FTIR-SPEKTROMETER SPECTRUM TWO



Benutzerhandbuch



Freigabedaten

Bestell-Nr.	Version	Erscheinungs- datum
L1050228	А	März 2011

Kommentare zu dieser Publikation sind an folgende Anschrift zu senden:

User Assistance PerkinElmer Ltd Chalfont Road Seer Green Beaconsfield Bucks HP9 2FX United Kingdom

Oder per Email an: info@perkinelmer.com

Hinweise

Die Informationen dieser Druckschrift können ohne vorherige Ankündigung geändert werden. Bezüglich des Materials, einschließlich jedoch nicht ausschließlich der implizierten Gewährleistung der marktgängigen Qualität und Tauglichkeit für einen bestimmten Zweck leistet PerkinElmer keinerlei Garantie.

PerkinElmer ist für hierin enthaltene Fehler und deren eventuelle Folgeschäden bezüglich der Ausstattung, Leistung oder Verwendung dieses Materials nicht haftbar zu machen.

Urheberrecht

Dieses Dokument enthält Informationen, die urheberrechtlich geschützt sind. Alle Rechte sind vorbehalten. Kein Teil dieser Veröffentlichung darf in irgendeiner Form ohne die vorherige schriftliche Genehmigung von PerkinElmer Inc. vervielfältigt oder in eine andere Sprache übersetzt werden.

Copyright © 2011 PerkinElmer, Inc.

Erstellt in Großbritannien.

Warenzeichen

In diesem Dokument verwendete eingetragene Namen, Warenzeichen usw. sind, auch wenn sie nicht ausdrücklich als solche gekennzeichnet sind, gesetzlich geschützt.

PerkinElmer ist eingetragenes Warenzeichen der PerkinElmer, Inc. AssureID, Spectrum und Spectrum Two sind Warenzeichen der PerkinElmer, Inc. Silver Gate ist ein Warenzeichen von Specac. MIRacle ATR ist eingetragenes Warenzeichen von Pike Technologies.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	. 5
Zu diesem Handbuch	. 6
Im Handbuch verwendete Konventionen	. 7
Hinweise, Vorsichts- und Warnmeldungen	. 7
Warnungen und Sicherheitsinformationen	11
Übersicht	12
Sicherheitsüberblick	13
Allgemeine Sicherheit	14
Elektrische Sicherheit	14
Optische Strahlung	15
Stellplatz und Belüftung	16
Ausreichende Kühlung	16
Dispersion des verwendeten Stickstoffs	16
Umgang mit brennbaren Lösungsmitteln und Proben	16
Warnschilder am Gerät	17
Einhaltung der EMC-Vorschriften	18
Europäische EC-Norm	18
FCC-Vorgaben und Regelungen	.18
Überblick auf das Spectrum Two	18
Eine Rundschau auf das Spectrum Two	.19
Das Optiksystem	19
Der Probenraum	20
Netzschalter und Kommunikationsanschlüsse	22
Tragbarkeit	22
Zubehöre	23
Anwendungspakete	25
Einführungs- und Schulungspakete	25
Analysenpakete	25
Entpackung und Installation	27
Stellplatzanforderungen	28
Elektrische Anforderungen	.28
Anforderungen an das Umfeld	.28
Spezifikationen	.29
Entpacken des Spektrometers	.30
Offnen des Transportbehälters	.30
Auswählen des Verbindungsmodus mit dem PC	.32
Installieren des Spectrum Two	34
Anschließen des Spektrometers an die Stromversorgung	35
Verbinden von Spektrometer und PC mit USB-Kabel	36
Verbinden von Spektrometer und PC mit Wireless Router	.37
Verbinden von Spektrometer und PC mit Ethernet-Kabel	.41
Verbinden von Spektrometer und PC über ein Netzwerk	41
Spektrometer-Installationsassistent	42
Austauschen von Messzubehör	.44
Transportieren des Spektrometers	47
Einführung in die Software Spectrum	49
Uberblick	50
Starten der Software Spectrum	51
Die Spectrum-Arbeitsfläche	53
Verwenden des Spectrum-Hilfesystems	56
Vermessen von Proben	57
	=-

Weiterbearbeitung von Spektren	61
Spektrale Korrekturen	61
Identifikation	62
Quantifizierung	66
Makros	70
Scanalyze	70
Spektren speichern, Spektren exportieren, Reporterstellung	72
Spektren speichern	72
Spektren exportieren	73
Senden nach	75
Reporterstellung	76
Drucken	77
Spektrometereinstellungen	78
Ändern der Auflösung	79
Spektrometer-Komponententests	81
Feuchtiakeits-Schutzschild	83
Stromsparmodus	85
Betätigen des Schalters an der Gerätefrontseite	85
Aktivieren des Stromsparmodus in der Software Spectrum	86
Bereitschaftstests und Spektrometerüberprüfung	87
Atmosphärische (CO ₂ /H ₂ O) Kompensation	90
AVI-Korrektur	91
AVI-Kalibrierung	92
Beenden der Software Spectrum	93
Wartungen	95
Überblick	96
Reinigen des Spektrometers	97
Austauschen des Trockenmittels	98
Spülen des Spektrometers1	.01
Spülung des Probenraums 1	.02
Spülung der Optik 1	.03
Austauschen der Strahlungsquelle 1	.05
Ein- und Ausbau der Probenraumfenster 1	.07
Austauschen des Luftfilters der Hauptplatine1	.09
Ergänzende Zubehörteile1	.12
Optionales Zubehör1	.12
Ersatzteile1	.13
Nachrüstungen 1	.13
Anhänge1	15
Anhang 1: Anschlussdetails 1	.16
Anhang 2: Spektrometervalidierungs-Kits 1	.17
Anhang 3: Dekontamination und Reinigung1	.18
Anhang 4: Entsorgung von PerkinElmer-Produkten1	.19



Zu diesem Handbuch

Das vorliegende Handbuch enthält die Anleitungen für die Installation, Betrieb und Wartung des FTIR-Spektrometers Spectrum Two. Es besteht aus folgenden Abschnitten:

- Einleitung
- Warnhinweise und Sicherheitsinformationen
- Ein Überblick auf das Spektrometer Spectrum Two
- Entpackung und Aufstellung
- Betrieb des Spektrometers mit der Software Spectrum
- Gerätewartung
- Anhänge.

Weitere Informationen zur Aufnahme, Betrachten und Bearbeiten von Spektren anhand der Software **Spectrum** finden Sie in den Hilfe-Dateien, auf welche Sie im Menü **Hilfe** Zugriff haben oder indem Sie einfach innerhalb eines Dialogs auf die Schaltfläche **Hilfe** klicken.

 HINWEIS: Das Handbuch liefert Details zum Betrieb des Spektrometers mit dem Spectrum-Softwarepaket Version 10.3 oder jünger. Falls Sie auch über die Software Spectrum
 ES oder AssureID verfügen, beachten Sie dazu die Anleitungen des Administrator-Handbuchs für Ihre Software, das Sie auf der Spectrum Two Handbuch-CD finden (L1050242) oder nutzen Sie die Bildschirmhilfe.

Im Handbuch verwendete Konventionen

Text im normalen Format wird für Informationen und Anweisungen verwendet.

Fettgedrucktes bezieht sich auf Text, der auf dem Bildschirm angezeigt wird.

Text in GROSSBUCHSTABEN, z. B. ENTER oder ALT, wird zur Bezeichnung der Tasten Ihrer PC-Tastatur verwendet. '+' zeigt an, dass zwei Tasten gleichzeitig gedrückt werden müssen, z. B. ALT+F

Bei allen 8-stelligen Zahlen handelt es sich um Bestellnummern von PerkinElmer-Teilen, falls nicht anders angegeben.

Der Begriff ,Gerät' bezieht sich sowohl auf das Spektrometer Spectrum Two, als auch auf jedes eingesetzte Probenzubehör.

Hinweise, Vorsichts- und Warnmeldungen

Drei Begriffe, die in den folgenden Standardformaten vorkommen, werden dazu verwendet, auf besondere Umstände hinzuweisen oder davor zu warnen.

HINWEIS: Ein Hinweis zeigt wichtige Zusatzinformationen für bestimmte Vorgänge an.



VORSICHT	Der Begriff VORSICHT wird verwendet, um auf Situationen hinzuweisen, die zu einer ernsthaften Beschädigung des Gerätes oder eines anderen Objekts führen könnten. Nähere Angaben zu solchen Umständen werden wie hier umrahmt dargestellt.
	Caution (Vorsicht) Bedeutet, dass die genannte Anleitung genau befolgt werden muss, um einen Geräteschaden zu vermeiden.
DK	<i>Caution (Bemærk)</i> Dette betyder, at den nævnte vejledning skal overholdes nøje for at undgå en beskadigelse af apparatet .
E	<i>Caution (Advertencia)</i> <i>Utilizamos el término CAUTION (ADVERTENCIA) para advertir sobre</i> <i>situaciones que pueden provocar averías graves en este equipo o en otros. En</i> <i>los recuadros como éste se proporciona información sobre este tipo de</i> <i>circunstancias.</i>
F	<i>Caution (Attention)</i> Nous utilisons le terme <i>CAUTION</i> (ATTENTION) pour signaler les situations susceptibles de provoquer de graves détériorations de l'instrument ou d'autre matériel. Les détails sur ces circonstances figurent dans un encadré semblable à celui-ci.
	Caution (Attenzione) Con il termine CAUTION (ATTENZIONE) vengono segnalate situazioni che potrebbero arrecare gravi danni allo strumento o ad altra apparecchiatura. Troverete informazioni su tali circostanze in un riquadro come questo.
NL	<i>Caution (Opgelet)</i> Betekent dat de genoemde handleiding nauwkeurig moet worden opgevolgd, om beschadiging van het instrument te voorkomen.
P	Caution (Atenção) Significa que a instrução referida tem de ser respeitada para evitar a danificação do aparelho .
CN	<i>Caution (小心)</i> 我们使用"小心"这一术语来通知您有关可能会对 本仪器或其它设备造成严重损害 的情况。
	有关这些情况的详细信息可在此类方框中找到。
JP	Caution (注意) 分光器や他の機材等に深刻なダメージを与える恐れがある場合は、 この様なボックスの中に表示しています。

10 . Handbuch Spectrum Two

<u>Warnungen und</u> <u>Sicherheitsinformationen</u>

Übersicht

Das Kapitel beschreibt die allgemeinen Sicherheitsvorkehrungen und Vorsichtsmaßnahmen, die bei einem Betrieb der FTIR-Spektrometer Spectrum Two zu beachten sind.

Die Hinweise sollen die normalen Sicherheitsvorschriften in Ihrer Region ergänzen, jedoch nicht ersetzen. Sie stellen zudem eine Ergänzung der standardmäßigen Sicherheits- und Gesundheitsschutzvorschriften von PerkinElmer dar. Die gelieferten Informationen decken nicht sämtliche Sicherheitsvorkehrungen ab, die in einem Labor einzuhalten sind. Die Verantwortung für ein gepflegtes und sicheres Laborumfeld liegt letztendlich beim Anwender und seiner Organisation.

Lesen Sie sämtliche Handbücher, die mit dem Spectrum Two und den Zubehören geliefert werden, bevor Sie das Gerät in Betrieb nehmen. Lesen Sie besonders aufmerksam die Sicherheitshinweise dieses Kapitels und jene der anderen Handbücher. Halten Sie sich bei der Einstellung des Spektrometers und bei der Durchführung von Analysen strikt an die Vorgaben des Handbuchs.

Sicherheitsüberblick

Die FTIR-Spektrometer Spectrum Two wurden in Übereinstimmung mit einer Vielzahl internationaler Standards entwickelt, welche für die Sicherheit von Laborgeräten maßgebend sind. Die routinemäßige Anwendung der Spektrometer birgt keine Gefahren. Mit einfachen und vernünftigen Vorsichtsmaßnahmen können Sie auf Dauer den sicheren Betrieb Ihres Geräts gewährleisten:

- ACHTEN Sie darauf, dass das Gerät richtig an das Stromnetz angeschlossen ist. Achten Sie insbesondere darauf, dass das Gerät sicher geerdet ist.
- ZIEHEN Sie das Netzkabel, bevor Sie das Gerätegehäuse öffnen, mit Ausnahme spezieller Wartungsverfahren, die hier oder in den Softwarehandbüchern Spectrum, Spectrum ES oder AssureID beschrieben sind.
- ÖFFNEN Sie nicht das Gehäuse der Spektrometeroptik. Darin gibt es keine Bauteile, die von Anwendern zu warten sind und ein Beschädigen der Abdichtung führt zu Garantieverlust.
- HALTEN Sie das Gerät trocken. Vermeiden Sie das Verschütten von Flüssigkeiten im Gerät. Wischen Sie extern verschüttete Flüssigkeit unverzüglich auf.
- VERWENDEN Sie KEINE brennbaren Gase zum Spülen des Geräts. Da das Gerät eine heiße Strahlungsquelle enthält, besteht Brand- bzw. Explosionsgefahr. Verwenden Sie zum Spülen des Geräts trockenen ölfreien Stickstoff oder Luft.
- LESEN Sie die ausführlichen Warn- und Sicherheitsinformationen der folgenden Seiten, um einen gefahrlosen Betrieb des Spektrometers zu gewährleisten.

Allgemeine Sicherheit

Die Entwicklung des Spectrum Two erfolgte gemäß Spezifikationen von PerkinElmer und Sicherheitsanforderungen der International Electrotechnical Commission (IEC). Die Geräte entsprechen der IEC-Publikation 61010-1 ('Safety requirements for electrical equipment for measurement, control, and laboratory use' - *Anforderungen an die Sicherheit elektrischer Mess- und Kontrollgeräte und ihrer Verwendung im Labor*) und erfüllen somit die Vorgaben der EU-Richtlinie für Niedrigspannungen 2006/95/EC.

Wird das Spektrometer auf eine vom Hersteller nicht beschriebene Weise verwendet, kann das sichere Funktionieren des Geräts beeinträchtigt sein. Betreiben Sie das Spectrum Two nur in Innenräumen, unter folgenden Bedingungen:

Raumtemperatur Relative Luftfeuchtigkeit 0 °C bis 50 °C 90 % maximal (nicht kondensierend)



Wird das Gerät auf eine Art und Weise betrieben, die hier nicht angegeben ist, kann seine Sicherheit beeinträchtigt sein und eine Gefährdung des Anwenders bestehen.

Elektrische Sicherheit

- Schließen Sie das Gerät an eine Stromversorgung an, die entweder über einen Schalter oder über eine andere Vorrichtung zur Unterbrechung der Stromzufuhr verfügt.
- Stecken Sie das Kabel des Geräts nur in eine Steckdose, die über eine geerdete Schutzleiterverbindung verfügt.
- ZIEHEN Sie das Netzkabel, bevor Sie das Gerätegehäuse für Justagen, Teileaustausch, Wartungen oder Reparaturen öffnen, mit Ausnahme spezieller Verfahren, die hier oder in den Softwarehandbüchern Spectrum, Spectrum ES oder AssureID beschrieben sind.



Für einen sicheren und korrekten Gerätebetrieb ist es unbedingt erforderlich, dass die grüne oder grüngelbe Ader des Netzkabels mit einer Erdleitung verbunden wird, die lokalen Vorschriften für elektrische Sicherheit entspricht. Eine durchgehende Erdungsschiene ist entscheidend für den sicheren Gerätebetrieb.

Nehmen Sie nur Geräte in Betrieb, welche die Anforderungen der IEC 61010-1, IEC 60950 oder gleichwertiger Standards erfüllen.

Das mitgelieferte Netzgerät kann unter folgenden Voraussetzungen sicher betrieben werden:

- Einsatz in Innenräumen
- Meereshöhe bis zu 3000 m
- Raumtemperatur zwischen 0 °C und 50 °C
- Schwankungen der Versorgungsspannung nicht größer als ± 10 % der nominellen Spannung.

An das mitgelieferte dreiadrige Netzkabel muss ein Stecker angeschlossen sein, der die Aderfarben folgendermaßen zuordnet:

Kontakt	Aderfarbe (100–120 V)	Aderfarbe (220–240 V)
Erde	Grün oder Grüngelb	Grüngelb
Phase	Schwarz	Braun
Null	Weiß	Blau

Optische Strahlung

Das Gerät entspricht den Anforderungen der Direktive 2006/25/EC für künstliche optische Strahlungsquellen.

Stellplatz und Belüftung

Ausreichende Kühlung

- Stellen Sie das Gerät nicht in die Nähe von Wärmequellen, wie z. B. Heizkörpern.
- Blockieren Sie nicht die Lüftungsöffnungen an der Unterseite des Geräts.
- Bedecken Sie nicht das Netzgerät.

Dispersion des verwendeten Stickstoffs



Stellen Sie das Spektrometer nicht in einen schlecht belüfteten Bereich des Labors, wenn Sie Stickstoff als Spülgas verwenden.

Sauerstoffmangel in geschlossenen Räumen löst keinen Erstickungsreflex aus, kann jedoch ohne Vorwarnung innerhalb von Sekunden zu Fehleinschätzungen, Konfusion oder Bewusstlosigkeit führen.

Das Spektrometer verfügt über einen Anschluss, der es ermöglicht, den Probenraum mit einem Gas zu spülen. Dazu kann reine, trockene und ölfreie Luft oder Stickstoff verwendet werden. Die empfohlene Strömungsrate beträgt 4 l/min. Außerdem gibt es zwei Anschlüsse zur Spülung des Geräteinnenraums; die dafür empfohlene Gasströmungsrate beträgt 2 l/min. Das Spülgas des Probenraums strömt anschließend ins Freie. Der Spülausgang des Geräteinnenraums kann mit Hilfe eines Schlauchs mit einem Laborabzug verbunden werden.

Umgang mit brennbaren Lösungsmitteln und Proben



Das Spektrometer enthält eine heiße Strahlungsquelle und deren Kontakt mit brennbaren Dämpfen kann eine Explosion auslösen. Daher dürfen brennbare Lösungsmittel und Proben nicht in der Nähe des Geräts aufbewahrt werden. Bei der Probenvorbereitung muss die Handhabung solcher Materialien fernab vom Gerät in einem sicheren Bereich erfolgen, wie z. B. in einem Laborabzug.

Warnschilder am Gerät



Warnung.

Lesen Sie aufmerksam die Begleitdokumente, wann immer dieses Symbol erscheint, um sich über die Natur potenzieller Gefahren und über notwendige Maßnahmen zu informieren.

Ein Warnschild befindet sich am Gehäuse der Strahlungsquelle (Abb.1). Ausführliche Angaben dazu finden Sie unter *Austauschen der Strahlungsquelle* auf Seite 105.



Abb. 1. Aufkleber an der Geräterückseite

Ein weiteres Warnschild befindet sich am Trockenmittelfach in der Nähe des Eingangs für Spülgas. (Abb. 2). Ausführliche Angaben dazu finden Sie unter *Austauschen des Trocken-mittels* auf Seite 98 oder *Spülung der Optik* auf Seite 103.



Abb. 2. Aufkleber an der Geräteunterseite

Einhaltung der EMC-Vorschriften

Europäische EC-Norm

Die FTIR-Spektrometer Spectrum Two werden gefertigt und entsprechend getestet, um die Anforderungen der EC-Norm 2004/108/EC zu erfüllen.

FCC-Vorgaben und Regelungen

Die Spektrometer sind als digitale Geräte eingestuft, die ausschließlich für Untersuchungen im industriellen, kommerziellen oder medizinischen Bereich verwendet werden. Sie sind von den technischen Standards ausgenommen, die in Teil 15 der FCC-Vorgaben und Regelungen beruhend auf Abschnitt 15.103(c) festgelegt sind.

<u>Überblick auf das</u> <u>Spectrum Two</u>

Rundschau auf die Geräte Spectrum Two

Die FTIR-Spektrometer Spectrum Two von PerkinElmer sind kompakte, robuste Geräte, die auch außerhalb des Laboratoriums eingesetzt werden können.



Abb. 3. FTIR-Spectrometer Spectrum Two

- FTIR-Spektrometer Spectrum Two mit Standarddetektor:
 - MIR-Standarddetektor aus LiTaO₃ (Lithiumtantalat) f
 ür Hochleistung bei Raumtemperatur.
 - Optisches System mit KBr-Fenstern ermöglicht die Datenaufnahme im gesamten Wellenzahlbereich von 7800 bis 370 cm⁻¹ mit bester Auflösung von 0,5 cm⁻¹.
 - Optionale ZnSe-Fenster erlauben den Einsatz in außergewöhnlich feuchter Umgebung, im Wellenzahlbereich 7800 bis 525 cm⁻¹ mit einer besten Auflösung von 0,5 cm⁻¹.
 - Optionale APV/AVI-Konfiguration. Bei der APV sorgt ein softwaregesteuertes internes Filterrad mit rückführbarem Referenzmaterial für automatische Leistungsprüfung. Desgleichen ermöglicht eine mitgelieferte Methanküvette das Aufnehmen von Standarddaten zur Festlegung grundlegender Bandenpositionen für eine AVI-Kalibrierung.
- FTIR-Spektrometer Spectrum Two mit temperaturstabilisiertem Detektor:
 - Temperaturstabilisierter MIR-Hochleistungsdetektor aus DTGS (Deuteriertes Triglyzinsulfat) mit verbessertem Signal/Rausch-Verhältnis.
 - Optisches System mit KBr-Fenstern ermöglicht die Datenaufnahme im gesamten Wellenzahlbereich von 7800 bis 370 cm⁻¹ mit einer besten Auflösung von 0,5 cm⁻¹.
 - Optionale ZnSe-Fenster erlauben den Einsatz in außergewöhnlich feuchter Umgebung, im Wellenzahlbereich 7800 bis 525 cm⁻¹ mit einer besten Auflösung von 0,5 cm⁻¹.
 - Optionale APV/AVI-Konfiguration. Bei der APV sorgt ein softwaregesteuertes internes Filterrad mit rückführbarem Referenzmaterial für automatische Leistungsprüfung. Desgleichen ermöglicht eine mitgelieferte Methanküvette das Aufnehmen von Standarddaten zur Festlegung grundlegender Bandenpositionen für eine AVI-Kalibrierung.

