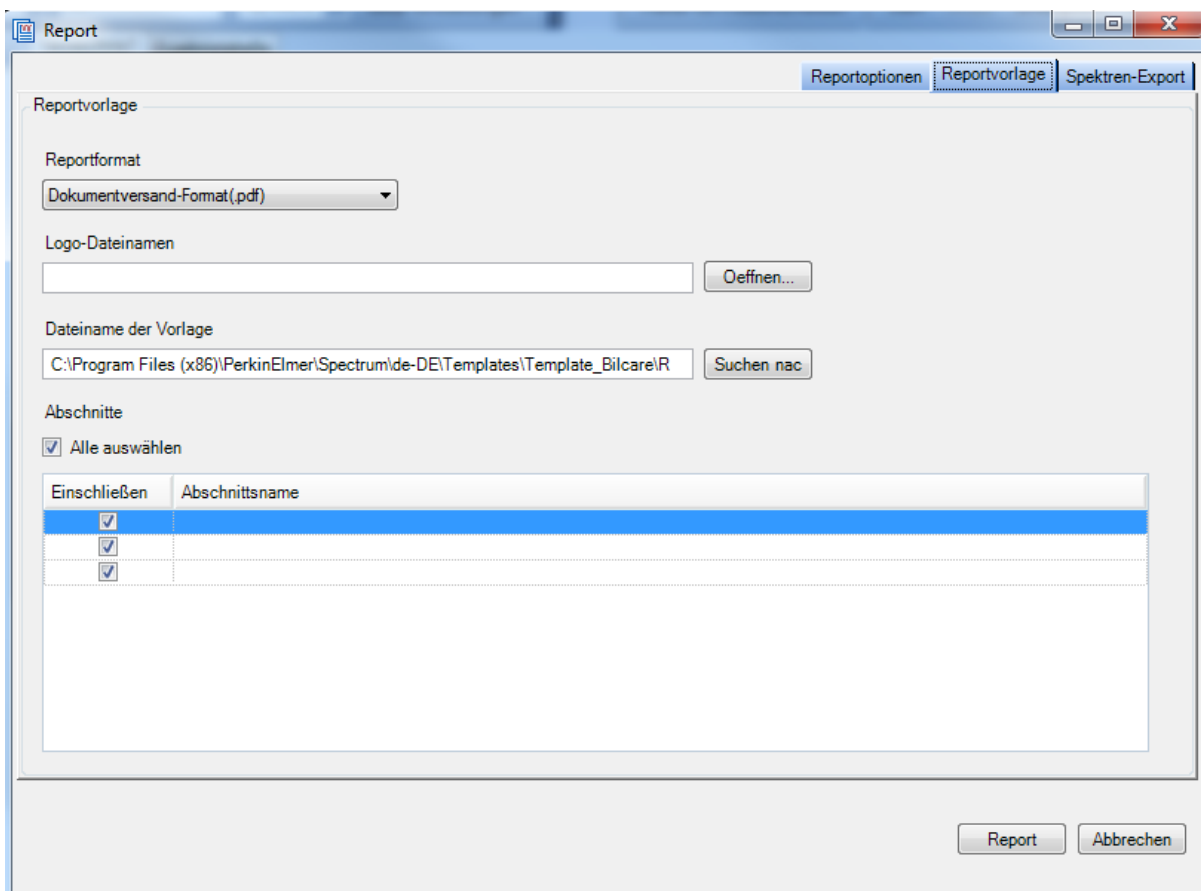
\*.csv, \*.dx (JCAMP-DX), \*.asc (ASCII-Datei); Datei – Exportieren

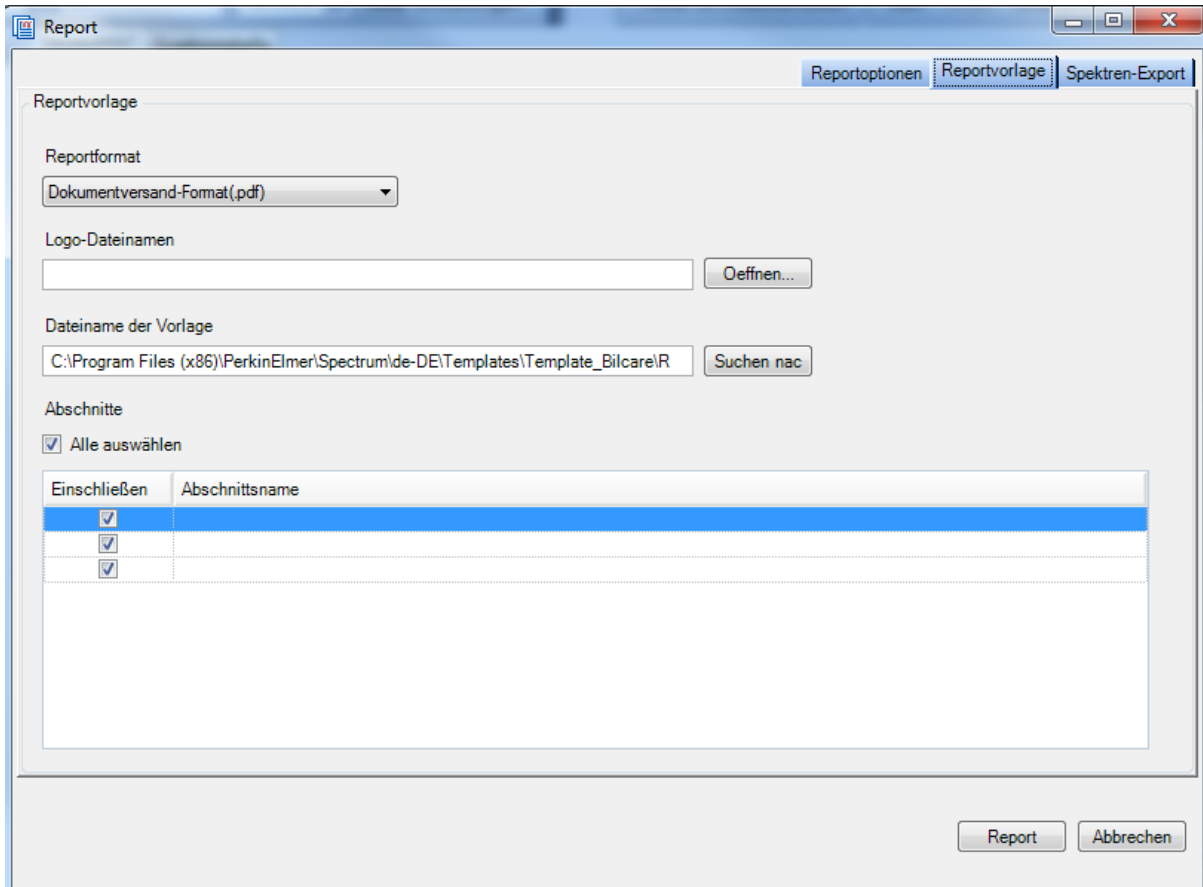
Datei – Senden nach: Einfügen und MS Office oder WordPad

### 8.2. Report Erstellung

Datei – Berichte

Mit verschiedenen Optionen zu Angaben die im Report enthalten sein sollen





### 8.3. Seitenansicht drucken

Datei – Seitenansicht, gibt aktivierten Bereich aus

## 9. Spektreninterpretation