Das Spektrometer wird einem PC verbunden, entweder per Kabel über einen USB-Anschluss 2.0, über ein Netzwerk via Ethernet-Anschluss oder kabellos über ein Netzwerk unter Verwendung des optionalen Wireless Routers.

Die mitgelieferte Software **Spectrum** ermöglicht es, das Spektrometer zu steuern und die aufgenommenen Spektren zu bearbeiten. Das Spektrometer kann im Verhältnismodus, als Einstrahlgerät oder im Modus Interferogramm betrieben werden.

Das Optiksystem

Das optische System befindet sich im Hauptgehäuse des Spektrometers. Es wird werksseitig abgedichtet und darf nicht vom Anwender geöffnet werden.

Es dürfen keine Abdeckungen am Spektrometer entfernt werden, außer jenen, die bei den im Handbuch beschriebenen Wartungen erwähnt werden. Wartungsverfahren bei denen das Risiko des Eindringens von Wasserdampf in das Spektrometer besteht, dürfen nur anhand des betreffenden Wartungsassistenten der Software **Spectrum, Spectrum ES** oder **AssureID** durchgeführt werden. S. dazu *Wartungen* auf Seite 95 mit ausführlichen Informationen.

Stabilität des Optiksystems

Das System wird werksseitig gespült und abgedichtet. Innerhalb des Systems untergebrachte und mitgelieferte Trockenmittelpäckchen beseitigen vollständig eindringenden Wasserdampf oder Kohlendioxid. Das einzigartige Feuchtigkeitsschutz-Design (Bestandteil des Systems OpticsGuard[™]) bewahrt das Spektrometer vor Umwelteinflüssen und ermöglicht seinen Einsatz in kritischer Umgebung. Hinzu kommt ein interner Feuchtigkeitssensor, der Sie in Verbindung mit der Feuchtigkeitsschutzfunktion der Software warnt, wenn das Trockenmittel ausgetauscht werden muss.

Im FTIR-Spektrometer Spectrum Two trennen Fenster aus KBr oder ZnSe den Probenraum vom gespülten Optiksystem.

Sie können auch den Probenraum spülen, mit reiner, trockener und ölfreier Luft oder mit Stickstoff. Beide Gase entfernen Wasserdampf, Stickstoff ist jedoch vorzuziehen, da er auch atmosphärisches Kohlendioxid verdrängt.

Der Probenraum

Das Spektrometer verfügt über einen vielseitig verwendbaren Probenraum mit Spülmöglichkeit (Abb.4), der sich an der Vorderseite des Geräts befindet. Greifen Sie zum Anheben des Probenraumdeckels in die Einbuchtung an seiner Frontseite.



Abb. 4. Probenraum des Spectrum Two

22 . Handbuch Spectrum Two

Der IR-Strahl tritt in den Probenraum durch das linksseitige Fenster ein. Nach dem Durchgang durch die Probe verlässt er den Probenraum durch das Fenster auf der rechten Seite und tritt er in den Detektorbereich ein.

VORSICHTFenster aus KBr können trotz einer Schutzschicht gegen geringe Mengen
Feuchtigkeit, durch die Ansammlung größerer Mengen Kondensat in den
Fensterrahmen bei einigen FTIR-Spektrometern beschädigt werden.VORSICHTVermeiden Sie es, die Fenster zu zerkratzen, wenn Sie Zubehör einbauen
oder Probenwerkzeuge benutzen.

Standardzubehöre werden auf der Grundplatte des Probenraums montiert. Auf dieser Platte befindet sich ein Gleithalter, der mit einer Rändelschraube in zwei verschiedenen Positionen befestigt werden kann. (Abb. 5).



FiAbb. 5. Gleithalter auf der Standardgrundplatte

Der Gleithalter hat zwei Einschübe, welche die Probe und eine J-Stoppkarte für Messungen mit hoher Auflösung aufnehmen können.

Weitere Angaben zur Verwendung einer J-Stoppkarte finden Sie unter Ändern der Auflösung auf Seite 79.

Netzschalter und Kommunikationsanschlüsse

Der Gleichstromanschluss und die Kommunikations-Ports befinden sich an der Rückseite des Spektrometers.

Die Anzeige-LED an der Vorderseite des Geräts leuchtet grün, wenn das Gerät am Netzteil angeschlossen und eingeschaltet ist.



Abb. 6. Anzeige-LED für Stromversorgung

HINWEIS: War das Spektrometer Spectrum Two über Nacht ausgeschaltet, ist es innerhalb 15 Minuten nach dem Einschalten betriebsbereit. Wurde das Gerät jedoch aus einem deutlich wärmeren Raum in ein kälteres Umfeld gebracht, sollte während der ersten Betriebsstunden vor jeder Probe ein Untergrundspektrum aufgenommen werden.

Tragbarkeit

Die kompakte und robuste Ausführung des Spectrum Two ermöglicht einen leichten Transport zwischen Standorten in verschiedenem Umfeld. Die einfache Inbetriebnahme und kurze Vorwärmzeit erlaubt einen schnellen Neustart. Eine Vielfalt von Zubehören hilft Ihnen, Ihre Analysen auch außerhalb des Labors durchzuführen. Die optionale kabellose PC-Verbindung ermöglicht auch eine Steuerung über tragbare Computer und mehrfache Stromversorgungsoptionen erlauben den Betrieb des Geräts mit oder ohne Netzanschluss.

Das Tragbarkeitspaket besteht aus einem Batteriesatz, einem Anschlussadapter an PKW-Ports von 12 V, einer Spektrometer-Tragetasche und einem Wireless Router Kit. Die einzelnen Komponenten des Tragbarkeitspakets können auch getrennt bestellt werden. Ausführlichere Informationen dazu finden Sie unter *Optionales Zubehör auf Seite* 112.



Abb. 7. Spectrum Two mit Wireless Router und Batteriesatz

HINWEIS: Der Batteriesatz kann auch zur Notstromversorgung dienen.

Messzubehöre

Eine Reihe optionaler Messzubehöre, die im Probenraum des FTIR-Spektrometers Spectrum Two eingesetzt werden können, steht zur Verfügung:

• Spectrum Two Universal-ATR (Diamant, Einfachreflexion), L1600107

Die UATR-Einheit ist ein gängiges Zubehör für Analysen fester und flüssiger Proben. Sie führt zu qualitativ hochwertigen Spektren durch die Verwendung eines Druckhebelarms, der für guten Kontakt zwischen Probe und Diamantkristall sorgt.

Mehr dazu finden Sie im *Spectrum Two UATR-Benutzerhandbuch* (L1050231), das sich als pdf-Datei auf der *Spectrum Two Handbuch-CD* (L10500242) befindet.



Abb. 8. FTIR-Spektrometer Spectrum Two mit UATR-Zubehör

• Spectrum Two HATR (ZnSe, Flache Platte), L1600113

Das Zubehör enthält eine flache Oberplatte mit einem ZnSe-Kristall von 50 mm für 25 Reflexionen bei 45 Grad. Es ermöglicht bequeme Messungen von Festproben, Polymerfilmen und Pulvern.

Weitere Oberplatten mit Kristallen aus Germanium, AMTIR-1 und KRS-5 sind ebenfalls verfügbar.

Mehr dazu finden Sie im *Spectrum Two-HATR Benutzerhandbuch* (L1050232), das sich als pdf-Datei auf der *Spectrum Two Handbuch-CD* (L10500242) befindet.

• Spectrum Two HATR (ZnSe, wannenförmige Platte), L1600109

Das Zubehör enthält eine wannenförmige Oberplatte mit einem ZnSe-Kristall von 50 mm für 25 Reflexionen bei 45 Grad. Es ermöglicht bequeme Messungen von Flüssigproben, Pasten und Gelen.

Weitere Oberplatten mit Kristallen aus Germanium, AMTIR-1 und KRS-5 sind ebenfalls verfügbar.

Mehr dazu finden Sie im *Spectrum Two HATR-Benutzerhandbuch* (L1050232), das sich als pdf-Datei auf der *Spectrum Two Handbuch-CD* (L10500242) befindet.

• Spectrum Two Zubehör für Diffuse Reflexion, L1600111

Das Zubehör für Diffuse Reflexion ermöglicht ein Vermessen lichtundurchlässiger oder stark streuender fester Proben, wie Pharmazeutika, Lebensmittel, Seifenpulver, Kohle, Tone, Bodenproben, Papier, lackierte Oberflächen, Schaumstoffe und Katalysatoren.

Mehr dazu finden Sie im *Spectrum Two Benutzerhandbuch des Zubehörs für Diffuse Reflexion* (L1050233), das sich als pdf-Datei auf der *Spectrum Two Handbuch-CD* (L10500242) befindet.

FASR-Zubehör für Gerichtete Reflexion bei festem Winkel, (16°), L1600119

Das FASR-Zubehör ermöglicht das Aufnehmen der Spektren ebener, reflektierender Oberflächen von Platten oder schichtförmigem Probenmaterial, wie z. B. dünne Schichten auf Metallflächen. Dabei fokussiert ein Spiegel den eintretenden IR-Lichtstrahl auf die Probe und ein zweiter sammelt die reflektierte Strahlung und lenkt sie auf den Detektor. Mit dem Zubehör wird ein Standardspiegel geliefert, der zum Aufnehmen von Referenzspektren verwendet wird.

Das FASR-Zubehör wird im Probenraum auf den Gleithalter montiert.

Mehr dazu finden Sie im *Spectrum Two Benutzerhandbuch des Zubehörs für Gerichtete Reflexion* (L1050234), das sich als pdf-Datei auf der *Spectrum Two Handbuch-CD* (L10500242) befindet.

Der Aus- und Einbau der Zubehöre ist sehr einfach. Mehr dazu finden Sie unter *Austauschen von Messzubehör* auf Seite 44. Beim Einbau von Zubehören mit Basisplattform schiebt sich ein codierter Stecker in eine Buchse an der Rückseite des Probenraums, wodurch das Gerät den Zubehörtyp erkennt und automatisch die Einstellungen des Spektrometers aktualisiert.

HINWEIS: Für das Spectrum Two sind auch einige Zubehöre von Fremdfirmen verfügbar, wie z. B. Pike MIRacle ATR und Specac Sliver Gate ATR. Auf einer Basisplattform montiert, werden auch diese von der Software Spectrum erkannt und Details dieser Zubehöre werden in der Kopfzeileninformation erfasster Spektren gespeichert.

Fragen Sie Ihren PerkinElmer-Kundenbetreuer nach weiteren Informationen.

Gasküvetten mit Fenstern aus NaCl, KBr oder CaF_2 sind ebenfalls verfügbar. Der universelle Halter für Gasküvetten (10 cm) kann in den Gleithalter des Probenraums gesetzt werden.

HINWEIS: Für Zubehöre, die in den Gleithalter passen, können Sie eine Messoption aus der Liste des Reiters **Spektrometereinstellungen** in der Software Spectrum auswählen.

26. Handbuch Spectrum Two

Anwendungspakete

Sie können bei PerkinElmer eine Reihe von Applikationspaketen bestellen, die für spezielle Anwendungsbereiche besonders hilfreich sind

Einführungs- und Schulungspakete

Bestell-Nr.	Beschreibung	
L1608001/ L1608002	FTIR Einführungs-Kit (1 Benutzer/5 Benutzer)	
L1608003	FTIR Schulungspaket	
L1608004	FTIR Pharmakopöevorschriften, Schulungspaket	
L1608005	FTIR Nutrazeutikavorschriften, Schulungspaket	
L1608013	FTIR Polymere, Schulungspaket	

Analysenpakete

Die Analysenpakete enthalten Zubehöre, Verbrauchsteile und Touch Apps Software.

Bestell-Nr.	Beschreibung	
L1608006	Analysenpaket für Kohlenwasserstoffe in Umweltproben, nach ASTM D7066	
L1608007	Kohlenwasserstoffe in Umweltproben, Cyclohexan-Verfahren	
L1608008	Kohlenwasserstoffe in Umweltproben, ATR-Verfahren (enthält das HATR-Zubehör)	
L1608009	Analysenpaket für Schmierstoffe im Gebrauch	
L1608010	Analysenpaket für Biodiesel in Dieseltreibstoffen	
L1608012	Analysenpaket für Benzol in Ottokraftstoff	

Entpackung und Installation

Stellplatzanforderungen

HINWEIS: Lesen Sie aufmerksam das Kapitel der Warnungs- und Sicherheitsinformationen dieses Handbuchs, bevor Sie das Spektrometer installieren.

Elektrische Anforderungen

Das Netzgerät des Spectrum Two kann an eine Stromversorgung von 50 oder 60 Hz und 100 bis 230 V angeschlossen werden, ohne weitere Einstellungen.

Der maximale Stromverbrauch des Systems beträgt etwa 40 W, wenn der Wireless Router in Betrieb ist. Im Stromsparmodus werden lediglich 6 W verbraucht, wovon nur 0,2 W auf den Gleichstromverbrauch entfallen.

Schwankungen der Netzspannung müssen unter 10 % der Nominalspannung liegen.

Falls möglich, sollte das Spektrometer nicht an Leitungsnetze angeschlossen sein, an denen Geräte mit hohem Stromverbrauch betrieben werden, wie etwa starke Motoren.

Falls möglich, sollten an der gleichen Leitung keine Fotokopierer, Entladungslampen, Radiosender oder anderes Gerät mit starken Lastschwankungen betrieben werden.

Anforderungen an das Umfeld

Um das Spektrometer mit Bestleistung zu betreiben, sollte Folgendes beachtet werden:

- Stellen Sie das Gerät in eine relative trockene und staubfreie Umgebung.
- Sorgen Sie dafür, dass der Arbeitstisch frei von Vibrationen oder Stößen ist.
- Stellen Sie das Spektrometer und den PC nicht in die Nähe von Wärmequellen, wie etwa Heizstrahler oder Zentralheizungskörper.
- Setzen Sie das Gerät nicht direkter Sonneneinstrahlung aus, um zu vermeiden, dass es sich überhitzt.
- Achten Sie darauf, dass unter dem Spektrometer genügend Freiraum besteht, um eine ausreichende Kühlluftströmung zu gewährleisten.
- Die nähere Umgebung des PC muss frei von starken Magnetfeldern sein, von direkter Sonnenstrahlung, sowie von Heiz- oder Kühlgeräten und deren Leitungen.

Spezifikationen

Spezifikation	Wert	
Dimensionen	450 × 300 × 210 mm (<i>B</i> × <i>T</i> × <i>H</i>)	
	$450 \times 300 \times 300$ mm mit installierter UATR	
Gewicht	~ 13 kg	
Stromversorgung	100–230 V, 50/60 Hz, Max. 65 VA	
Laser	Klasse 1	
Detektor	DTGS oder LiTaO ₃	
Betriebs-Raumtemperatur	0 °C bis 50 °C*	
Lagerungstemperatur	–20 °C bis 60 °C	
Maximale relative Luftfeuchtigkeit	80 % (ohne Betauung) mit KBr-Fenstern 90 % (ohne Betauung) mit ZnSe-Fenstern	

* Falls Sie beabsichtigen. Ihr Spektrometer regelmäßig bei Temperaturen über 40 °C zu betreiben. empfehlen wir Ihnen. für eine optimale Messleistung die Wellenlängenkalibrierung bei der betreffenden Betriebstemperatur zu wiederholen. Lesen Sie dazu die Bildschirmhilfe Ihrer Softwareanwendung.

Entpacken des Spektrometers

VORSICHT

Gehen Sie bei der Aufstellung des Spectrum Two äußerst behutsam vor und befolgen Sie die Anleitungen des Handbuchs. Weitere Unterstützung finden Sie unter: www.perkinelmer.com/SpectrumTwoSupport.

Öffnen des Transportbehälters

Das Spektrometer wird in einem Transportbehälter geliefert und ist darin luftdicht in silberfarbener Folie verpackt, um die Fenster gegen Kondensation zu schützen.

1. Entnehmen Sie die Teile aus der Box und prüfen Sie anhand des Lieferscheins, ob neben dem Spektrometer folgende Objekte vorhanden sind:

Bestell-Nr.	Beschreibung	Menge
L9004169	USB-Kabel 2.0 (2 m)	1
L9002298	Netzgerät	1
L1202057	Polystyrol-Kalibrierfolie	1
L1600232	Spectrum Two J-Stopp-Kartensatz, bestehend aus: J-Stoppkarten 0,5 cm ^{-1} , 1 cm ^{-1} , 2 cm ^{-1} und 4 cm ^{-1} und einer Halbapertur-Karte.	1
LX108873 oder	Spectrum Standardsoftware, DVD	1
LX108941 oder	Spectrum Standardsoftware, USB-Stick	
LX108875	Spectrum ES-Software, DVD	
L1050280	Spectrum Two Installationsvideo, CD	1
L1050229	Spectrum Two Installationshandbuch (USB-Anschluss)	1
L1050242	Spectrum Two Handbücher, CD	1
L1250462	Methanküvette für AVI-Kalibrierung1(Nur Spectrum Two APV/AVI-Spektrometer)1	

Falls Teile fehlen oder beschädigt sind, verständigen Sie Ihren PerkinElmer-Kundenbetreuer oder suchen Sie Unterstützung auf <u>www.perkinelmer.com/SpectrumTwoSupport</u>.

2. Nehmen Sie behutsam das Spektrometer aus dem Transportbehälter, jedoch nicht aus seiner Schutzhülle. Heben Sie die Originalverpackung auf, für den Fall, dass Sie das Gerät an einen anderen Ort senden müssen.

VORSICHT	Das Spektrometer muss zunächst die Raumtemperatur annehmen und wird erst danach von seiner Hülle befreit, um so die Bildung von Kondensation auf den KBr-Fenstern zu vermeiden. Dies bedeutet eine Wartezeit von mindestens 3 Stunden nach der Entnahme aus der Box.
----------	---

3. Nachdem das Spektrometer die Raumtemperatur erreicht hat, kann seine Hülle entfernt und das Gerät auf den Arbeitstisch gestellt werden.

Lassen Sie an der Geräterückseite genügend freien Raum zum Anschlie0en der Kabel.

HINWEIS: Verbinden Sie Ihr Gerät erst dann per USB-Kabel mit dem PC, wenn der Software-Installationsassistent ausgeführt wurde.

Alle Zubehöre werden in getrennten Boxen geliefert.

Auswählen des Verbindungsmodus mit dem PC

HINWEIS: Verbinden Sie Ihr Gerät erst dann per USB-Kabel mit dem PC, wenn der Software-Installationsassistent ausgeführt wurde.

Das Spektrometer Spectrum Two wird mit einem USB-Kabel 2.0 und mit einem Netzgerät mit Gleichstromausgang geliefert. Das Netzkabel wird passend zu Ihrer Region geliefert.



Abb. 9. Mit dem Spectrum Two geliefertes Netzgerät und Anschlusskabel

Es bestehen vier Möglichkeiten zum Verbinden des Spektrometers:

- Direktes Verbinden mit dem PC via USB-Kabel.
 Dies ist die bevorzugte Art der direkten Verbindung mit dem PC. Das Spektrometer wid beim Starten der Software Spectrum automatisch konfiguriert.
- Direktes Verbinden mit dem PC via Ethernet-Kabel (nicht im Lieferumfang).
 Möchten Sie Ihr Spektrometer mit dem PC direkt über den Ethernet-Anschluss verbinden, lesen Sie im Administrator-Handbuch der Software, wie der Netzwerkadapter des PC zu konfigurieren ist. Wir empfehlen Ihnen, dies bereits vor der Installation der Software Spectrum, Spectrum ES oder AssureID durchzuführen.
- Verbinden mit dem PC anhand des PerkinElmer FTIR Wireless Router (L1600246, nicht im Lieferumfang).

Der optionale Wireless Router ermöglicht es, das Spektrometer entfernt vom PC zu betreiben. Dies erleichtert es, das Gerät in einem Abzugsschrank oder in einer Fertigungshalle zu bedienen.

Sobald Sie das Spektrometer über den PerkinElmer FTIR Wireless Router an den PC angeschlossen haben, wird es beim Starten der Spectrum-Software automatisch konfiguriert.

 Verbinden mit dem PC über ein Netzwerk mittels Ethernet-Port.
 Möchten Sie Ihr Spektrometer mit dem PC über ein Netzwerk mit Hilfe des Ethernet-Ports verbinden, lesen Sie im Administrator-Handbuch Ihrer Software, wie die IP-Adresse Ihres Geräts konfiguriert wird, sowie die Einzelheiten zum Spektrometer-Installationsassistenten.



Die Anschlüsse an der Rückseite des Spektrometers sind in Abb. 10 dargestellt.

Abb. 10. Kommunikations-Ports am Spectrum Two

Tab. 1	1. Komn	nunikatior	ns-Ports
--------	---------	------------	----------

	Port/LED	Verwendung
А	USB-Port	Standardinterface zwischen Spektrometer und PC.
В	ETHERNET	Ethernet-Anschluss.
	44	Standardinterface zwischen einem lokalen Netzwerk (LAN) und dem Spektrometer.
С	EXT DETECTOR Port	Stromversorgung für den optionalen Wireless Router oder Anschluss eines externen Zubehörs.
D	Rückseitige Anzeige-LED	Liefert Informationen zum Gerätestatus.
	5	S. Tab. 2 auf Selte 36.
E	DC-Anschluss	Der DC-Anschluss dient zur Gleichstromversorgung des Spektrometers. Sie können dafür entweder das Netzgerät und das mitgelieferte Kabel verwenden, den optionalen Batteriesatz oder den PKW-Anschlussadapter (12 V).

HINWEIS: Weitere Einzelheiten zu den Spektrometeranschlüssen finden Sie in *Anhang 1: Anschlussdetails*, auf Seite 116.

Installieren des Spectrum Two

HINWEIS: Verbinden Sie Ihr Gerät erst dann per USB-Kabel mit dem PC, wenn der Software-Installationsassistent ausgeführt wurde.

HINWEIS: Möchten Sie Ihr Spektrometer mit einem Ethernet-Kabel anschließen, müssen Sie den Netzwerkadapter des PC konfigurieren. Wir empfehlen Ihnen, dies bereits vor der Installation der Software durchzuführen.

Um Ihr Softwarepaket (Spectrum, Spectrum ES oder AssureID) zu installieren, legen Sie die mitgelieferte DVD in das geeignete Laufwerk oder stecken Sie den USB-Stick in die entsprechende Buchse und befolgen Sie die Anleitungen des Bildschirms.

Wählen Sie in der Software Spectrum und Spectrum ES als Installationstyp **Spectrum Two**.

Bei Bedarf finden Sie die Installationsanleitungen auch im Administratorhandbuch Ihrer Software, das sich auf der mitgelieferten *Spectrum Two Handbuch-CD* befindet.

Wenn Sie Ihren eigenen Computer benutzen, stellen Sie sicher, dass er die minimalen Hardware- und Softwaremerkmale aufweist, wie unter "PC-Anforderungen" im Administratorhandbuch angegeben wird.

Die Softwareanwendungen Spectrum und Spectrum ES sind auf deutsch, englisch, spanisch, französisch, italienisch, japanisch, portugiesisch und in vereinfachtem chinesisch verfügbar. Die zunächst angezeigte Sprache hängt von Ihrem Standort und von der Spracheinstellung im Betriebssystems Ihres PC ab.

Machen Sie sich während der Installation der Software mit den Anleitungen zum Verbinden Ihres Spektrometers via USB oder Wireless Router vertraut (Abb. 11). Schließen Sie danach Ihr Spektrometer an die Stromversorgung an und richten Sie die USB- oder kabellose Verbindung ein. Für andere Verbindungsmodi müssen Sie das Spektrometer noch nicht anschließen. Ausführliche Angaben finden Sie unter *Verbinden von Spektrometer und PC mit USB-Kabel* auf Seite 36 oder unter *Verbinden von Spektrometer und PC mit Wireless Router* auf Seite 37.

USB and Wireless Cor	nection Instructions	
For USB and wirele	ss connections please follow these	instructions:
 Connect instrume power to external de Ensure the front ii Connect USB fron If using WiFi join t 	nt power adapter to the mains and if tector port on rear of instrument usin nstrument LED is showing green. In instrument to PC or ethernet from in the PC to the Spectrum Two wireless i	applicable WiFi hub g supplied cable. nstrument to WiFi hub. network now.
(() ()		•
If using USB it is str otherwise the Spect to the instrument.	ongly recommended you click the Te rum software may be unable to autom Test USB	est USB' button natically connect
Once relevant conn proceed with the ins	ections have been made and tested of stallation.	click 'Continue' to Continue >

Abb. 11. Anleitungen für USB-Anschluss und kabellose Verbindung

Anschließen des Spektrometers an die Stromversorgung

Das Netzgerät des Spectrum kann ohne Voreinstellung an eine Stromversorgung von 50 oder 60 Hz im Bereich von 100 bis 230 V angeschlossen werden. Das benötigte Netzkabel wird passend zu Ihrer Region mitgeliefert.

HINWEIS: Falls am Kabel ein anderer Stecker befestigt werden muss, lesen Sie vorher den Abschnitt *Elektrische Sicherheit* ab Seite 14.

- 1. Stellen Sie das Spektrometer auf eine ebene Fläche in die Nähe einer Steckdose.
- 2. Stecken Sie den Anschlusskabel-Adapter des Netzgeräts in die Eingangsbuchse für 18 V DC an der Spektrometerrückseite. (Abb. 12).



Abb. 12. Eingangsbuchse für Gleichstrom an der Spektrometerrückseite

- 3. Verbinden Sie das Netzgerät anhand des mitgelieferten Kabels mit der Steckdose.
- 4. Schalten Sie das Gerät ein.

Das Spektrometer wird automatisch hochgefahren. Die Spannungsanzeige-LED an der Frontseite beginnt stetig grün zu leuchten.



Abb. 13. Spannungsanzeige-LED

Das Spektrometer wird initialisiert und ist anschließend bereit für die Kommunikation mit dem PC. Der Vorgang dauert etwa 2 Minuten; während dieser Zeit leuchtet die Diagnose-LED an der Geräterückseite in gelb, bis eine Reihe von Selbsttests abgeschlossen sind. Nachdem die Initialisierung beendet ist, beginnt die Diagnose-LED orangefarben zu blinken.

36 . Handbuch Spectrum Two

_			
LED	Anzeige	Status	
Spannungs- anzeige-LED (Frontseite)	Grün, stetig	Spektrometer eingeschaltet	
	Gelb, blinkend	Spektrometer im Stromsparmodus (softwaregesteuert)	
	Gelb, stetig	Spektrometer im Stromsparmodus (nicht softwaregesteuert)	
	Aus	Spektrometer stromlos Prüfen Sie, ob das Spektrometer an die Stromversorgung angeschlossen ist. Falls ja, gehen Sie ins Internet auf: www.perkinelmer.com/SpectrumTwoSupport	
Diagnose- LED (Rückseite)	Gelb, stetig	Spektrometer-Initialisierung mit Selbsttests	
	Orange, blinkend	Spektrometer unter Strom, Initialisierung abgeschlossen	
	Rot, blinkend	Spektrometer-Selbsttests fehlgeschlagen. Zugriff über die Software nicht möglich. Gehen Sie auf die Internetseite des Spectrum Two: www.perkinelmer.com/SpectrumTwoSupport	
	Aus	Spektrometer stromlos Prüfen Sie, ob das Spektrometer an die Stromversorgung angeschlossen ist. Falls ja, gehen Sie im Internet auf: www.perkinelmer.com/SpectrumTwoSupport	

Tab. 2. Status der Anzeige-LED

Bevor Sie Ihr Spektrometer mit einem PC verbinden, müssen Sie darauf die Software Spectrum, Spectrum ES oder AssureID installieren.

HINWEIS: Sobald Ihr Spektrometer für eine FTIR-Softwareanwendung konfiguriert wurde, ist es für alle auf dem PC installierten Softwarepakete von PerkinElmer verfügbar.

Verbinden von Spektrometer und PC mit USB-Kabel

Bevor Sie Ihr Spektrometer via USB-Kabel an den PC anschließen, müssen Sie darauf die Software Spectrum, Spectrum ES oder AssureID installieren. Außerdem muss der geeignete Treiber für die USB-Schnittstelle installiert sein.

Bei der Software Spectrum und Spectrum ES dürfen Sie das USB-Kabel erst dann einstecken, wenn der Software-Installationsassistent Sie dazu auffordert.

Falls Sie das Paket AssureID als eigenständige Software verwenden, ohne vorhergehende Installation von Spectrum mit Installationstyp **Spectrum Two**, müssen Sie zunächst die Treiber für die USB-Schnittstelle installieren. Einzelheiten dazu finden Sie im *AssureID Administratorhandbuch* (L1050019).
Im Folgenden wird beschrieben, wie bei der Software Spectrum und Spectrum ES die Verbindung zwischen Spektrometer und PC anhand des USB-Kabels 2.0 hergestellt wird.

1. Stecken Sie ein Ende des Kabels USB 2.0 in den USB-Port an der Rückseite des Spektrometers. (Abb. 14).



Abb. 14. USB 2.0 Kabelstecker und USB-Port an der Geräterückseite

- 2. Stecken Sie das andere Kabelende in einen USB-Port 2.0 an Ihrem PC.
- 3. Klicken Sie im Dialogfenster Anleitungen für USB- und Wireless-Anschluss auf USB testen.

Die Software überprüft, ob die USB-Treiber korrekt installiert sind und zeigt das Testergebnis an.



Abb. 15 Anleitungen für USB- und Wireless-Anschluss; Test bestanden

Falls der Test fehlschlägt, prüfen Sie, ob das Spektrometer an die Stromversorgung angeschlossen und anhand des USB-Kabels mit dem PC verbunden ist, und wiederholen Sie den Test.

Falls der Test erneut fehlschlägt, gehen Sie auf die Internetseite des Spektrum Two:

www.perkinelmer.com/SpectrumTwoSupport für weitere Informationen.

4. Klicken Sie auf **Fortfahren**, um die Installation der Software Spectrum nach Anleitungen des Bildschirms fortzusetzen und abzuschließen.

38 . Handbuch Spectrum Two

Sie sind nun dazu bereit, die Software Spectrum zu starten. Sobald Sie sich zum ersten Mal in der Software Spectrum mit dem via USB-Kabel angeschlossenen Spektrometer anmelden, wird das Spectrum Two automatisch installiert und konfiguriert.

HINWEIS: Mit der Software AssureID wird das Spektrometer wie in Abb. 14 angeschlossen, AssureID gestartet und danach der Spektrometer-Installationsassistent ausgeführt (S. Seite 42). Ausführliche Informationen finden Sie im *AssureID Administratorhandbuch* (L1050019).

Verbinden von Spektrometer und PC mit Wireless Router

Nachfolgend wird das Verbinden von Spektrometer und PC anhand des PerkinElmerkonfigurierten Wireless Router (nicht im normalen Lieferumfang) beschrieben. Der Wireless Router wird über den Port EXT DETECTOR an der Rückseite des Spectrum Two mit Strom versorgt. Das dazu benötigte Kabel wird mit dem Wireless Router geliefert.

HINWEIS: Falls Sie Ihr Gerät mit dem optionalen Batteriesatz (L1600233) betreiben, verkürzt die Stromversorgung des Wireless Router die Lebensdauer der Batterien.

- 1. Entpacken Sie den Wireless Router und stellen Sie ihn in die Nähe des Spektrometers.
- 2. Verbinden Sie anhand des mitgelieferten Kabels (L1602706) den Router mit dem Port EXT DETECTOR an der Spektrometerrückseite, wie in Abb. 16 gezeigt wird.



Abb. 16. Wireless Router, angeschlossen am EXT DETECTOR Port

3. Verbinden Sie ein Ende des Ethernet-Kabels mit dem ETHERNET-Port an der Rückseite des Spektrometers und das andere Ende mit einem der Ports 1 bis 4 an der Rückseite des Routers (Abb. 17).



Abb. 17. Ethernet-Kabel (blau), angeschlossen an Wireless Router und Spectrum Two

4. Stecken Sie den Adapterstecker des Anschlusskabels des Netzgeräts in die Buchse 18 V DC an der Rückseite des Spektrometers. (Abb. 18).



Abb. 18. Netzgerätbuchse an der Rückseite des Spektrometers

- 5. Verbinden Sie das Netzgerät des Spectrum Two mit der Steckdose.
- 6. Stellen Sie sicher, dass die Anzeige-LED an der Vorderseite des Spectrum Two grün leuchtet.

Ausführliche Angaben zum Hochfahren des Spektrometers finden Sie im Abschnitt *Anschließen des Spektrometers an die Stromversorgung* auf Seite 35.

7. Stellen Sie sicher dass die POWER-LED an der Vorderseite des Wireless Router ebenfalls grün leuchtet (Abb. 19).

Die Diagnose-LED des Routers leuchtet rot bei dessen Initialisierung.



Abb. 19. POWER-LED am Wireless Router

40 . Handbuch Spectrum Two

8. Warten Sie, bis die DIAG-LED am Router erlöscht und die WIRELESS-LED zu blinken beginnt.



Abb. 20. LEDs am Wireless Router zeigen dessen Betriebsbereitschaft an

 Schalten Sie Ihren PC ein und verbinden Sie ihn mit dem PerkinElmer FTIR Netzwerk. Sie müssen den mitgelieferten Netzwerk-Sicherheitsschlüssel an der Seite des Routers einstecken.

Not connected	е
Wireless Network Connection	^
PerkinElmer FT-IR Wireless	الد
Connect automatically	Connect

Abb. 21. Verbinden mit dem Netzwerk "PerkinElmer FT-IR Wireless" (Beispiel)

Die genaue Vorgehensweise zum Verbinden Ihres PC mit dem kabellosen Netzwerk hängt von Ihrer kabellosen Hardware und dem Betriebssystem des PC ab.

Sie sind nun dazu bereit, Ihre Softwareanwendung zu starten. Sobald Sie sich zum ersten Mal in der Software Spectrum mit einem Spektrometer Spectrum Two anmelden, das an den PC via WiFi-Verbindung angeschlossen ist, wird das Gerät automatisch für Sie installiert und konfiguriert.

HINWEIS: Für die Software AssureID wird das Spektrometer wie in den Schritten 1 bis 9 angeschlossen, AssureID gestartet und anschließend der Spektrometer-Installationsassistent (S. Seite 42) ausgeführt. Ausführliche Informationen finden Sie im *AssureID Administratorhandbuch* (L1050019).

HINWEIS: Obwohl Sie in einem kabellosen Netzwerk mehr als ein Spektrometer haben können - unter der Voraussetzung, dass jedes Gerät über eine eigene IP-Adresse verfügt - besteht immer nur der Zugriff auf jeweils ein Spektrometer. Die FTIR-Software von PerkinElmer unterstützt nicht die simultane Verbindung multipler Spektrometer mit demselben PC.

Verbinden von Spektrometer und PC mit einem Ethernet-Kabel

Möchten Sie Ihr Spektrometer mit dem PC direkt via Ethernet-Kabel (nicht im Lieferumfang) verbinden, müssen Sie:

1. Den PC-Netzwerkadapter für die Kommunikation mit Ihrem Spektrometer konfigurieren.

Zum Anschließen Ihres Spektrometers über ein Ethernet-Port müssen Sie die TCP/IP-Protokolle am PC so einstellen, dass sie kompatibel mit dem Spektrometer sind. Dies muss geschehen, *bevor* Sie Ihre FTIR-Software auf dem PC mit angeschlossenem Spektrometer starten.

Ist Ihr PC nicht in einem Netzwerk, müssen Sie als IP-Adresse **167 116 185 70** eingeben und als Subnet-Maske **255 255 0 0**.

Internet Protocol Version 4 (TCP/IPv4)	Properties ?
General	
You can get IP settings assigned auton this capability. Otherwise, you need to for the appropriate IP settings.	natically if your network supports ask your network administrator
Obtain an IP address automatical	y .
• Use the following IP address:	
IP address:	167 . 116 . 185 . 70
Subnet mask:	255.255.0.0
Default gateway:	· · ·
Obtain DNS server address autom	natically
• Use the following DNS server add	resses:
Preferred DNS server:	
<u>A</u> lternate DNS server:	· · ·
Vaļidate settings upon exit	Ad <u>v</u> anced
	OK Cancel

Die ausführliche Vorgehensweise ist im Administratorhandbuch Ihrer Software beschrieben.

2. Stecken Sie ein Ende des Ethernet-Kabels in den ETHERNET-Port an der Rückseite des Spektrometers (Abb. 22).



Abb. 22. Verbinden des Ethernet-Kabels mit dem ETHERNET-Port

3. Stecken Sie das andere Ende des Kabels in einen Ethernet-Port an Ihrem PC.

Sie sind nun bereit, die Software Spectrum zu starten. Sobald Sie sich zum ersten Mal in der Software Spectrum mit einem Spektrometer Spectrum Two anmelden, das an den PC via Ethernet-Verbindung angeschlossen ist, wird das Gerät automatisch für Sie installiert und konfiguriert. **HINWEIS:** Für die Software AssureID, konfigurieren Sie den PC-Netzwerkadapter, schließen Sie Ihr Spektrometer an, wie in Abb. 22 dargestellt, und führen Sie anschließend den Spektrometer-Installationsassistent durch (S. Seite 42). Ausführliche Informationen finden Sie im *AssureID Administratorhandbuch* (L1050019).

Verbinden von Spektrometer und PC über ein Netzwerk

Möchten Sie Ihr Spektrometer mittels Ethernet-Anschluss über ein Netzwerk mit dem PC verbinden, müssen Sie:

1. Dem Spektrometer anhand des SetIP-Hilfsprogramms eine eindeutige IP-Adresse zuordnen, die mit Ihrem Netzwerk kompatibel ist.

Starten Sie das Hilsprogramm mit einem Doppelklick auf **SetIP.exe** unter C:\Program Files\ PerkinElmer\ServiceIR oder C:\Program Files (x86)\PerkinElmer\ServiceIR.

HINWEIS: Damit Sie das Spektrometer anhand des SetIP-Hilfsprogramms an den PC anschließen können, muss die TCP/IP-Adresse des PC mit der IP-Adresse des Spektrometers kompatibel sein. Näheres finden Sie unter *Verbinden von Spektrometer und PC mit einem Ethernet-Kabel* weiter oben.

Geben Sie die aktuelle (oder standardmäßige) IP-Adresse Ihres Spektrometers ein. Standardadresse des Spektrometers ist **167 116 185 71**.

Sie können de	em Spectrum	Two auch	eine neue	IP-Adresse	zuordnen.
---------------	-------------	----------	-----------	------------	-----------

w IP Address Configuration Utility								
IP Address Configuration Utility								
Select this option to change the IP address of an instrument before installing it. You must ensure that the TCP/IP address and subnet mask of the PC are compatible with your instrument before continuing.								
For example, if the instrument subnet mask is 255,255,255,0 and the IP address is 167,116,185,71, the PC IP address must be 167,116,185,x (where x is a number between 0 and 255, but not 71); the subnet mask should be 255,255,0.0								
 Enter the IP address of the instrument 								
TCP/IP address: 167.116.185.71								
C Select from the list of currently installed instruments								
4. PerkinElmer FT-IR C86211								
Serial Number: C86211								
IP Address: 167.116.185.71								
Cancel Continue								

Wird ein Netzwerk benutzt, erhält der TCP/IP-Port des PC normalerweise automatisch eine Adresse vom DHCP-Server. Um über ein FTIR-Netzwerk mit dem Spektrometer zu kommunizieren, muss dieses über eine kompatible Netzwerkadresse verfügen.

Eine Subnet-Maske von **255 255 0 0** bedeutet, dass die ersten beiden Gruppen der IP-Adresse des Spektrometers zur IP-Netzwerkadresse passen müssen, die der DHCP-Server dem PC zugeordnet hat.

Wenn z. B. die IP-Adresse Ihres PC $195\,.\,112\,.\,170\,.\,255$ ist und die Subnet-Maske $255\,255\,0\,0$, dann muss die IP-Adresse Ihres Spektrometers $195\,.\,112\,.\,x\,.\,x$. sein.

Lesen Sie das Administrator-Handbuch mit ausführlichen Angaben.

2. Stecken Sie ein Ende des Ethernet-Kabels in den ETHERNET-Port an der Rückseite des Spektrometers (Abb. 14).



Abb. 23. Ethernet-Kabel, angeschlossen an den ETHERNET-Port

- 3. Verbinden Sie das andere Ende des Ethernet-Kabels mit dem Netzwerk-Router.
- 4. Fügen Sie in der Software das Spectrum Two anhand des Installationsassistenten hinzu und tragen Sie nach Aufforderung dessen IP-Adresse ein.

Spektrometer-Installationsassistent

Falls Sie Ihr Spektrometer an ein Netzwerk mittels Ethernet-Verbindung anschließen oder wenn Sie die Software AssureID zum Anschluss des Spektrometers verwenden, müssen Sie den Spektrometer-Installationsassistent ausführen.

Wenn Sie die Software AssureID benutzen, wählen Sie im Menü Werkzeuge aus der Gruppe Spektrometer und Zubehöre konfigurieren die Option Spektrometer konfigurieren.

Der Spektrometer-Installationsassistent startet.

ODER

Wenn Sie die Software Spectrum oder Spectrum ES verwenden, wählen Sie im Menü **Einstellungen** aus der Gruppe **Spektrometer** die Option **Spektrometer hinzufügen**. Der Spektrometer-Installationsassistent startet.

Details zum Spektrometer-Installationsassistent finden Sie im Administratorhandbuch der Software, das auf der *Spectrum Two Handbuch-CD* (L1050242) verfügbar ist.

Austauschen von Messzubehör

HINWEIS: Die vollständigen Anleitungen zur Installation und Benutzung Ihres Zubehörs finden Sie im entsprechenden Benutzerhandbuch, das als pdf-Datei auf der CD *Spectrum Two Handbücher* (L1050242) verfügbar ist.

1. Wenn Sie eine UATR-Einheit installieren, müssen Sie den Deckel des Probenraums abnehmen.

Öffnen Sie den Deckel, klappen Sie ihn nach oben und ziehen Sie ihn aus der Halterung. Stellen Sie den Deckel zur weiteren Verwendung an einen sicheren Ort.



Abb. 24. Entfernen des Probenraumdeckels

2. Entnehmen Sie das momentane Messzubehör, indem Sie die Basisplattform nach vorn aus dem Proberaum herausziehen.



Abb. 25. Entfernen des Messzubehörs

3. Wenn Sie eine UATR-Einheit installieren, setzen Sie das Zubehör auf den Vorsprung des Probenraums (Abb. 26a) und schieben Sie es nach hinten (Abb. 26b). Drücken Sie es fest, damit der obere Rand des Zubehörs bündig zur Spektrometerabdeckung sitzt.

Wurde das Zubehör zu weit vorne auf den Probenraumvorsprung gesetzt, kann es nicht richtig in seine Position gebracht werden.

HINWEIS: Stellen Sie sicher, dass die Transportsicherung am UATR-Anpressarm entfernt wurde. Desgleichen müssen die Abdeckungen an den Seiten des Zubehörs und der Staubschutz von der Oberplatte entfernt werden.



Abb. 26. Installieren des UATR-Zubehörs

ODER

Bei anderen Zubehören, die auf einer Basisplattform montiert sind, setzen Sie die Platte behutsam auf den Vorsprung der Führung (Abb. 27) und schieben Sie sie waagerecht in den Probenraum.

Drücken Sie das Zubehör fest hinein, damit der codierte Kontakt an der Unterseite der Basisplattform passend in die Buchse des Probenraums zu sitzen kommt.



Abb. 27. Installieren eines Messzubehörs im Probenraum des Spectrum Two

46 . Handbuch Spectrum Two

Die Software Spectrum erkennt automatisch das eingebaute Zubehör und zeigt dessen Parameter auf den Reitern der **Spektrometereinstellungen** an.

Actions	Settings		Scan Settings		
Restore Defaults	Abscissa Units Wavenumber	Start (cm-1) 4000	Resolution (cm-1)	Scan Type Sample	
Load and Save	Ordinate Units	End (cm-1) 515	Data Interval (cm-1)	Accumulations 4 Scans 💌	
	Accessory	Uni	iversal ATR		
	Item		Value		
	Crystals		Diamond		
	Bounces		1		
	Serial Number				
	UATR Options		Not Specified		

Abb. 28. Der Reiter "Spektrometereinstellungen" mit Parametern der UATR

Ausführliche Informationen zur Anwendung eines Zubehörs finden Sie im mitgelieferten Benutzerhandbuch. Für PerkinElmer-Zubehöre des SpectrumTwo befinden sich die Handbücher als pdf-Dateien auf der *Spectrum Two Handbuch-CD* (L1050242).

Transportieren des Spektrometers



Schalten Sie vor einem Transport das Spektrometer aus und ziehen Sie das Netzkabel aus der Steckdose.

Das Spektrometer kann anhand der Schalengriffe an den Seiten hochgehoben werden, wie in Abb. 29 zu sehen ist.



Abb. 29. Hochheben des Spectrum Two

Für einen Transport zwischen PKW und Laboratorium oder von einem Labor ins andere innerhalb des Hauses empfehlen wir, die Tragetasche des Spectrum Two (L9004199) zu benutzen.

Für einen Versand des Spektrometers oder für eine Rücksendung an PerkinElmer muss die Originalverpackung verwendet werden.

HINWEIS: Informationen zum Rücksenden Ihres Spektrometers finden Sie auf unserer Kundensupport-Website <u>www.perkinelmer.com/SpectrumTwoSupport</u>, sowie im *Anhang 3: Dekontamination und Reinigung* auf Seite 118.

Wird das Spektrometer zwischen verschiedenen Umfeldern bewegt, muss berücksichtigt werde, dass die KBr-Fenster des Spectrum Two trotz Schutzschicht gegen Feuchtigkeit infolge einer Ansammlung größerer Mengen an Kondensat in den Fensterrahmen angegriffen werden könnten.

Normalerweise ist das Spektrometer Spectrum Two innerhalb von 15 Minuten nach seinem Einschalten betriebsbereit. Wurde das Gerät jedoch aus einem deutlich wärmeren Raum in ein kälteres Umfeld gebracht, sollte während der ersten Betriebsstunden vor jeder Probe ein Untergrundspektrum aufgenommen werden.

48 . Handbuch Spectrum Two

~>

<u>Einführung in die</u> Software Spectrum

Überblick

In diesem Abschnitt werden grundlegende Funktionalitäten der Software Spectrum beschrieben, um Sie vom Starten der Software bis zum Datenexport zu unterstützen und Ihnen bei Bedarf ergänzende Informationen zu liefern. Es wird angegeben, wie Sie:

- Sich in der Software Spectrum anmelden
- Sich mit der gestaltungsfreien Spectrum-Arbeitsfläche vertraut machen und auf weitere verfügbare Benutzerunterstützung zugreifen können: Bildschirmhilfen, Lernprogramme und Internetseite für Kundensupport
- Überprüfen, ob die Komponenten Ihres Spektrometers richtig funktionieren
- Eine einfache Probenmessung durchführen
- Die Qualität Ihrer Spektren überprüfen/verbessern
- Ihre Daten in der Software Spectrum bearbeiten
- Aus der Software Spectrum Daten extrahieren
- Erweiterte Einstellungen des Spektrometers ändern
- Mit dem Stromsparmodus Energie sparen
- Erkennen, ob Ihr System erwartungsgemäß arbeitet
- Die Software Spectrum beenden und Einstellungen speichern.

Starten der Software Spectrum

1. Stellen Sie sicher, dass das Spektrometer mit der Stromversorgung verbunden ist.

Die LED muss grün leuchten. Leuchtet die LED an der Gerätefrontseite in orange und möchten Sie das Spektrometer sofort einschalten, drücken Sie zwei Sekunden lang den Netzschalter an der Vorderseite, bis die LED grün leuchtet.

Das Spektrometer führt eine Initialisierung durch, die etwa 2 Minuten dauert.

HINWEIS: War das Spektrometer Spectrum Two über Nacht ausgeschaltet, ist es innerhalb 15 Minuten nach dem Einschalten betriebsbereit. Wurde das Gerät jedoch aus einem deutlich wärmeren Raum in ein kälteres Umfeld gebracht, sollte während der ersten Betriebsstunden vor jeder Probe ein Untergrundspektrum aufgenommen werden.

2. Wählen Sie im Start-Menü die Option Programme, danach die Gruppe PerkinElmer Applications, die Untergruppe Spectrum und darin die Anwendung Spectrum.

ODER

Klicken Sie doppelt auf das Desktop-Symbol



Das Startbild der Software Spectrum wird eingeblendet, gefolgt von einem Dialog, der Ihre Anmeldedetails anfordern kann:

PerkinElmer Login
Enter your user name and password.
<u>U</u> ser name
Password
⊆hange Password
OK Cancel

3. Falls erforderlich, geben Sie Ihren Benutzernamen und Ihr Passwort ein und klicken Sie auf OK.

Standardeingaben für Benutzernamen und Passwort sind Administrator und bzw. administrator.

Falls Sie bereits eine Spektrometereinstellung in der Software Spectrum oder AssureID für diesen Benutzer auf dem gleichen PC durchgeführt haben, könnte der Dialog Spektrometer verbinden eingeblendet werden, obwohl für das Spektrometer Automatisch verbinden eingestellt wurde. Ist die Einstellung Automatisch verbinden aktiviert, wird die Software den PC automatisch mit dem Spectrum Two verbinden.

Instrument Connecti	on							
Select an instrument to work with and press 'Connect'								
Instrument:	PerkinElmer FT-IR C86199	Connect						
	or click here to work offline	Cancel						
	Always connect to this Instrument	Help						
Connection Status:	Currently Offline							

HINWEIS: Wir empfehlen Ihnen, bei der ersten Anmeldung in der Software Spectrum einen neuen Benutzernamen und ein neues Passwort zu erzeugen.

4. Wählen Sie in der Liste **Spektrometer** das gewünschte Arbeitsgerät aus und klicken Sie auf **Verbinden**.

ODER

Falls Sie zuvor aufgenommene Daten weiter bearbeiten möchten, ohne das Spektrometer zu benutzen, klicken Sie auf **offline zu arbeiten**.

Die Software startet. Sind Sie zum ersten Mal mit Ihrem Spektrometer verbunden, werden zunächst die **Spektrometer-Komponententests** ausgeführt.

Routh Summour	
Hesuit Summary.	
Details	((
Check	Result
Tests Completed Successfully	
Power Supply	
Laser Detector	✓
Laser	✓
Interferometer	
Solenoids	✓
Scan Motor	✓
Test Scan	✓
Laser Alignment	✓
Opto-Interrupt	✓
IR Detector	✓
Source	✓
Humidity	 Image: A set of the set of the
IR Throughput	1
Main Board	
Memory	1
Line Voltages	 Image: A set of the set of the
Programmable Potentiometers	_
Recommended Action	
All component checks have passed.	

 Sind alle Tests erfolgreich verlaufen, klicken Sie auf OK.
 Sie sind jetzt bereit, mit dem Spektrometer Daten aufzunehmen.
 Wurde bei den Tests ein Problem erkannt, lesen Sie die ausführlichen Angaben unter Spektrometer-Komponententests auf Seite 81.

Die Spectrum-Arbeitsfläche

In Abb. 30 ist das Fenster PerkinElmer Spectrum mit dem standardmäßigen Layout für ein Spectrum Two dargestellt.



Abb. 30. Das Fenster "PerkinElmer Spectrum"

Α	Globale Werkzeugleisten	F	Navigationsleiste
в	Datenexplorer	G	Graphikleiste
С	Ansichtsfenster	н	Prozessleiste
D	Informationsleiste	I	Statusleiste
Е	Dialogleiste		

Das Fenster ist in vier Bereiche unterteilt:

- Das Ansichtsfenster (C) in der Mitte, wo Spektren oder Ergebnisse dargestellt werden.
- Der Datenexplorer (B) an der linken Seite, zur Handhabung Ihrer Spektren.
- Die Navigationsleiste (F) an der rechten Seite, mit Funktionssymbolen.
- Die Dialogleiste (E), unterhalb des Ansichtsfensters, zur Eingabe von Parameterwerten und Informationen, z. B. beim Einstellen des Spektrometers.

Um eine Leiste zu öffnen oder zu schließen, klicken Sie auf

HINWEIS: Sie können per Mauszug die Größe der Leisten beliebig verändern.

Ansichtsfenster

Das Ansichtsfenster (C) verfügt über verschiedene Reiter, die abhängig davon eingeblendet werden, ob ein einzelnes Spektrum oder der Inhalt eines Spektrenordners dargestellt wird. Die Spektrenordner sind im Datenexplorer als Verzeichnisse angegeben. Es können weitere Reiter hinzugefügt werden, um z. B. die Ergebnisse von Prozessen wie Suchen, Compare oder Quant darzustellen.

54 . Handbuch Spectrum Two

Während der Datenaufnahme kann im Ansichtsfenster der Reiter Live-Darstellung eingeblendet werden, welcher das erzeugte Spektrum in Echtzeit darstellt.

Datenexplorer

Der Datenexplorer (B), an der linken Seite, dient zum Verwalten der Spektren.

Im Datenexplorer ausgewählte Spektren werden im Ansichtsfenster dargestellt.

Anhand des Datenexplorers haben Sie auch Zugriff auf die Probenliste, die es ermöglicht multiple Proben für die Datenaufnahme einzurichten.

Navigationsleiste

Die Navigationsleiste (F), an der rechten Seite, enthält Funktionssymbole.

Die Optionen für **Einstellungen** sind die gleichen, wie jene im Hauptmenü **Einstellungen**. Die Optionen für **Berechnungen** und **Spektrenbibliotheken** auf der Navigationsleiste bieten die Möglichkeit, eine Liste verfügbarer Gleichungen und Bibliotheken einzusehen.

Sie können die Symbole der Navigationsleiste neu ordnen, um leichter auf jene zugreifen zu können, die häufiger benutzt werden. Ein Verschieben ist einfach per Mauszug möglich.

Dialogleiste

Die Dialogleiste (E) im unteren Fensterbereich dient zum Ändern von Parametern oder zur Eingabe von Informationen, z. B. bei Spektrometereinstellungen.

Der Inhalt der Dialogleiste entspricht dem ausgewählten Symbol auf der Navigationsleiste.

Globale Werkzeugleisten

Am oberen Rand der Arbeitsfläche befinden sich die globalen Werkzeugleisten (A), wozu die Datei-Leiste und die Datenaufnahme-Leiste gehören, die standardmäßig eingeblendet werden, sowie die optionale Leiste mit Spektrometereinstellungen.

HINWEIS: Die Spectrum-Werkzeugleisten können individuell benutzerdefiniert gestaltet werden und es können neue Werkzeugleisten hinzugefügt werden. Ausführliche Informationen dazu finden Sie bei den Bildschirmhilfen und im Lernprogramm **Benutzerdefinierte Werkzeugleisten**. Darauf können Sie im Hilfe-Menü der Software Spectrum zugreifen.

Graphik- und Prozessleisten

Die Graphikleiste (G) enthält einige Werkzeuge, die es Ihnen ermöglichen, die Darstellung Ihrer Daten wunschgemäß zu ändern und zu beschriften. Die Prozessleiste (H) enthält Werkzeuge, die den Zugriff auf Befehle zur Weiterbearbeitung der Daten ermöglichen.

HINWEIS: Die Spectrum-Werkzeugleisten können individuell benutzerdefiniert gestaltet werden und es können neue Werkzeugleisten hinzugefügt werden. Ausführliche Informationen dazu finden Sie bei den Bildschirmhilfen und im Lernprogramm **Benutzerdefinierte Werkzeugleisten**. Darauf können Sie im Hilfe-Menü der Software Spectrum zugreifen.

Informationsleiste

Die Informationsleiste (D) befindet sich im Ansichtsfenster unterhalb der Graphik. Sie zeigt den Probennamen an, wenn anhand des Datenexplorers ein einzelnes Spektrum ausgewählt wurde oder den Verzeichnisnamen, wenn multiple Spektren aufgerufen wurden.

Statusleiste

Die Statusleiste (I) befindet sich am unteren Bildschirmrand. Sie enthält Informationen für den Benutzer, aktuelle Meldungen und die Anzeige des momentanen Spektrometerstatus.



Abb. 31. Statusleiste der Software Spectrum

Verwenden der Spectrum-Bildschirmhilfen

Benutzen Sie das Spectrum-Hilfesystem für weitergehende Informationen betreffend die Anwendung der Software zum Steuern, Einstellen und Optimieren Ihres Spektrometers.

Klicken Sie zum Öffnen der Hilfe-Datei im Menü **Hilfe** auf **Inhalt.** Das Menü enthält auch Lernprogramme **(Online-Einführungen)** und Informationen zur Software (**Über**).

Help					
<u>C</u> ontents					
Index					
<u>S</u> earch					
<u>T</u> utorials +		Tutorial 1: An Introduction to Spectrum			
About		Tutorial 2: Setting Up Your Instrument			
		Tutorial 3: Collecting Spectra			
		Tutorial 4: Processing Your Data			
Tutorial <u>5</u> : Comparing Spectra		Tutorial 5: Comparing Spectra			

Abb. 32. Hilfe-Menü in der Software Spectrum

Vermessen von Proben

Wenn Sie erstmalig die Verbindung zu Ihrem Spectrum Two erstellen, wird das Spektrometer Standardeinstellungen aufweisen, die für die meisten Applikationen geeignet sind. Der Scan-Bereich ist vorab auf 4000 bis 450 cm⁻¹ eingestellt.

Die Datenaufnahmeleiste (Abb. 33) wird standardmäßig am oberen Rand der Arbeitsfläche eingeblendet und enthält die Werkzeuge, die Sie zum Aufnehmen des Spektrums einer Probe benötigen. Sie finden diese Befehle auch im Menü **Datenaufnahme**.

-	Sample ID	Descriptio	n				322			Ensure beam path is clear	
	Administrator 02	Sample	¥	Preview			1205	▼		Press [Scan] to continue	
					Scan	Halt	Scanalyze	Backgr	round		7

Abb. 33. Datenaufnahmeleiste des Spectrum Two

1. Falls gewünscht, tragen Sie einen eindeutigen **Probennamen** und eine **Beschreibung** Ihrer Probe in die Leiste ein.

Alternativ können Sie die Funktion **Autonamen** dazu verwenden, für jede Probe bei der Datenaufnahme automatisch einen Namen und eine Beschreibung einzugeben. Standardmäßig ist dies [Benutzername]_nnn, Sie können jedoch die Funktion auf dem Reiter Spektrometereinstellungen unter Datenaufnahme beliebig konfigurieren. Näheres dazu finden Sie in den Spectrum-Bildschirmhilfen.

2. Wenn eine Untergrundaufnahme erforderlich ist, weist das Befehlssymbol **Start** eine kleine Untergrundmarkierung auf. Räumen Sie den Lichtweg frei oder setzen Sie ein

geeignetes Untergrundmaterial in den Strahlengang und klicken Sie auf 🖾, um ein Untergrundspektrum aufzunehmen.

Falls Sie ein ATR-Zubehör verwenden, stellen Sie sicher, dass der Kristall vor der Untergrundaufnahme gereinigt ist.

Das Untergrundspektrum wird kurz eingeblendet, danach ist das Ansichtsfenster bereit für die Darstellung Ihrer Probenspektren.

3. Setzen Sie Ihre Probe in das Spektrometer und klicken Sie auf

Während der Probenmessung wird das Spektrum standardmäßig im Ansichtsfenster auf dem Reiter **Live-Darstellung** angezeigt.

Das vollständige Spektrum wird auf dem Reiter **Graphik** im Ansichtsfenster dargestellt (Abb. 34) und im Datenexplorer dem aktuellen Spektrenverzeichnis hinzugefügt. Ihr Spektrum wird automatisch gespeichert. S. dazu *Automatisch speichern* auf Seite 72 mit ausführlichen Angaben.

Die Ergebnisse der Akzeptanztests, die standardmäßig auf dem Reiter **Erweiterte Spektrometereinstellungen** aktiviert sind, werden zusammen mit den spektralen Ergebnissen dargestellt. S. dazu *Akzeptanztests* auf Seite 59 mit näheren Angaben.

HINWEIS: Wenn das Kästchen **Vorschau zeigen** in der Datenaufnahmeleiste aktiviert ist, wird das Spektrum zunächst im Ansichtsfenster auf dem Reiter **Live-Darstellung** angezeigt. Diese Aufnahme in Echtzeit wird laufend aktualisiert, die Daten werden jedoch nicht erfasst. Dadurch können Sie überprüfen, ob Ihre Probe für die Messung geeignet ist oder – im Fall eines ATR-Zubehörs – feststellen, ob ein guter Kontakt zwischen Probe und Kristall besteht. Sind Sie mit dem Spektrum zufrieden, klicken

Sie auf

um die Datenerfassung zu starten.

Möchten Sie aus irgendeinem Grund die Datenaufnahme abbrechen, klicken Sie auf 🦰.



Abb. 34. Aufgenommenes Spektrum, dargestellt im Ansichtsfenster

Möchten Sie die standardmäßigen Spektrometereinstellungen ändern, klicken Sie im Menü **Einstellungen** auf **Spektrometer**, um die Reiter **Spektrometereinstellungen** einzublenden. Ausführliche Angaben dazu finden Sie unter *Spektrometereinstellungen* auf Seite 78.

Akzeptanztests

Die Akzeptanztests erkennen mögliche Probleme in den aufgenommenen Spektren und erbringen Vorschläge zur Verbesserung der Messung.

Die Auswahl der Akzeptanztests erfolgt auf dem Reiter **Erweiterte Einstellungen** (Abb. 35). Wählen Sie einfach auf dem Reiter in der Liste der **Akzeptanztests** jene aus, die Sie durchführen möchten, indem Sie das betreffende Kästchen aktivieren. Passen Sie bei Bedarf die Schwellenwerte für Testergebnisse anhand der Schiebebalken an Ihre Applikation an.

Um mehr Informationen zu einem individuellen Test zu erhalten, klicken Sie doppelt auf seinen Namen in der Liste und die Akzeptanztest-Hilfen werden eingeblendet.

Setup Instrument Au	to-Name Setup Instrument Data Coll	ection Setup Instru	iment Bean	nPath Setup Instrument Ad	/anced	Setup Instrument Basic
	Advanced Settings	Quality Checks				
ToolBox	CO2/H2O	Name	Include	Range		411 01 1 01
		Baseline High	V	80 95	<u>n</u>	All Checks Off
	AVI	Baseline Low	1	50 — 75		
	Look Ahead	Baseline Sloping	V	50 65	≡ſ	
		High Noise	V	10 - 60		Restore Defaults
	Scan Speed (cm/s)	Strong Band	V	30 50		
	0.2	Weak Band	V	25 35		
	Phase Correction	Stray Light	1	30 — 70		
	Magnitude 💌	Water Vapor	V	80 95		
	Apodization	Carbon Dioxide	V	50		
	Strong	Vignetting	1	0 70		
		Fringes	1	40 70		
	Scan Start Delay (s)	Blocked Beam	V	99		
	0	Negative Bands	V	30 — 70	-	

Abb. 35. Der Reiter "Erweiterte Einstellungen" der Software Spectrum

Beim Aufnehmen Ihres Spektrums werden die ausgewählten Tests durchgeführt und ein Leuchtsignal in grün 👓 , braun 👓 oder rot 👓 zeigt das Ergebnis an.

Signal	Ergebnis	Erläuterung
	Bestanden	Die Qualität des Spektrums ist zufriedenstellend.
000	Vorsicht	Es besteht ein Problem, das Sie untersuchen sollten, um die Qualität der aufgenommenen Spektren zu verbessern.
888	Warnung	Es besteht ein ernsthaftes Problem, das Sie zu lösen versuchen sollten, bevor Sie weitere Spektren aufnehmen.

Das Ergebnis wird in der Ergebnistabelle dargestellt und für ein einzelnes Spektrum erscheint eine Meldung in der Informationsleiste. Z. B. "Die Akzeptanztests ergaben mehrere Warnungen für diese Probe" (Abb. 36).



Abb. 36. Ergebnis der Akzeptanztests, angezeigt in der Informationsleiste

Um zu sehen, welche Akzeptanztests bestanden und bei welchen ein Problem erkannt wurde, öffnen Sie im Ansichtsfenster den Reiter **Protokoll** und gehen Sie den Abschnitt Akzeptanztests durch (Abb. 37).

Quality	Checks
Setting	Value
Water Vapor	Passed
Carbon Dioxide	Passed
Baseline Low	Passed
Baseline High	Warning
Baseline Slope	Passed
Strong Bands	Passed
Weak Bands	Passed
High Noise	Passed
Fringes	Warning
Vignetting	Passed
Blocked Beam	Passed
Negative Bands	Passed
Zero Transmission	Passed
Stray Light	Passed
Window Cutoff	Passed

Abb. 37. Der Reiter "Protokoll" mit individuellen Ergebnissen der Akzeptanztests

Rufen Sie bei jedem fehlgeschlagenen Test die Bildschirmhilfe mit Vorschlägen für eine Problembehebung auf.

Weiterbearbeitung von Spektren

Wählen Sie zur weiteren Bearbeitung Ihrer Daten in der Software Spectrum anhand des Datenexplorers Ihr Spektrum und im Menü **Prozesse** (Abb. 38) die gewünschte Option aus.



Abb. 38. Das Menü "Prozesse" in der Software Spectrum

Wurden die Spektren bearbeitet und dabei neue Spektren erzeugt, werden diese im Datenexplorer mit dem Anhang _n an ihrem Dateinamen hinzugefügt, um einen eindeutigen Probennamen zu erzeugen. Die durch Bearbeitung erzeugten Spektren werden nicht automatisch gespeichert. Informationen zum Speichern der Spektren finden Sie unter *Spektren speichern* auf Seite 72.

HINWEIS: Angaben zu einzelnen Prozessen finden Sie bei den Spectrum-Bildschirmhilfen.

Spektrale Korrekturen

Einige Prozesse der Software Spectrum ermöglichen es, die Spektren nach Ihrer Erfassung zu berichtigen. So gibt es z. B. Befehle zur Umwandlung der Ordinateneinheit, wie: Absorption, **%Transmission**, Kubelka–Munk und XConvert.

Sie können auch einen Basislinienanstieg in Ihren Spektren korrigieren; dafür gibt es zwei Möglichkeiten: automatische **Basislinienkorrektur** oder **Interaktive Basislinienkorrektur**. Letztere erlaubt es, für die Korrektur Basislinienpunkte festzulegen (Abb. 39).





HINWEIS: Das Lernprogramm **Auswertung Ihrer Daten** enthält die Beschreibung der Umwandlung von Ordinateneinheiten, der Basislinienkorrektur, sowie der Bandendetektion und Peakbeschriftung.

Identifizierung

Einige der Prozesse der Software Spectrum können dabei helfen, Ihre Probe zu identifizieren.

Peaktabelle

Die Ergebnisse einer **Peaktabelle** können dazu dienen, die Werte mit jenen anderer Proben zu vergleichen, z. B. mit solchen, die in einer Pharmakopöe angegeben sind. Die Ergebnisse des Prozesses werden im Ansichtsfenster auf dem Reiter **Peaktabelle** dargestellt (Abb. 40).

Samples View 16 Result	s Table Peak Table		
Source Spectrum Results:	List of Peaks		
F Spectrum Name	🛃 Peak Name	×	Y
▶ acetone-A	▶ 1	3414.28	84.14
	2	3004.68	74.54
	3	1715.85	6.35
	4	1421.07	62.77
	5	1363.03	26.03
	6	1222.37	23.67
	7	1092.54	78.47
	8	902.59	84.59
	9	530.24	58.83

Abb. 40. Der Reiter "Peaktabelle"

Klicken Sie im Menü Einstellungen auf Bandendetektion, um den Reiter Einstellungen der Bandendetektion einzublenden und darauf die Schwellenwerte und den Algorithmus für die Bandenerkennung festzulegen.

HINWEIS: Sie können dem Spektrum auch Peakbeschriftungen hinzufügen, unter Verwendung der gleichen Schwellenwerte, anhand der Option **Bandenbeschriftung** im Menü **Ansicht**.

COMPARE

Der Prozess **COMPARE** bewertet die Ähnlichkeit zwischen Spektren durch Vergleichen mit einem Referenzspektrum oder anderen Spektren und dient zur Bestätigung der Identität einer Probe. Die Ergebnisse des Prozesses werden im Ansichtsfenster auf dem Reiter **COMPARE** dargestellt (Abb. 41).

Sample	s View 9 Results	Table Compare						
Source Spectra Compare Results:				List of	Compared Reference	BS:		
1	Sample Name	Best Hit	Correlation	Pass / Fail	1	Sample Name	Correlation	Pass / Fail
1 →	Polystyrple card	G:\\E1ssion.sp	0.997242	Pass	1 →	G:\\E1ssion.sp	0.997242	Pass
•				•				

Abb. 41. Der Reiter "COMPARE"

In unserem Beispiel wurde die Identität des Spektrums mit dem Referenzspektrum bestätigt, innerhalb einer vorgegebenen Korrelation von 0,98. Das erhaltene Korrelationsergebnis ist größer als 0,99, wobei eine Korrelation 1,00 bedeutet, dass Spektren völlig identisch sind.

HINWEIS: Das Beispiel eines Reports mit COMPARE-Ergebnissen finden Sie im Abschnitt *Reporterstellung* auf Seite 76.

Die Parameter für den Prozess COMPARE werden auf dem Reiter **COMPARE-Einstellungen** festgelegt.

Klicken Sie im Menü Einstellungen auf die Option Compare, um den Reiter COMPARE-Einstellungen einzublenden.

Auf dem Reiter **COMPARE Standards** (Abb. 42) können Sie eine Datei oder einen Ordner mit Spektren aufrufen. Danach können Sie die Schwellenwerte für die Korrelation und/oder Diskriminierung festlegen, um zu entscheiden, welches Ergebnis als bestanden oder fehlgeschlagen gilt.

Die **Korrelation** kennzeichnet den Grad der Ähnlichkeit zwischen den Spektren, wobei 1 Identität und 0 völlige Verschiedenheit bedeuten. Die **Unterschiedlichkeit** stellt sicher, dass die beste Ähnlichkeit klar von der zweitbesten getrennt ist. Ihr Wert entspricht dem Unterschied zwischen den Korrelationswerten der ersten beiden Ergebnisse auf dem Reiter **COMPARE**.

Nur die Dateien und Ordner, bei denen **Benutzen** aktiviert ist, werden bei dem COMPARE-Prozess verwendet.

		Setup Compare Parameters	Setup Compare References
Path	Correlation	Include	Δdd -
G:\E1_05_Polystyrene_Filter_Wheel_Transmission.sp	0.98		
			Remove
			Clear
			Pass/Fail
			Correlation
			Discrimination

Abb. 42. Einstellungen auf dem Reiter "COMPARE Standards"

Auf dem Reiter **COMPARE Einstellungen** (Abb. 43) können Sie einen begrenzten Bereich Ihres Spektrums festlegen, der mit den Referenzspektren zu vergleichen ist und Filter

64 . Handbuch Spectrum Two

anwenden, die versuchen, spektrale Differenzen auszuschließen, die nicht relevant für Unterschiede zwischen Proben sind, sondern auf Verschiedenheit von Spektrometern oder von Umgebungsbedingungen beruhen. Nähere Angaben finden Sie bei der Spectrum-Bildschirmhilfe.

		Setup Compare	e Parameters	Setup Compare References
Filters to apply		Spec	tral range	
 Resolution weighting (1) Intensity weighting (2) 	CO2 blanking (4)	۹	Use overlap re	egion
Noise weighting (3)	H20 weighting (6)	Ô	Use defined ra	ange
Maximum number of comparisons to	o display		End	1000.0

Abb. 43. Der Reiter "COMPARE Einstellungen"

HINWEIS: Das Lernprogramm **Spektren vergleichen** liefert ein Beispiel für den COMPARE-Prozess, bei welchem das Ergebnis einer Spektrensubtraktion (anhand des Prozesses Differenz) mit einem Referenzspektrum verglichen wird.

Suchen

Der Prozess **Suchen** dient zum Bestätigen der Identität einer unbekannten Probe durch Vergleichen mit Referenzspektren oder mit einer Spektrenbibliothek. Die Ergebnisse werden im Ansichtsfenster auf dem Reiter **Suche**n dargestellt (Abb. 44).

Sample	es View 1 Results	Table Search					
Source	e Spectra Search Re	sults:			Search	n Hit List	
1	Sample Name	Search Best Hit	Search Best Hit De	scription	(F	Search Score	Search Reference S
1	mix-A_1	F99999	ACETOPHENONE		1)	0.905602	ACETOPHENONE
					2	0.696152	2-METHYLACETOP
					3	0.606248	4-CHLOROACETOF
					4	0.503046	BENZALACETONE
					5	0.413165	3,4-DIMETHOXYAC
					6	0.402537	2-METHOXYACETO
					7	0.377155	3-METHYLACETOP
					8	0.354067	1-ACETONAPHTHC
					-	0 22051	
							Ассер

Abb. 44. Der Reiter "Suchen"

Oben links wird unter **Quelldatensätze** der beste Treffer der Suche dargestellt. In unserem Beispiel war es Azetophenon. Für jedes Quellspektrum werden rechts unter **Gefundene ähnliche Spektren** die Liste aller Ergebnisse der Suche dargestellt, geordnet nach fallenden Korrelationsfaktoren. Möchten Sie einen alternativen Treffer auswählen, klicken Sie darauf und anschließend auf die Schaltfläche **Als besten Treffer akzeptieren**.

Die Spektren bester Treffer werden auf dem Reiter Suchen links unten graphisch dargestellt.

HINWEIS: Sie können den Prozess **Suchen** auch bei einer Gemisch-Suche verwenden. Näher Informationen dazu finden Sie in der Spectrum-Bildschirmhilfe.

Die für den Suchprozess verwendeten Parameter werden auf den Reitern **Einstellung der SEARCH-Parameter** und **Spektrenbibliotheken** festgelegt.

Klicken Sie im Menü Einstellungen auf Bibliotheken und Suchprozess, um die Reiter Einstellung der SEARCH-Parameter und Spektrenbibliotheken einzublenden. Wählen Sie auf dem Reiter **Spektrenbibliotheken** (Abb. 45) die Dateien oder Ordner aus, die als spektrale Bibliothek in den Suchprozess einzuschließen sind. Bei diesen müssen Sie das Kästchen **Einschließen** aktivieren.

					Setup Search Parame	ters Setup Spectral Libraries
	Name	Description	Write Protected	Include	Path	
R	Library 1				C:\pel_data\libs	Add
\$	TUTORLIB		V		C:\pel_data\libs\Mirlib.dlb	Remove
						Clear
						Details
						Details

Geben Sie auf dem Reiter **Einstellung der SEARCH-Parameter** (Abb. 46) die Höchstzahl bester Treffer ein, die auf dem Reiter **Suchen** anzuzeigen sind, wenn der Suchprozess durchgeführt wird. Standardmäßig wird Ihr Spektrum mit jedem Referenzspektrum im gesamten überlappenden Wellenlängenbereich verglichen. Falls Sie nur an einem speziellen Bereich Interesse haben oder bestimmte Bereiche der Referenzspektren ausschließen möchten, wählen Sie **Festgelegte Bereiche verwenden** und tragen Sie Werte für **Von** und **Bis** ein, um diese Bereiche zu definieren.

			Setup Search Parameters	Setup Spectral Libraries
Reporting	Spectral range	Blank	Regions	
Number of se to display	earch hits	egion Sta	art End	Add Region
	Use defined rate	ange		
10	0 🗢 Start	4000.0		Remove
	End	1000.0		

Abb. 46. Der Reiter "Einstellung der SEARCH-Parameter"

Die in der Software Spectrum verfügbaren Bibliotheken sind auf der Navigationsleiste unter **Spektrenbibliotheken** aufgelistet. Klicken Sie doppelt auf das Bibliothekssymbol, um Ihre Bibliothek zu verwalten (für benutzerdefinierte Bibliotheken können Sie Spektren entfernen oder hinzufügen) oder um Informationen zur Bibliothek oder den Spektren zu sehen (Abb. 47). So können Sie z. B. alle Eigenschaften sehen, die einem Spektrum oder der Abbildung einer Struktureinheit zugeordnet sind.



Abb. 47. Bibliotheksdetails

HINWEIS: Das Lernprogramm **Suchen** liefert das Beispiel einer Anwendung des Suchprozesses zur Identifizierung der Verunreinigung einer unbekannten Probe.

Quantifizierung

Peak-Fläche/Höhe

Der Prozess Peak-Fläche/Höhe dient zum Erstellen einer Tabelle mit den Peakflächen und/oder Peakhöhen Ihres Spektrums oder Ihrer Spektren. Sie können den Prozess mit einzelnen Spektren durchführen oder nach Festlegung der Parameter an einem Spektrum, die Tabellen für mehrere Spektren erstellen.

Die Höhe kann als ein Punkt (**Höhe**) oder als maximale Höhe zwischen zwei Punkten (**Maximale Höhe**) definiert werden. Die **Basispunkte** ermöglichen es, die Basislinie für die Bestimmung der Fläche oder Höhe der Peaks festzulegen.



Abb. 48. Das Dialogfenster "Peak-Fläche/Höhe"

Nach der Durchführung des Prozesses **Peak-Fläche/Höhe** werden die Ergebnisse auf dem Reiter **Peaktabelle** angezeigt (Abb. 40).

Quant

Der Prozess **Quant** dient zur Quantifizierung der Eigenschaften einer Probe anhand einer oder mehrerer Quant-Methoden, die mit Hilfe der Softwareroutine Spectrum Quant-Erzeuger erstellt werden. Die Software Spectrum Quant-Erzeuger ermöglicht es, anhand eines Satzes aufgenommener Standardspektren eine Methode zu erstellen. Sobald die Methode erstellt und in der Software **Quant-Erzeuger** validiert wurde, kann Sie zur Quantifizierung einer Komponente im Spektrum Ihrer Probe verwendet werden.

Die Ergebnisse werden im Ansichtsfenster auf dem Reiter **Quant** und in der **Ergebnistabelle** dargestellt (Abb. 49). In unserem Beispiel wurde anhand des Algorithmus nach dem Gesetz von Beer die Konzentration von FAME (Fettsäure-Methylester) in Vol% bestimmt.

Sample	es View 5 Result	s Table Quant					
Quant	results				C	etails	
1	Sample Name	Method Name	FAME (%v/v)	*		Property or Component	Value
3	Std02	EN14078B.UQM	2.7689			Pathlength	0.0474
4	Std03	EN14078B.UQM	3.7407			FAME (%v/v)	9.4328
5	Std04	EN14078B.UQM	4.7039			FAME Prediction Error	0.19881
6	Std05	EN14078B.UQM	7.0802				
7 ▶	Std06	EN14078B.UQM	9.4328	=			
8	Std07	EN14078B.UQM	11.762				
9	Std08	EN14078B.UQM	14.027				
10	Std09	EN14078B.UQM	16.393				
11	Std10	EN14078B.UQM	18.671	•		< III	•

Abb. 49. Der Reiter "Quant"

Im oberen linken Quadrant werden Ihre Quellspektren und die Quant-Ergebnisse dargestellt. Im Abschnitt **Details** sind für jedes Quellspektrum weitere Informationen angegeben.

Für jede Probe wird das Quellspektrum und alle anderen als Teil der Analyse erzeugten Spektren in der Graphik links unterhalb der Quant-Ergebnisse auf dem Reiter **Quant** dargestellt.

Die bei den Quant-Analysen verwendeten Quant-Methoden werden auf dem Reiter **Einstellungen der Quant-Methoden** festgelegt:

Klicken Sie im Menü Einstellungen auf die Option Quant, um die Reiter der Quant-Einstellungen einzublenden.

Wählen Sie auf dem Reiter **Einstellungen der Quant-Methoden** (Abb. 50) unter den verfügbaren Methoden jene aus, die bei der Quant-Analyse angewandt werden sollen. Nur Dateien oder Ordner, bei denen das Kästchen **Einschließen** aktiviert ist, werden zur Auswertung der Spektren eingesetzt.

				Setup Repo	ort Defaults	Setup Quant Methods
Name	Description	Include	Properties	Algorithm		Add 🗸
EN14078B.UQM	EN14078 Range B (0-18 %v/v) Pathlength is in mm		FAME %v/v	BeersLaw		Settings
						Remove
						Run
					Param	eters
					Pathl 0.04	ength 74 💌

Abb. 50. Der Reiter "Einstellungen der Quant-Methoden"

Weitere Informationen zu einer ausgewählten Methode finden Sie im Dialog **Einstellungen** der Quant-Methode (Abb. 51):

Klicken Sie auf dem Reiter Einstellungen der Quant-Methoden auf die Schaltfläche Einstellungen.

Im eingeblendeten Dialogfenster sehen Sie eine Übersicht der Quant-Methode und falls diese mehrere Bestimmungen vorsieht, können Sie wählen, welche davon beim Ablauf der Quant-Methode durchzuführen sind (Abb. 47).

🖳 Quant Method Setup		×
Summary		
Method Summary: Analyst: Description: EN14078 Range B (0-18 %v.	C:\pel_data\quant\methods\\EN14078B.UQM PerkinElmer /v)	
Comments: Pathlength is in mm		
Created: Last Modified: No. of components: No. of standards: Calibrated:	22/12/2010 16:09 27/01/2011 14:59 1 11 Yes	÷
Prediction Properties		
Property	Ir	clude
FAME		
Help	OK Cance	el

Abb. 51. Dialogfenster mit Details einer Quant-Methode

Wählen Sie auf dem Reiter **Einstellungen der Standardreports** (Abb. 52) die Ergebnisse aus, die für jeden Algorithmus in der Ergebnistabelle anzuzeigen sind, wenn eine Quant-Analyse durchgeführt wird.

				Setup Report Defaults	Setup Quant Meth	ods
Algorithm	Value	Calculate value	Display value by default			•
QuantPlusPLS2	MethodRMSError					
QuantPlusPLS2	MethodP2PError	V				
QuantPlusPLS2	MethodTotalMDistance	V				
QuantPlusPLS2	MethodResidualRatio	V				
QuantPlusPLS2	PropertyMDistance	V				
QuantPlusPLS2	MethodResidualSpectrum	V				
QuantPlusPLS2	MethodCalculatedSpectrum	V				
QuantPlusPLS2	PropertyPredictionError	V				
QuantC	MethodRMSError	V				
QuantC	MethodP2PError	V				
QuantC	MethodFValue	V				
QuantC	MethodPercentVariance	V				
QuantC	MethodResidualSpectrum	V				=
QuantC	MethodCalculatedSpectrum	V				
QuantC	PropertyPredictionError	V				
BeersLaw	PropertyPredictionError	V				

Abb. 52. Der Reiter "Einstellungen der Standardreports" für Quant-Ergebnisse

HINWEIS: Weitere Informationen finden Sie in der Spektrum-Bildschirmhilfe.

Berechnungen

Eine Liste der verfügbaren Berechnungen finden Sie auf dem Reiter **Berechnung**. Diese Berechnungen befinden sich auch im Untermenü **Berechnungen** des Menüs **Prozesse**.

Möchten Sie eine neue Berechnung hinzufügen, wählen Sie im Menü Einstellungen die Option Berechnungen, um den Reiter Berechnung einzublenden (Abb. 53).

							Result	Formatting	Equation
Equation Yval @	name 2000		Equation	×				Bac	ck
Equation Ordinate	description value at 2000 cri	r1	Equation syntax is	correct					
Equation Yval[All,	2000]			ОК	*	Check			
					-	Browse			
Operator	s	Functions		<variables></variables>					
[] + × / ↔	start bracket end bracket add minus multiply divide not equal to	Area Are Yval Or PeakX X p Ymax Ma Ymin Mir XYmax X p XYmin X p	a over specified range finate value at position osition of peak ximum y value within x range imum y value within x range position of maximum y in specified ran; ososition of minimum y value in specifie	All Setup_Path	length				

Abb. 53. Der Reiter "Berechnung"

Sie können eine Berechnung eintragen oder auf Begriffe in den Listen **Operationen**, **Funktionen** oder **Variablen** klicken. Für jede Funktion gibt es eine Anzahl erforderlicher oder optionaler Argumente. Wenn Sie eine Funktion eingeben, wird ein Hinweistext eingeblendet, um Ihnen die korrekte Syntax zu zeigen. Das erste Argument ist oftmals **<Spectrum>** und wenn dieses auf **Alle** gestellt ist, wird es bei allen ausgewählten Spektren angewandt; Sie können jedoch auch ein spezifisches Spektrum aufrufen.

Alle Ergebnisse in der **Ergebnistabelle** werden auch unter **Variablen** verfügbar sein, desgleichen die auf dem Reiter **Schichtdicke einstellen** eingetragene Schichtdicke. Somit können Sie für Ihre Spektren in der Probentabelle benutzerdefinierte numerische Spalten hinzufügen und diese Einträge werden für eine Anwendung in Berechnungen verfügbar sein.

Sobald Sie das Eingeben Ihrer Berechnung beendet haben, klicken Sie auf **Test**, um Ihre Berechnung zu überprüfen.

HINWEIS: Das Lernprogramm **Makros** liefert ein Beispiel für die Anwendung einer Berechnung zum Ermitteln der Fläche eines Peaks.

Der Reiter **Ergebnisformatierung** ermöglicht es, Positiv/Negativ-Kriterien zu definieren, und auszuwählen, wie Ergebnisse darzustellen sind. Z. B. können Sie die Zelle der Ergebnistabelle grün unterlegen, wenn das Ergebnis als positiv bewertet wird.

					Result Formatting	Equation
'If' condition	Operato	r	Criterion		Ba	ck
Yval @ 2000	▼ <	•	0.05	•	·	
			Criterion 2			
'Then' conditional formatting					-	
Add text to result	•	Current format F		Fill color	_	
PASS				· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·		
1833				Apply to row		
'Else' conditional formatting		Chang	e Font			
No formatting		Current	format	Fill color		
rotomatory	•]	
FAIL				Apply to row		
		Change	e Font			

Abb. 54. Beispiel einer Ergebnisformatierung

70 . Handbuch Spectrum Two

Um Details einer Berechnung zu sehen oder um diese zu ändern:

Klicken Sie in der Navigationsleiste auf Berechnungen und wählen Sie das entsprechende Symbol aus.

ODER

Öffnen Sie den Reiter **Berechnungen**, klicken Sie auf die betreffende Berechnung und danach auf **Einstellungen**.

Um eine Berechnung durchzuführen, wählen Sie im Datenexplorer die zu bearbeitenden Spektren aus und klicken Sie danach im Untermenü **Berechnungen** des Menüs **Prozesse** auf die gewünschte Berechnung.

Makros

Neben der Durchführung eines einzelnen Prozesses, können Sie auch mehrere Prozesse zu einem Makro verbinden. Darin können auch das Einrichten des Spektrometers (Abb. 55) und die Datenaufnahme, sowie Befehle zur Reporterstellung und für den Datenexport enthalten sein, um so eine Analyse angefangen von der Parametereinstellung des Spektrometers bis zur Ergebnisgestaltung in einem Lauf durchzuführen.

		×
Name	Description	Group Name
Macro 1		No Group
Selectable steps Instrument and data collection Instrument actual Data collection Data collection Berror hand Concesses Search and Compare Quantitation Breporting and Output	Process Settings Visit 1 Instrument setup Settings name: Current at macro creation, Instrument: PerkinElmer FT-IR C66199, Instrument settings for Spectrum Two_util OptR9_Lm002. Slide Holder , Allow compatible instruments: yes	Add Step Remove Step(e) Up Down Create Macro from File
Instrument and Accessory settings Image: Name Description PerkinElmer FT Instrument settings PerkinElmer FT Instrument settings Current at macro Instrument settings	s for MIR_OptKBr_LITa03_Slide Holder for MIR_OptKBr_LITa03_? for Spectrum Two_MIR_OptKBr_LITa03_Slide Holder	49 Import instrument settings
Allow compatible instruments		

Abb. 55. Dialogfenster "Einstellungen von Makros" mit dem Schritt zum Einrichten des Spektrometers

HINWEIS: Ausführliche Angaben finden Sie im Lernproramm **Makros** und in der Bildschirmhilfe.

Scanalyze

Außer Makros können Sie auch die Routine **Scanalyze** der Software Spectrum dazu verwenden, ein Spektrum aufzunehmen und sofort anhand der Prozesse COMPARE, Quant oder Suchen zu bearbeiten. Bei multiplen Akkumulationen werden die Ergebnisse zunächst dargestellt und mit dem Fortschreiten der Datenerfassung aktualisiert.



Abb. 56. Optionen für "Scanalyze" (Scan und Prozess)

Die Prozesse COMPARE, Quant und Suchen müssen vorab anhand der jeweiligen Menüs eingestellt werden.

HINWEIS: Für die Funktionalität **Scanalyze** muss ein gültiges Untergrundspektrum verfügbar sein.

Spektren speichern, Spektren exportieren, Reporterstellung

Die Software enthält vielfache Funktionen, die Sie bei der Präsentation Ihrer Daten unterstützen.

Spektren speichern

In der Software Spectrum werden die Spektren standardmäßig im Format *.sp gespeichert.

Um zu erkennen, ob ein Spektrum gespeichert ist, gehen Sie zur Ergebnistabelle (falls ein Verzeichnis ausgewählt wurde) oder zur Informationsleiste. Spektren, die nicht gespeichert wurden, sind mit einem roten Kreuz markiert.

In Abb. 57 sind z. B. die Originalspektren auf Festplatte gespeichert, während das Ergebnisspektrum des Prozesses (mit S _1) nicht gespeichert ist.

San	nples View 1 Resu	Its Table Compare					
						Results	
F	Sample Name 9	Description -	e	• 🕕	Best Hit +	Pass / Fail	-10
	blistab	Paracetamol tabl	A	000			
	blister	Paracetamol blist	ā	800			
	blistab_1	Paracetamol tablet	X	000	C:\pel_data\spect.	Pass	

Abb. 57. Ergebnistabelle mit gespeicherten und ungespeicherten Spektren

Sie können Ihre Spektren auf verschiedene Art speichern:

- Mit der Option Automatisch speichern, unmittelbar nach der Spektrenaufnahme
- Mit den Optionen Speichern, Speichern unter und Alle Speichern im Menü Datei
- Als abschließender Schritt eines Makro
- Anhand des Kontextmenüs im Ansichtsfenster.

Automatisch speichern

Die Option **Automatisch speichern** ist standardmäßig in der Software Spectrum aktiviert (Abb. 58). Dadurch werden Ihre Spektren nach jeder Messung im festgelegten Ordner gespeichert.

Auto-Save Options
☑ Save after each measurement
Save Location:
C:\pel_data\spectra

Abb. 58. Automatisches Speichern, aktiviert auf dem Reiter Datenaufnahme der Spektrometereinstellungen

Der standardmäßige Speicherort - C:\pel_data\spectra – wurde bei der Installation der Software festgelegt. Falls Sie den Speicherort ändern oder das automatische Speichern
deaktivieren möchten, gehen Sie auf den Reiter **Datenaufnahme** der **Spektrometereinstellungen**.

Speichern, Speichern unter, Alle speichern

Mit dem Befehl **Speichern** werden im Verzeichnis ausgewählte Spektren am aktuellen standardmäßigen Speicherort abgelegt.

Der Befehl **Speichern unter** für die ausgewählten Spektren öffnet einen Dialog, der es ermöglicht, den Dateinamen und das Zielverzeichnis vorzugeben (Abb. 59). Sie können dabei auch den standardmäßigen Speicherort für alle Spektren ändern.

6	🛉 Save Sp	ectra As	
	Save	File Name	Save File Path
		🗙 acetone-A	< Default directory >
	Default	Overwrite file	35
	C:\pel_d	ata\spectra	Apply to all
		Save	Cancel

Abb. 59. Dialogfenster "Spektren speichern unter"

Der Befehl **Alle speichern** öffnet einen ähnlichen Dialog wie jener in Abb. 59, jedoch mit der Liste aller in der Software offenen Spektren.

Binär speichern

Verwenden Sie die Option **Binär speichern** in der Graphik, um ein Spektrum als ***.sp**-Datei zu speichern. Klicken Sie mit rechter Maustaste auf das Spektrum, um ein Kontextmenü einzublenden. Wählen Sie darin **Binär speichern** und rufen Sie ein Zielverzeichnis auf.

Spektren exportieren

Sie können Spektren auf verschiedene Art exportieren:

- Mit der Option Automatisch exportieren, unmittelbar nach der Spektrenaufnahme
- Mit der Option Exportieren im Menü Datei
- Als abschließender Schritt eines Makro
- Anhand des Kontextmenüs im Ansichtsfenster (nur im ASCII-Format).

Sie können Spektren in den Formaten CSV, JCAMP-dx, ASCII oder einem benutzerdefinierten Format exportieren. Die Einstellungen für ein benutzerdefiniertes Format erfolgen auf dem Reiter **Export-Einstellungen**. Ausführlichere Angaben finden Sie in der Spectrum-Bildschirmhilfe.

Automatisches Speichern/Exportieren

Wenn Sie auf dem Reiter **Datenaufnahme** der Spektrometereinstellungen die Kästchen **Speichern nach jeder Datenaufnahme** und **Exportieren** aktivieren, werden Ihre Spektren nach jeder Messung automatisch in das angegebene Zielverzeichnis exportiert (Abb. 60).

Auto-Save Options	
Save after each measurement	
Save Location:	
C:\pel_data\spectra	
Export File Format:	
Comma Separated Values (.csv)	
Save Export Location:	
C:\pel_data\spectra	

Abb. 60. Einrichten des automatischen Exports auf dem Reiter "Datenaufnahme" der Spektrometreinstellungen

Das standardmäßige Zielverzeichnis - C:\pel_data\spectra – wurde bei der Installation der Software festgelegt. Um diese Option zu wählen oder um das Zielverzeichnis zu ändern, gehen Sie auf den Reiter **Datenaufnahme** der Spektrometereinstellungen.

Exportieren

Sie können jederzeit Ihre Spektren anhand der Option **Exportieren** im Menü **Datei** exportieren. Der eingeblendete Dialog **Dateien Exportieren** listet die Spektren des gewählten Verzeichnisses auf (Abb. 61). Sie können einen Dateinamen und ein Zielverzeichnis eingeben und anschließend das Format auswählen, in welchem die Spektren zu exportieren sind.

Esport Data				- 8 🖬
Export File	File Name	0	estination Directory	
acetone	á.	< Default directory >		
Default directory				
C-pel_data/spectra				Apply to all
File format	Comma Separated Values (Losv)	Overwrite files		
	- Entre	et Count		
	_ Lups	Lances		

Abb. 61. Der Dialog "Dateien exportieren"

ASC-Speichern

Anhand der Option **ASC-Speichern** können Sie eine Graphik als ASCII-Datei (*.asc). Wählen sie ein Spektrum aus und klicken Sie darauf mit rechter Maustaste. Klicken Sie im geöffneten Kontextmenü auf **Save ASC** und wählen Sie danach den gewünschten Speicherort.

Senden nach

Die Option **Senden nach** (Abb. 62) sendet den Inhalt des aktuellen Softwarefensters an eine ausgewählte Applikation.

ć	🔕 PerkinElmer Spectrum								
ł	<u>F</u> ile	<u>V</u> iew	<u>P</u> rocess	<u>S</u> etup	<u>N</u> a	vigatio	on <u>H</u>	elp	lp
	B	New	Ctrl	+N					
ł	2	Open	Ctrl	+0	aceto	one-A	Histo	ry	·
6		Send <u>T</u> e	D	×	W	Word	1	×	
6	₽	<u>E</u> xport.	Ctrl	+E	7	Word	IPad	F	New WordPad Document
6	e	<u>R</u> eport.	Ctrl	+R	R	Excel		۲	
		<u>S</u> ave	Ctrl	+S		Email			

Abb. 62. Die Option "Senden nach" im Menü "Datei" der Software Spectrum

Um die Optionen für den Befehl **Senden nach** zu sehen, müssen Sie die entsprechende Software auf Ihrem PC installiert haben. Z. B. müssen vorab die Einstellungen für Ihr Email-Konto auf dem Reiter **Email einstellen** erfolgen, damit die Option **Email** für **Senden nach** verfügbar ist.

HINWEIS: Wenn die Optionen **Word** oder **Excel** nicht zu sehen sind, obwohl Sie ein Office-Paket auf Ihrem PC installiert haben, lesen Sie im *Spectrum Administratorhandbuch* (L1050095) die Angaben zur Fehlersuche.

Sie können das Menü **Senden nach** auch zum Senden Ihrer Daten an das KnowItAll Informatics System[®] von Bio-Rad benutzen, falls Sie diese Software installiert haben.

Zum Einblenden des Reiters Email einstellen:

Klicken Sie im Menü Einstellungen auf die Option Export und Email und öffnen Sie den Reiter Email einstellen.

		Setup Email	Setup Export	
Server Information Outgoing mail server (SMTP)	User Information Email Address			
myserver.net	myemailaddress.com	Test Settings		
Vse Default Credentials	User Name	_		
Enable SSL				
Port 25	Password			
Plain Text D ITTML B d	Confirm Password			
HIML Body				

Abb. 63. Der Reiter "Email einstellen"

Sobald Sie auf **Senden nach Email** klicken, wird der Inhalt des aktuellen Fensters als Anhang einem Email-Formular hinzugefügt. Sie können danach die Email-Adresse des Empfängers eingeben, eine Nachricht eintragen und weitere ergänzende Anhänge hinzufügen, bevor Sie die Email absenden.

Reporterstellung

Sie können einen Report Ihrer Daten auf zwei Arten erstellen:

- Anhand der Option Report des Menüs Datei.
- Als abschließender Schritt eines Makro.

HINWEIS: Reports werden auch anhand benutzerdefinierter Vorlagen für Spektrometerprüftests und Bereitschaftstests erzeugt. Nähere Angaben dazu finden Sie unter *Bereitschaftstests und Spektrometer-Überprüfung* auf Seite 87.

Report

Sie können zu jeder Zeit einen Report Ihrer Ergebnisse anhand der Option **Report** im Menü **Datei** erstellen (Abb. 64).

Reports sto	rage and printout				
Save re	port	Print report	Email Report		
Report form	at				
Rich text fo	mat (.rtf)	•			
emplate fil	ename				
C:\Program	n Files (x86)\PerkinElme	er\Spectrum\en-US\Templa	ates\ReportTempl Browse		
Folder for r	eports				
C:\pel_dat	a\reports		Browse		
Logo filena	me				
Logo filena	me		Browse		
Logo filena	me		Browse		
Logo filena Sections	me		Browse		
Logo filenar Sections Include /	me Section Name		Browse		
Logo filena Sections Include /	me Section Name Peak Area Height Rest	lits	Browse		
Logo filenar Sections Include /	section Name Peak Area Height Rest Spectrum Graph	ults	Browse		
Logo filenar Sections Include /	Section Name Peak Area Height Rest Spectrum Graph Summary	Its	Browse		
Logo filenar Sections Include /	Section Name Peak Area Height Resu Spectrum Graph Summary Compare Result	lts	Browse		
Logo filenal Sections Include /	Section Name Peak Area Height Ress Spectrum Graph Summary Compare Result	ilts	Browse		
Logo filenation	section Name Peak Area Height Resu Spectrum Graph Summary Compare Result	dits	Browse		
Logo filenal Sections Include /	me Section Name Peak Area Height Resu Spectrum Graph Summary Compare Result	dts	Erowse		

Abb. 64. Das Dialogfenster "Report"

Sie können einen Report in den Formaten *.**rtf** oder *.**pdf** erstellen und danach die Datei speichern, ausdrucken oder an eine Email hängen.

HINWEIS: Um die Option **Email Report** zu sehen, müssen Sie auf dem Reiter **Email einstellen** Ihr Email-Konto einrichten.

Der standardmäßige **Ordner für Reports**, hier C:\pel_data\reports, wurde bei der Installation der Software festgelegt. Um den standardmäßigen Speicherort zu ändern, öffnen Sie einen neuen Ordner.

Reports werden anhand einer Vorlage erstellt. Sie können die Abschnitte auswählen, die Sie in Ihren Report einschließen möchten. Die aufgelisteten Daten hängen von der gewählten Vorlage ab. Im Beispiel der Abb. 65 sind im Report das Spektrum und die COMPARE-Ergebnisse enthalten.



Abb. 65. Beispiel eines Reports mit einem COMPARE-Ergebnis

HINWEIS: Sie können einen Report auch als Teil eines abschließenden Makroschritts erstellen. Nähere Angaben dazu finden Sie im Lernprogramm **Makros** und in der Spectrum Bildschirmhilfe.

Drucken

Die Optionen **Drucken** und **Druckvorschau** im Menü **Datei** senden den Inhalt des aktuell dargestellten Fensters an den Drucker. Die **Druckvorschau** ermöglicht es, Einstellungen wie Seitenausrichtung, Papiergröße und andere Vorgaben vor der Druckausgabe zu ändern.

HINWEIS: Sie können Ihre Daten auch als Report ausdrucken.

Spektrometereinstellungen

Anhand der Reiter für Spektrometereinstellungen können Sie die standardmäßigen Parameter des Geräts beliebig ändern.

Klicken Sie im Menü Einstellungen auf Spektrometer, um die Reiter für Spektrometereinstellungen einzublenden.

Zur Änderung eines Werts, wählen Sie den Parameter aus und tragen Sie den neuen Wert ein oder aktivieren Sie den gewünschten Wert in der Liste.

Setup Instrument Aut	to-Name Setup Inst	rument Data Collection	Setup Instrument BeamPath	Setup Instrument Advan	ced Setup Instrument Basic
Actions Re Lo	estore Defaults	Settings Abscissa Units Wavenumber Ordinate Units %T	Start (cm-1) 4000 End (cm-1) 450	Ccan Settings Resolution (cm-1) 4 Data Interval (cm-1)	Scan Type Sample Accumulations Scans
		Accessory	Slide I	Holder	
		Item		Value	
		Sampling		Not Specified	-

Abb. 66. Der Reiter "Spektrometereinstellungen"

Auf dem Reiter **Spektrometereinstellungen** können Sie unter **Von** und **Bis** die Anfangsund Endwerte des Scanbereichs (standardmäßig in Wellenzahlen, jedoch auch umstellbar auf Wellenlängen in **nm** oder **µm**) eingeben, sowie die **Auflösung** (in cm⁻¹) und die **Anzahl Scans** (als Zahl oder Zeitdauer der Akkumulationen).

Anhand der Schaltfläche **Laden und speichern** können Sie die Spektrometereinstellungen als ***.set**-Dateien speichern oder exportieren, um sie als Einstellungs-Makroschritt zu verwenden oder auf einen PC, bzw. auf ein anderes, kompatibles Spektrometer zu übertragen (Abb. 66).

Ausführlichere Angaben zu den Reitern für Spektrometereinstellungen finden Sie im Lernprogramm **Einstellen Ihres Spektrometers** oder in den Spectrum-Bildschirmhilfen.

HINWEIS: Die Werkzeugleisten für Spektrometereinstellungen und zur Datenaufnahme können frei konfiguriert werden, um jede verfügbare Einstellung der Reiter für Spektrometereinstellungen zu enthalten.

Ändern der Auflösung

Die Einstellung der **Auflösung** erfolgt in der Software Spectrum auf dem Reiter Spektrometereinstellungen (Abb. 28).

Die verfügbare Auflösung des Spektrometers wird sowohl von der optischen Wegdifferenz im Interferometer, als auch von der Strahldivergenz vom Interferometer in Richtung Detektor bestimmt. Das Spektrometer Spectrum Two verfügt über einen Schlitz im doppelseitigen Gleithalter zum Einsetzen einer J-Stoppkarte vor die Probe (Abb. 67).



Abb. 67. Der doppelseitige Gleithalter

J-Stoppkarten setzen eine Obergrenze für das Auflösungsvermögen (Wellenzahl/Auflösung) des Spektrometers durch Begrenzen der Strahldivergenz. Um jedoch eine Auflösung zu erreichen, die durch die optische Weglängendifferenz definiert ist (z. B. 2 cm⁻¹) und auf dem Reiter **Spektrometereinstellungen** unter **Auflösung** spezifiziert wird, ist eine bestimmte Strahldivergenz erforderlich, die vom gegebenen Durchmesser der J-Stopp-Apertur diktiert wird. Die mit dem Spectrum Two gelieferten J-Stoppkarten ermöglichen die Auflösungen von 4, 2, 1 und 0,5 cm⁻¹ bei 4000 cm⁻¹.

Bei einer gegebenen Wellenzahl ergibt eine je kleinere J-Stopp-Apertur eine umso bessere Auflösung (vorausgesetzt, es besteht keine Einschränkung durch die Weglängendifferenz am Interferometer). So wird bei 4000 cm⁻¹ die J-Stoppkarte für 4 cm⁻¹ und Auflösungsvermögen 1000, einen gegebenen Durchmesser haben. Dieser Durchmesser ergibt jedoch 2 cm⁻¹ bei 2000 cm⁻¹ oder 1 cm⁻¹ bei 1000 cm⁻¹, vorausgesetzt, die optische Wegdifferenz (bedingt durch die Einstellung für **Auflösung** in der Software) ist entsprechend vorgegeben. Dies kann von Nutzen sein, wenn in Situationen mit geringer Energie eine höhere Auflösung nur in Bereichen niedriger Wellenzahlen benötigt wird. So kann z. B. ein J-Stopp für 4 cm⁻¹ bei 2000 cm⁻¹ eine Auflösung von 2 cm⁻¹ liefern und ein besseres Signal/Rausch-Verhältnis (oder kürzere Messdauer) ermöglichen, als eine J-Stoppkarte für 2 cm⁻¹, welche diese Auflösung bei 4000 cm⁻¹ liefert.

Für normale Datenaufnahmen mit 4 cm⁻¹ Auflösung, die in der Software vorab eingestellt ist, ergibt die Optik des Spectrum Two annähernd eine Reinheit der Linienform von 4 cm⁻¹ und die spezifizierte Wellenzahlkalibration, ohne Verwendung der betreffenden J-Stoppkarte (vorausgesetzt, die Probe selbst bewirkt kein Eingrenzen des Lichtstrahls). Dennoch empfehlen wir den Einsatz der J-Stoppkarte von 4 cm⁻¹ und der optionalen AVI-Funktion, wenn bei Messungen direkter Transmission höchste Richtigkeit der Wellenzahl erforderlich ist. Nur so erreicht man bei höheren Wellenzahlen die beste Reinheit der Linienform.

HINWEIS: Dies setzt voraus, dass die Probe selbst den Lichtstrahl nicht eingrenzt und somit nicht auch als J-Stopp wirkt. Für Messungen mit höchster Richtigkeit empfehlen wir, immer darauf zu achten, dass die Probe größer als der J-Stoppdurchmesser ist.

Falls Sie in der Software die **Auflösung (cm⁻¹)** bei eingesetztem Gleithalter im Probenraum verändern, wird auf dem Reiter **Strahlengang** und in der Statusleiste eine Meldung eingeblendet, die Sie auffordert, eine der J-Stoppkarten in den Gleithalter einzusetzen oder jegliche externe J-Stoppkarte zu entfernen (Abb. 68).



Abb. 68. Der Reiter "Strahlengang"

Die Größe des ausgewählten J-Stopps und die Auflösung werden als Teil der Spektrometereinstellungen auf dem Reiter **Protokoll** der Software Spectrum aufgezeichnet. Nähere Angaben finden Sie in der Spectrum-Bildschirmhilfe.

HINWEIS: Bei anderen Zubehören als dem Gleithalter kann die J-Stoppkarte nicht eingesetzt werden. Daher bewirkt ein Verkleinern der Auflösungswerte unter 2 cm⁻¹ eine Verminderung der J-Stoppwellenzahl, d. h. der höchsten Wellenzahl, bei welcher diese Auflösung noch erreichbar ist.

Spektrometer-Komponententests

Standardmäßig werden die Komponententests jedes Mal ausgeführt, wenn das Spektrometer eingeschaltet wird.

HINWEIS: Um diese Option zu löschen und die Tests nur bei Bedarf durchzuführen, wählen Sie auf dem Reiter Laboratoriumsaktionen unter Laboratoriumsplaner die Option Auf Abruf. Nähere Angaben finden Sie in den Spectrum-Bildschirmhilfen.

Um die Komponententests auf Abruf durchzuführen:

Klicken Sie im Untermenü Spektrometertests des Menüs Datenaufnahme auf Komponententests.

Es wird der Dialog **Spektrometer-Komponententests** eingeblendet (Abb. 69) und die Tests starten. Die Ergebnisse werden mit Bestanden ✓ oder Fehlgeschlagen × gekennzeichnet. Wenn die Komponententests ein Problem erkennen, finden Sie im Feld **Empfohlene Aktion** Informationen oder Anleitungen zu dessen Behebung.

Nesut Summery:	
•	
Details	
Check	Result
Tests Completed Successfully	1
Power Supply	4
Laser Detector	4
Laser	4
Interferometer	
Solenoids	1
Scan Motor	4
Test Scan	4
Laser Alignment	4
Opto-Interrupt	4
IR Detector	4
Source	4
Humidity	4
IR Throughput	1
Main Board	
Memory	1
Line Voltages	1
Programmable Potentiometers	1
Recommended Action	
All component checks have passed.	

Abb. 69. Der Dialog "Spektrometer-Komponententests"

Wenn die Komponententests erkennen, dass vom Benutzer zu wartende Bauteile ersetzt werden müssen, wie z. B die Strahlungsquelle oder das Trockenmittel, wird eine Verknüpfung zum betreffenden Austausch-Assistenten eingeblendet (Abb. 70). Der Assistent liefert die schrittweisen Anleitungen zum Austauschen des Bauteils. Ausführlichere Angaben finden Sie in den jeweiligen Abschnitten des Kapitels *Wartungen*, beginnend mit Seite 95.

82 . Handbuch Spectrum Two

	neeut summery:					
Details						
	Check	Result	*			
Tests Complete	d Successfully	1	11			
Power Supply		4	10			
Laser Detector		4	10			
Laser		1	10			
Interferometer						
Solenoids		1	-1			
Scan Moto	ĸ	1				
Test Scan 🗸						
Laser Alignment						
Opto-Inten	rupt	4	U			
IR Detector		1				
Source		×				
Humidity						
IR Throughput						
Main Board						
Memory						
Line Volta;	j es					
Programm	able Potentiometers		-			
Recommended Act	lion					
Problem	Recommendation	Action				
Source Failure	The source needs to be replaced	Run Reniacement Wizard				

Abb. 70. Dialog "Spektrometer-Komponententests" mit Angabe der Fehlerquelle

Wenn die Komponententests ein Problem erkennen, das vom PerkinElmer-Service untersucht werden sollte, finden Sie die Hinweise für die Vorgehensweise auf der Support-Internetseite:

www.perkinelmer.com/SpectrumTwoSupport

Falls der PerkinElmer-Serviceingenieur die bei Komponententests erzeugten Logdateien anfordert, finden Sie diese unter:

• C:\ProgramFiles\PerkinElmer\ServiceIR\[Instrument Serial Number]\Component Checks

ODER

 C:\ProgramFiles (x86)\PerkinElmer\ServiceIR\[Instrument Serial Number]\Component Checks

für Windows XP bzw. Windows 7, wobei C: das Laufwerk ist, auf welchem die Software Spectrum installiert ist.

Feuchtigkeits-Schutzschild

Der Feuchtigkeitsschild zeigt die momentane interne Feuchtigkeit des Spektrometers an, die im Inneren des Geräts von einem Feuchtigkeitssensor gemessen wird.

Klicken Sie im Menü Datenaufnahme auf die Option Feuchtigkeits-Schutzschild. Das Dialogfenster Feuchtigkeits-Schutzschild wird eingeblendet.

midity Shield	
Humidity critical. Replace desiccant immediately to avoid instrument damage.	42%
Desiccant Life Estimated Dessicant Expiry Date: 07 June 2012 Replace Desiccant	
	Close

Abb. 71. Dialogfenster "Feuchtigkeits-Schutzschild"

Die möglichen Anzeigen Ihres Feuchtigkeits-Schutzschildes sind in Tab. 1 angegeben.

Status	Anzeige	Feuchtig- keit	Erforderliche Aktion
Normal	0 %	<10 %	Keine.
Hoch	20 %	20–39 %	Trockenmittelaustausch empfohlen.
Kritisch	40 %	≥40 %	Trockenmittel sofort ersetzen.

Wenn die Feuchtigkeit in Ihrem Spektrometer ein hohes oder kritisches Niveau erreicht, wird der Feuchtigkeitssensor in der Statusleiste eine Warnmeldung einblenden.



Abb. 72. Warnmeldungen des Feuchtigkeitssensors bei hoher und bei kritischer Feuchtigkeit

HINWEIS: Die Luftfeuchtigkeit im Gerät wird auch bei den Komponententests überprüft.

84 . Handbuch Spectrum Two

Das Verfallsdatum des Trockenmittels hängt vom Datum des letzten Austauschs ab. Normalerweise hält ein Trockenmittel bis zu fünf Jahre. Wird Ihr Spektrometer jedoch in feuchter Umgebung betrieben oder gelagert, sollten Sie den Feuchtigkeits-Schutzschild verwenden, um das Gerät häufiger zu überprüfen.

Führen Sie den Trockenmittelautausch mit Hilfe des betreffenden Assistenten durch:

Klicken Sie im Dialog Feuchtigkeits-Schutzschild auf die Schaltfläche Trockenmittel austauschen.

Befolgen Sie im eingeblendeten Assistenten die Bildschirmanleitungen. Ausführliche Informationen finden Sie unter *Austauschen des Trockenmittels*auf Seite 98.

Stromsparmodus

Es gibt zwei Vorgehensweisen, um das Spektrometer in den Stromsparmodus zu überführen: Drücken des Netzschalters an der Gerätefrontseite oder Aktivieren des **Stromsparmodus** in der Software Spectrum.

Betätigen des Schalters an der Gerätefrontseite

Zum Überführen des Spektrometers in den Stromsparmodus:

Drücken Sie den Einschaltknopf an der Gerätefrontseite (Abb. 73) etwa zwei Sekunden lang, bis das Licht der Anzeige-LED von stetig grün auf stetig gelb wechselt.

Ist das Spektrometer mit einem PC verbunden, werden in der Software Spectrum die Reiter der Spektrometereinstellungen und die Werkzeugleiste zur Datenaufnahme abgeschaltet.



Abb. 73. Netzschalter an der Spektrometerfrontseite

HINWEIS: Wurde das Spektrometer mit dem Einschaltknopf in den Stromsparmodus überführt, unterliegt es nicht mehr der Softwaresteuerung. Demzufolge werden in der Software Spectrum vorgesehene Stromsparvorgänge nicht ausgeführt, bevor Sie das Gerät erneut von Hand einschalten.

Um das Gerät erneut einzuschalten:

Drücken Sie den Einschaltknopf an der Gerätefrontseite etwa zwei Sekunden lang, bis das Licht der Anzeige-LED auf stetig grün wechselt.

Das Spektrometer benötigt einige Minuten zur Initialisierung. Sobald sie abgeschlossen ist, sind die Reiter der Spektrometereinstellungen und die Werkzeugleiste zur Datenaufnahme wieder verfügbar.

Aktivieren des Stromsparmodus in der Software Spectrum

Sie können den Stromsparmodus in der Software Spectrum dazu verwenden, um das Gerät in den Standby-Modus zu überführen oder um es auszuschalten. Die Optionen für den Stromsparmodus können getrennt für jeden Wochentag eingestellt werden.

Wählen Sie im Menü Einstellungen den Laboratoriumsplaner und öffnen Sie den Reiter Stromsparmodus einstellen.

		Setup Power Save	Setup Laboratory Act
		Power Save	
Activate	D	ays Power	On Power Off
1	Monday	09:00	17:30
V	Tuesday	09:00	17:30
V	Wednese	day 09:00	17:30
1	Thursday	y 09:00	17:30
V	Friday	09:00	17:30
	Saturday	09:00	17:30
	Sunday	09:00	17:30

Abb. 74. Der Reiter "Stromsparmodus einstellen"

Das Spektrometer wird zu den vorgegebenen Terminen in den Stromsparmodus überführt.

HINWEIS: Kurz bevor das Spektrometer in den Stromsparmodus eintritt, wird eine Meldung eingeblendet. Sie können dann den Vorgang noch um bis zu zwei Stunden verschieben.

Die interne Uhr des Spektrometers ist mit dem zuletzt angeschlossenen PC synchronisiert. Um die Uhr nach einer manuellen Änderung der PC-Uhrzeit oder nach Umstellung auf Sommer- oder Winterzeit zu aktualisieren, verbinden Sie das Spektrometer mit der Software Spectrum, Spectrum ES oder AssureID.

Um das Gerät zu einem beliebigen Zeitpunkt in den Stromsparmodus zu überführen:

> Klicken Sie im Menü Datenaufnahme auf Stromsparmodus.

LED-Anzeige im Stromsparmodus

Wurde das Spektrometer über die Software in den Stromsparmodus geschaltet, blinkt die LED an der Gerätefrontseite in Gelb, um anzuzeigen, dass das Spektrometer zur vorgegebenen Zeit erneut starten wird.

Planmäßiges Einschalten

Zum vorgegebenen Zeitpunkt oder beim Drücken des Einschaltknopfs, wechselt die LED-Anzeige vom blinkenden Gelb auf stetiges Grün. Das Spektrometer benötigt einige Minuten zur Initialisierung. Sobald diese abgeschlossen ist, sind die Reiter der Spektrometereinstellungen und die Werkzeugleiste zur Datenaufnahme wieder verfügbar.

Bereitschaftstests und Spektrometer-Überprüfung

In der Software Spectrum gibt es drei Arten von Geräteprüftests:

• Komponententests, die überprüfen, ob alle Komponenten Ihres Spektrometere korrekt funktionieren. Näheres dazu finden Sie unter *Spektrometer-Komponententests* auf Seite 81.

Sie sind angehalten, die Tests jedes Mal durchzuführen, wenn Sie Ihr Gerät einschalten.

• Bereitschaftstests, die überprüfen, ob Ihr Messplatz, d. h. Spektrometer und Zubehör für den vorgesehenen Einsatz geeignet ist.

Sie sind angehalten, die geeigneten Bereitschaftstests vor dem Start Ihrer Analysen durchzuführen. Tests auf Verunreinigung sollten bei Bedarf vor dem Vermessen jeder Probe erfolgen.

Bereitschaftstests sind spezifisch für eine aktuelle Spektrometerkonfiguration.

• Spektrometer-Überprüfung, welche anhand grundlegender Tests festlegt, ob ihr Gerät innerhalb der Spezifikationen funktioniert.

Diese Tests sollten im Einklang mit den Arbeitsverfahren Ihres Laboratoriums erfolgen, üblicherweise wöchentlich oder mindestens monatlich.



Abb. 75. Untermenü "Spektrometer-Überprüfung" des Menüs "Datenaufnahme"

Bereitschaftstests

Ein Bereitschaftstest belegt, dass ein Aspekt der Leistungsfähigkeit Ihres Systems, einschließlich Messzubehöre, für seinen Zweck geeignet ist. Wenn Sie Toleranzen für die Bereitschaftstests festlegen, müssen Sie berücksichtigen, wie diese für Ihre individuellen Applikationen definiert werden.

88 . Handbuch Spectrum Two

Wählen Sie zum Durchführen der Tests im Menü Datenaufnahme die Option Spektrometertests, danach die Option Bereitschaftstests und anschließend den gewünschten Test (z. B. Abszisse).

Sie können die Tests einzeln durchführen oder alle Bereitschaftstests, die auf den Reiter der Bereitschaftstests ausgewählt wurden, indem Sie auf die Schaltfläche **Gewählte Bereitschaftstests ausführen** klicken und danach die Bildschirmanleitungen befolgen.

🚯 Ready Checks - Abscissa		×
Ready Checks		
Abscissa Check	C C L	Ensure beam path is clear
Noise Check		Press [Scan] to continue
		Scan Cancel

Abb. 76. Dialogfenster für Bereitschaftstests

• Der Test **Verunreinigung** bezieht sich auf Messzubehöre wie Oberplatten, die zwischen einzelnen Proben eine Reinigung erfordern könnten. Dies betrifft insbesondere die Zubehöre UATR und HATR. Der Test vergleicht ein nach dem Entfernen der Probe aufgenommenes Untergrundspektrum mit einem Referenzuntergrundspektrum, das am perfekt sauberen Zubehör aufgenommen wurde. Das Verhältnis der beiden Spektren wird danach in Absorption auf verbliebene Probenrückstände untersucht.

Erforderlich ist ein geeignetes Referenzuntergrundspektrum und Details von bis zu drei charakteristischen Peaks der möglichen Verunreinigung.

- Der **Quant-Prüftest** ermöglicht es, Ihre Quant-Methoden vor dem Aufnehmen der Probenspektren zu überprüfen. Es wird die Konzentration einer Kontrollprobe anhand der Quant-Methode ermittelt und mit dem bekannten Wert verglichen. Liegt der Messwert innerhalb der festgelegten Grenzen, ist der Test bestanden.
- Der Test **Abszisse** besteht aus dem Aufnehmen eines Untergrundspektrums, gefolgt vom Spektrum einer Polystyrol-Referenzprobe (entweder der Referenz im Filterrad oder einer Polystyrol-Referenz im Gleithalter des Probenraums). Anschließend werden die Wellenzahlen festgelegter Peaks bestimmt. Liegen die Werte innerhalb der Toleranzgrenzen, ist der Test bestanden.
- Der **Durchsatz**-Test besteht im Aufnehmen eines Referenzspektrums und der Messung von Ordinatenwerten bei festgelegten Abszissenpositionen. Liegen die Messwerte über dem unteren Grenzwert, ist der Test bestanden.
- Beim **Rauschen**-Test werden zwei Untergrundspektren aufgenommen und anschließend der RMS-Wert (%T) und das Peak-zu-Peak-Rauschen (%T) über einen Bereich bestimmt und der Basislinientrend ermittelt. Liegen die Werte innerhalb der festgelegten Grenzen, ist der Test bestanden.

Nach Abschluss der Tests wird (standardmäßig) mit den Ergebnissen ein Report erzeugt.

Nähere Informationen zum Einstellen der Bereitschaftstests finden Sie unter *Einstellungen der Bereitschaftstests*.

Spektrometer-Überprüfung

Sie können grundlegende Spektrometerprüftests durchführen, ohne die Einstellungen zu verändern. Zusätzlich können Sie weitere Prüftests auswählen und bei jedem Test neue Einstellungen wählen.

HINWEIS: Vor der Durchführung einer Spektrometer-Überprüfung müssen Sie jegliches Messzubehör aus dem Strahlengang entfernen. Falls Ihr Spektrometer nicht über ein internes Filterrad verfügt, muss der leere Gleithalter im Lichtweg verbleiben.

Wählen Sie zum Ausführen der Tests im Menü Datenaufnahme die Option Spektrometertests und anschließend IPV-Prüftests.

Befolgen Sie die Anleitungen des Bildschirms.

🚯 Instrument Verification - Absci	ssa		×
Instrument Checks			
Abscissa Check	<pre>B</pre>	Ensure beam path is clear	
Ordinate Check	Ľ <u>~</u>	Press [Scan] to continue	
Noise Check			
		Scan Cancel	

Abb. 77. Der Dialog "IPV-Prüftests"

Der **Abszissenprüftest** besteht aus dem Aufnehmen eines Untergrundspektrums, gefolgt vom Spektrum einer Polystyrol-Referenzprobe (entweder im Filterrad oder im Gleithalter des Probenraums). Anschließend werden die Wellenzahlen festgelegter Peaks bestimmt. Liegen die Werte innerhalb der Toleranzgrenzen, ist der Test bestanden.

Der **Ordinatenprüftest** verwendet standardmäßig die Schott-Glasreferenz NG11 (entweder im Filterrad oder im Gleithalter des Probenraums). Wenn Sie ein anderes Referenzmaterial benutzen, müssen Sie die Geräteeinstellungen entsprechend ändern.

- Beim **Rauschen-Prüftest** werden zwei Untergrundspektren aufgenommen und anschließend der RMS-Wert (%T) und das Peak-zu-Peak-Rauschen (%T) über einen Bereich bestimmt und der Basislinientrend ermittelt. Liegen die Werte innerhalb der festgelegten Grenzen, ist der Test bestanden.
- Nähere Informationen zum Einstellen der IPV-Prüftests finden Sie unter *Einstellungen der IPV-Prüftests*.

Atmosphärische (CO₂/H₂O) Kompensation

Die Option CO2/H2O ist standardmäßig auf dem Reiter **Erweiterte Einstellungen** aktiviert (Abb. 78) und löst eine Korrekturroutine der atmosphärischen Absorptionen aus.

Setup Instrument Auto-Name	Setup Instrument Data Collection	Setup Instrum	nent Beam	Path Setup Instrument Adv	anced	Setup Instrument Basic
Advance	d Settings Qualit	y Checks				
ToolBox 🕡 CO	D2/H2O	Name	Include	Range		All Checks Off
	4 Basel	line High	V	80 95		All Checks Off
	Basel	line Low	V	50 — 75		
Lo	ok Ahead Basel	line Sloping	V	50 65	=	D (D (I)
Core (High	Noise	v	10 - 60		Restore Defaults
ocan a	Stron	g Band	V	30 50)
0.2	Veak	Band	V	25 35		
Phase	Correction Stray	Light	V	30 — 70		
Magnit	tude Vater	r Vapor	V	80 95		
Apodiz	carbo	on Dioxide	V	50		
Strong	Vigne	etting	V	0 70		
Scan	Fring	es	v	40 70		
Julia	Block	ed Beam	V	99		
U	Nega	tive Bands	V	30 70	Ŧ	

Abb. 78. Der Reiter "Erweiterte Einstellungen" in der Software Spectrum

Diese Korrekturroutine ist wirksamer als die einfache Spektrensubtraktion, da sie zusätzlich Folgendes berücksichtigt:

- Nichtlinearität wegen unterschiedlicher Auflösung
- Temperaturabhängigkeit aufgenommener Spektren
- Auswirkung von J-Stopp, Probe oder Zubehör auf die Linienform und Kalibration.

Ist die Funktion **CO2/H2O** aktiviert, benutzt die Software ein theoretisches Referenzspektrum aus hoch aufgelösten Daten und berücksichtigt die aktuellen realen Geräteparameter zu dessen Anpassung an das gemessene Spektrum.



Abb. 79. Korrektur eines MIR-Spektrums mit einer Auflösung von 4 cm⁻¹

AVI-Korrektur

In der Software Spectrum kann auf dem Reiter **Erweiterte Einstellungen** auch die AVI-Kalibrierung aktiviert werden, wenn sie für die aktuelle Spektrometer- und Messkonfiguration verfügbar ist (Abb. 80).

Setup Instrument Auto-	Name Se	etup Instrument Data Co	llection	Setup Instru	ment Beam	nPath	Setup Instrument Adv	anced	Setup Instrument Basic
A	dvanced Se	ettings	Qualit	y Checks					
ToolBox	V CO2/H	20		Name	Include		Range		All Checks Off
(Basel	ine High	V	80 —	95	m l	All Checks Off
	AVI		Basel	ine Low	1	50 —	75	ì	
	Look A	head	Basel	ine Sloping	1	50 —	65	≡ [
	C	d (anyla)	High	Noise	V	10 🚽	60		Restore Defaults
r	Scan Speed	d (cm/s)	Stron	g Band	1	30 —	- 50		
	0.2	•	Weak	Band	1	25	35		
	Phase Corr	rection	Stray	Light	V	30 —			
	Magnitude	-	Water	Vapor	1	80 —	95		
	Apodization	n	Carbo	on Dioxide	v	50	- 85		
[Strong		Vigne	tting	V	0	70		
L			Fring	es	V	40	70		
	Scan Start	Delay (s)	Block	ed Beam	1	99 —	99		
	0		Nega	tive Bands	V	30 —	70	-	
					F				

Abb. 80. Der Reiter "Erweiterte Einstellungen" in der Software Spectrum

Die Zielsetzung der AVI-Korrektur (engl. "Absolute Virtual Instrument") ist:

- Langfristig stimmige Leistungsstärke bei verschiedenen Spektrometern
- Rückführbarkeit aller Messungen.

Obwohl FTIR-Spektrometer einen Referenzlaser verwenden, wirken sich Unterschiede in der Gleichförmigkeit und der Divergenz des Lichtstrahls auf die Wellenzahlkalibration und die Linienform aus. Dies gilt für alle FTIR-Spektrometer. Unterschiede zwischen Geräten sind auch bedingt durch verschiedenartige Messzubehöre und durch einen Austausch von Komponenten. Die AVI-Korrektur sorgt für gleichbleibende Kalibrierung und Linienform.

Das Absolute Virtuelle Spektrometer ist ein Gerät mit theoretischer Leistungsfähigkeit, bei welchem die Messergebnisse an bekannten Proben genau vorhersagbar sind. Wird auf einem realen Gerät gemessen und die Software führt eine Umrechnung auf theoretische Ergebnisse durch, dann kann diese Umrechnung auch bei weiteren Messungen angewandt werden.

Das Absolute Virtuelle Spektrometer definiert sich über die Exaktheit und Richtigkeit der Wellenzahlkalibration, der Spektrometerlinienform und der Ordinatenwerte.

Ist AVI aktiviert, misst die Software das momentane Spektrometerprofil relativ zu einem absoluten Standard (eine Methanküvette) und einer idealen Linienformfunktion und führt eine Korrektur durch.



Abb. 81. Methanspektren mit einer Auflösung von 4 cm^{-1} ohne AVI-Korrektur (oben) und mit Korrektur (unten)

Eine AVI-Korrektur kann nur durchgeführt werden, wenn für die aktuelle Konfiguration und Auflösung eine AVI-Kalibrierung eingestellt wurde.

AVI-Kalibrierung

HINWEIS: Die AVI-Kalibrierung verwendet eine im Gleithalter eingesetzte Methanküvette (L1250462) und ist von besonderem Nutzen bei hochpräzisen quantitativen Transmissionsmessungen. Eine AVI-Korrektur kann nicht durchgeführt werden, wenn im Probenraum ein Messzubehör eingebaut ist, wie z. B. eine UATR-Einheit.

Erstellen einer AVI-Kalibrierung:

> Klicken Sie im Menü Datenaufnahme auf die Option Standardisieren.

ODER

Klicken Sie auf dem Reiter **Erweiterte Einstellungen** in der **Werkzeugkiste** auf **AVI**. Befolgen Sie die Bildschirmanleitungen; nähere Angaben finden Sie in der Spectrum-Hilfedatei.



Abb. 82. Der Dialog "AVI Kalibrierung" fordert den Anwender dazu auf, die Methanküvette einzusetzen

Beenden der Software Spectrum

Wenn Sie die Software Spectrum beenden, können Sie eine geeignete Speicher-Option auswählen, die Ihrem Vorhaben bei der nächsten Softwareanwendung entspricht.

Möchten Sie dabei weiter mit den gleichen Daten arbeiten oder weitere Proben aus Ihrer Probentabelle vermessen, können Sie beim nächsten Start mit komplett eingestellten Daten beginnen. Falls Sie nicht mit den gleichen Daten beginnen möchten, speichern Sie alle Daten an den standardmäßigen Speicherorten, die bei der Softwareinstallation ausgewählt wurden.

Um die Software Spectrum zu beenden:

1. Klicken Sie im Menü Datei auf Beenden.

ODER

Klicken Sie auf in der rechten oberen Ecke des Fensters der Software Spectrum. Es wird der Dialog **Daten sichern** eingeblendet.

Save Options	×
The application is closing down. Please select one of the following options.	
Save for reload next time.	-
Help OK Cance	el

2. Wählen Sie in der Liste eine der Optionen:

Ungespeicherte Datensätze speichern. Es werden alle nicht gespeicherten Daten gespeichert und beim nächsten Hochfahren der Software startet diese mit standardmäßigem Layout und Einstellungen. Ihre gespeicherte Arbeitsfläche können Sie jederzeit aufrufen, wenn Sie sich auf diesem PC in der Software Spectrum anmelden.

Speichern zum Aufrufen beim nächsten Mal. Es werden alle nicht gespeicherten Daten gespeichert und beim nächsten Hochfahren der Software startet diese mit den aktuellen Spektren, Layout und Einstellungen. Sie können beim nächsten Softwarestart nach Ihrer Anmeldung auf diesem PC, Ihre Arbeiten dort fortsetzen, wo Sie aufgehört haben.

Beenden ohne Datensätze zu speichern. Es werden keine nicht gespeicherten Daten gespeichert und beim nächsten Hochfahren der Software Spectrum startet diese nach Ihrer Anmeldung auf diesem PC mit der standardmäßigen Arbeitsfläche.



Überblick

Dieser Abschnitt enthält Wartungsverfahren, die Anwender selbst ausführen können.

Folgende Verfahren werden beschrieben:

- Reinigen des Spektrometers
- Austauschen des Trockenmittels
- Spülen des Probenraums
- Spülen der Spektrometeroptik
- Austauschen der Probenraumfenster
- Austauschen der Strahlungsquelle
- Austauschen des Luftfilters der Hauptplatine

HINWEIS: Sie *müssen* beim Austauschen der Strahlungsquelle, des Trockenmittels oder der Probenraumfenster den geeigneten Assistenten der Software Spectrum, Spectrum ES oder AssureID verwenden, wie hier beschrieben wird. Bei den Wartungsverfahren wird die interne Temperatur des Spektrometers beibehalten, um das Eindringen und die Kondensation von Wasserdampf zu verhindern.

Reinigen des Spektrometers

Reinigen Sie die Außenseite des Spektrometers mit einem befeuchteten Tuch. Bei Bedarf kann ein mildes Spülmittel verwendet werden. Führen Sie immer an einer unauffälligen Stelle einen Fleckentest aus, bevor Sie das ganze Gerät reinigen.

Vermeiden Sie das Verschütten von Flüssigkeit in das Gerät. Wischen Sie externe Spritzer immer sofort auf.

Austauschen des Trockenmittels

	Normalerweise muss das Trockenmittel im Spektrometer nach etwa fünf Jahren ausgewechselt werden. Ein altes und verbrauchtes Trockenmittel setzt Feuchtigkeit frei.
VORSICHT	In Gegenden mit hoher Luftfeuchtigkeit empfehlen wir, das Trockenmittel häufiger zu tauschen und den Feuchtigkeitsgrad in Ihrem Spektrometer anhand des Feuchtigkeits-Schutzschilds zu überwachen. S. dazu die Angaben auf Seite 83).

Das Intervall zum Austausch des Trockenmittels wird auf dem Reiter **Strahlengang** der Spektrometereinstellungen mit der Option **Trockenmittel (Tage)** eingestellt (Abb. 83).



Abb. 83. Der Reiter "Strahlengang" in der Software Spectrum

Ist die Frist zum Austauschen des Trockenmittels abgelaufen, erscheint eine Warnmeldung in der Statusleiste und auf dem Reiter **Strahlengang** der Spektrometereinstellungen.

Die Warnmeldung verbleibt so lange, bis Sie der Software mitteilen, dass das Trockenmittel ausgetauscht wurde. Um das Austauschintervall des Trockenmittels zurückzusetzen, klicken Sie auf **Ausgetauscht**, um die Warnmeldungen zu löschen.

Sie können auch bei den Spektrometer-Komponententests zum Austauschen des Trockenmittels aufgefordert werden.

Zum Ersetzen des Trockenmittels benötigen Sie das Trockenmittelaustausch-Kit (L1605036). Dieses enthält einen Schraubenschlüssel und zwei Päckchen: ein großes und ein kleineres.

Prüfen Sie die Feuchtigkeitsanzeigekarte im Plastikbeutel des größeren Päckchens. Ist die Karte pinkfarben, befindet sich Feuchtigkeit im Päckchen und Sie sollten es entsorgen. Benutzen Sie für einen Austausch nur Trockenmittelpäckchen deren Anzeigekarte blau ist.



Das Spektrometer muss eingeschaltet und von der Software Spectrum, Spectrum ES oder AssureID gesteuert sein. Starten Sie den Trockenmittelaustausch-Assistent anhand der Spektrometer-Werkzeugkiste oder – falls die Spektrometer-Komponententests hohe Feuchtigkeit als Problem nachweisen – durch Klicken auf **Trockenmittelaustausch-Assistent starten**. Sie können den Assistent auch starten, indem Sie im Dialog **Feuchtigkeits-Schutzschild** auf **Trockenmittel austauschen** klicken.

HINWEIS: In der Software AssureID ist die Spektrometer-Werkzeugkiste in der Gruppe Spektrometer und Zubehöre konfigurieren des Menüs Werkzeuge verfügbar.

Um das Trockenmittel bei laufender Spectrum-Software zu tauschen:

- Klicken Sie im Menü Einstellungen auf Spektrometer. Die Reiter der Spektrometereinstellungen werden eingeblendet.
- Öffnen Sie den Reiter Erweiterte Einstellungen und klicken Sie auf Werkzeugkiste. Der Spektrometer Werkzeugkiste wird eingeblendet.

Adjustments Tool	хоо		X
	WCal:	Set the wavelength calibration for your instrument.	
· • •	Align:	Align your instrument.	
- W -	Centre Burst:	Find the centreburst position for your instrument.	
IVA	AVI Calib:	Perform an AVI calibration for your instrument.	
P	Replace Source:	Runs the Source Replacement Wizard	
	Replace Windows:	Runs the Sample Area Window Replacement Wizard	
~	Replace Desiccant:	Runs the Desiccant Replacement Wizard	
			Exit
•	0	2	

 Klicken Sie auf das Symbol Der Trockenmittelaustausch-Assistent wird eingeblendet.

Desiccant Replacement Wizard	X
Welcome to the Desiccant Replacement Wizard	
This wizard will guide you through changing the desiccant inside your Spectrum Two.	
You will need the Spectrum Two Desiccant Replacement Kit (L1600244), which contains replacement desiccant packs and a wrench.	
We strongly recommend that you complete the procedure in the minimum time to a approximately 20 minutes.	woid ingress of water vapour. It will take
If you require any further assistance go to:	
www.perkinelmer.com/SpectrumTwoSupport	
	Next > Cancel

4. Befolgen Sie die Bildschirmanleitungen.

Nachdem Sie das Austauschverfahren beendet haben, wird die Anzeige **Trockenmittel (Tage)** auf 1800 Tage zurückgesetzt.

Spülen des Spektrometers

Spülen Sie den Probenraum des Spektrometers, wenn Sie sicher stellen möchten, dass im Spektrum keine störenden Peaks von Wasserdampf oder CO₂ auftreten. Die Spülanschlüsse befinden sich an der Geräteunterseite (Abb. 84).



Eingangsspülanschluss

Abb. 84. Positionen der Spülanschlüsse an der Geräteunterseite

Obwohl die Spülanschlüsse vorhanden sind, muss unter normalen Umständen die Optik nicht gespült werden. Das Spectrum Two wurde werksseitig nach der Fertigung gespült und abgedichtet. Um die Optik zu spülen, müssen Sie die Abdichtung durchbrechen, was einen Garantieverlust für Ihr Spektrometer zur Folge hat.

Sie können entweder mit trockener Luft oder mit Stickstoff spülen, um Feuchtigkeitsreste zu verdrängen, Stickstoff ist jedoch vorzuziehen, da er auch Kohlendioxid entfernt.

Eine normale Gasflasche mit Stickstoff (oder trockener Luft) enthält 6,26 m³ Gas bei 150 bar. Stellen Sie sicher, dass das Gas frei von Öl, Wasser oder Staubteilchen größer als 25 μ m ist.



Stellen Sie das Spektrometer nicht in einen schlecht belüfteten Bereich des Labors, wenn Sie Stickstoff als Spülgas verwenden.

Sauerstoffmangel in geschlossenen Räumen löst keinen Erstickungsreflex aus, kann jedoch ohne Vorwarnung innerhalb von Sekunden zu Fehleinschätzungen, Konfusion oder Bewusstlosigkeit führen.



Zur Spülung des Spektrometers dürfen keine brennbaren Gase verwendet werden. Das Gerät enthält eine heiße Strahlungsquelle und es kann zu einem Brand oder zu einer Explosion kommen. Verwenden Sie zur Spülung nur reinen, trockenen und ölfreien Stickstoff oder Luft.



Die Spülgasanschlüsse am Gerät dürfen nicht direkt mit Gasflaschen oder anderen Hochdruckbehältern verbunden werden. Verwenden Sie immer einen Druckminderer und stellen Sie ihn auf höchstens 6,9 kPa, bevor Sie sein Ventil öffnen.

Spülung des Probenraums

Ein durchsichtiger Kunststoffschlauch, 1/4" i. D., (L1600245) wird für die Verbindung zwischen Gasflasche und Spülgasanschluss des Probenraums mitgeliefert.

Zum Anschließen der Probenraumspülung:

- 1. Trennen Sie in der Software die Verbindung zum Spektrometer.
- 2. Schalten Sie das Spektrometer aus und entfernen Sie das Kabel vom Netzgerät und alle anderen an der Rückseite angeschlossenen Kabel.
- 3. Entfernen Sie Messzubehöre aus dem Probenraum; das Gerät muss umgedreht werden.
- 4. Drehen Sie das Gerät behutsam um und legen Sie es mit der Rückseite auf ein weiches Tuch.
- 5. Orten Sie den Spülgasanschluss des Probenraums anhand der Darstellung in Abb. 85.



Probenraum-Spülanschluss

Abb. 85. Spülgasanschluss des Probenraums

- 6. Führen Sie den Schlauch durch die Aussparung in der Bodenplatte des Spektrometers unter der Schlauchklemme hindurch und drücken Sie das Schlauchende auf den gerippten Stutzen des Spülgasanschlusses.
- 7. Verbinden Sie das andere Schlauchende mit dem Druckminderer der Gasflasche.

HINWEIS: Achten Sie darauf, dass der geminderte Druck nicht 6,9 kPa überschreitet.

- 8. Öffnen Sie das Ventil am Druckregler bis zu einer Strömungsrate von 4 l/min. Für die vollständige Spülung des Probenraums benötigen Sie etwa 2 Minuten.
- 9. Schließen Sie das Flaschenventil, wenn Ihre Messungen beendet sind.
- 10. Entfernen Sie den Verbindungsschlauch, indem Sie ihn vom Spülanschluss abziehen.

Spülung der Optik

Spektrometer-

Eingangsspülanschluss

Das Spectrum Two wurde bei der Herstellung gespült und abgedichtet.
Die Bolzen in den Spülanschlüssen sind mit manipulationssicherem Lack
überzogen. Werden die Stopfen entfernt, kann es einen Garantieverlust
für Ihr Spektrometer bedeuten. Informieren Sie sich für ein volles
Verständnis der Zusammenhänge, bevor Sie fortfahren.

Bei normalen Einsätzen muss das Spektrometer nicht gespült werden.

Zum Anschließen der Optikspülung ist das optionale Spektrometer-Spülkit (L1600234) erforderlich. Es enthält Schläuche, zwei gerade und zwei rechtwinklige Verbinder, eine Flachzange und zwei Stopfen, um die Spülanschlüsse nachträglich wieder zu verschließen.

- 1. Trennen Sie in der Software die Verbindung zum Spektrometer.
- 2. Schalten Sie das Spektrometer aus und entfernen Sie das Kabel vom Netzgerät und alle anderen an der Rückseite angeschlossenen Kabel.
- 3. Entfernen Sie Messzubehöre aus dem Probenraum; das Gerät muss umgedreht werden.
- 4. Drehen Sie das Gerät behutsam um und legen Sie es mit der Rückseite auf ein weiches Tuch.
- 5. Orten Sie den Spektrometer-Eingangsspülanschluss, der in Abb. 86 dargestellt ist.
- 6. Lösen und entfernen Sie anhand eines hexagonalen Schraubenschlüssels M3 den Bolzen im Spüleingang (Abb. 86). Bewahren Sie den Bolzen für zukünftigen Gebrauch auf.

HINWEIS: Es handelt sich um spezielle Bolzen mit einem Dichtungsring.



Abb. 86. Bolzen zum Sichern des Spektrometer-Spüleingangsanschlusses

102 . Handbuch Spectrum Two

7. Schrauben Sie einen der mitgelieferten geraden Verbinder in den Spüleingang ein und ziehen Sie ihn mit Hilfe der Flachzange fest (Abb. 87).



Abb. 87. Gerader Verbinder am Spektrometer-Spüleingangsanschluss

8. Schrauben Sie einen der mitgelieferten rechtwinkligen Verbinder ein und ziehen Sie ihn mit Hilfe der Flachzange fest (Abb. 88).



Abb. 88. Einschrauben des rechtwinkligen Verbinders

- 9. Schneiden Sie vom mitgelieferten Schlauch ein Stück mit passender Länge ab.
- 10. Schieben Sie ein Ende des Schlauchs in den rechtwinkligen Verbinder (Abb. 89).



Abb. 89. Am Spektrometer-Spüleingang befestigter Gasschlauch

11. Verbinden Sie das andere Schlauchende mit dem Druckregler der Gasflasche.

HINWEIS: Achten Sie darauf, dass der geminderte Druck nicht 6,9 kPa überschreitet.

12. Wiederholen Sie die Schritte 6–10, um ein weiteres Schlauchstück am Spektrometer-Ausgangsspülanschluss zu befestigen (Abb. 90).

Sie müssen zum Spülen den Bolzen aus dem Spülausgang entfernen, damit das Gas austreten kann, ein Schlauchanschluss ist jedoch nur dann erforderlich, wenn das Gas außerhalb des Arbeitsbereichs ausströmen soll.



Abb. 90. Am Spektrometer-Spülausgang befestigter Gasschlauch

- 13. Führen Sie den Schlauch durch die Schlauchklemme und durch die Ausgangsöffnung zu einer passenden Stelle (z. B. in einen Laborabzug).
- 14. Öffnen Sie das Ventil des Druckreglers bis zu einer Strömungsrate von 2 l/min. Für die vollständige Spülung der Optik benötigen Sie etwa 10 Minuten.
- 15. Schließen Sie das Flaschenventil, wenn Ihre Messungen beendet sind.
- 16. Lösen Sie den Schlauch vom Spüleingang des Spektrometers und falls verwendet auch vom Spülausgang. Drücken Sie zum Lösen auf den gefederten Anschluss und ziehen Sie den Schlauch behutsam heraus.
- 17. Schrauben Sie die mitgelieferten Stopfen in die abgewinkelten Verbinder.

ODER

Falls Sie das Spülen der Optik abgeschlossen haben, schrauben Sie die Bolzen, die bei Schritt 6 entfernt wurden, wieder in die Spülanschlüsse.

HINWEIS: Wenn Sie die Originalbolzen verlegt haben, setzen Sie die Stopfen ein und verständigen Sie die PerkinElmer-Kundenbetreuung, um Ersatzbolzen zu erhalten.

Austauschen der Strahlungsquelle

Wenn bei Komponententests als **Empfohlene Aktion** ein Austauschen der Strahlungsquelle angezeigt wird, benötigen Sie das Strahlungsquellenaustausch-Kit (L1600231). Dieses enthält eine Ersatzlampe, einen Lampenverdoppelungsspiegel und einen hexagonalen Schraubenschlüssel von 2,5 mm.

Für den Austausch der Strahlungsquelle muss das Spektrometer eingeschaltet und mit der Software Spectrum, Spectrum ES oder AssureID verbunden sein. Den Assistenten für den Lampenwechsel können Sie in der **Spektrometer Werkzeugkiste** aufrufen oder – falls die Komponententests die Strahlungsquelle als Fehlerursache erkannt haben – durch Klicken auf **Strahlungsquellenaustausch-Assistent starten** in diesem Dialogfenster.

HINWEIS: In der Software AssureID ist die Spektrometer Werkzeugkiste in der Gruppe Spektrometer und Zubehöre konfigurieren des Menüs Werkzeuge verfügbar.



Zum Austauschen der Strahlungsquelle:

- 1. Klicken Sie im Menü **Einstellungen** der Software Spectrum auf **Spektrometer**. Die Reiter der Spektrometereinstellungen werden eingeblendet.
- 2. Öffnen Sie den Reiter Erweiterte Einstellungen und klicken Sie auf die Schaltfläche Spektrometer Werkzeugkiste.

Das Dialogfenster Spektrometer Werkzeugkiste wird eingeblendet.

Adjustments Toolb	xox		×
	WCal:	Set the wavelength calibration for your instrument.	
· Φ	Align:	Align your instrument.	
₩.	Centre Burst:	Find the centreburst position for your instrument.	
AVI	AVI Calib:	Perform an AVI calibration for your instrument.	
P	Replace Source:	Runs the Source Replacement Wizard	
٩	Replace Windows:	Runs the Sample Area Window Replacement Wizard	
~	Replace Desiccant:	Runs the Desiccant Replacement Wizard	
			Exit



Der Strahlungsquellenaustausch-Assistent wird eingeblendet.



- 4. Befolgen Sie die Bildschirmanleitungen.
- 5. Wir empfehlen Ihnen, nach Abschluss des Verfahrens einen Komponententest durchzuführen, um sicher zu stellen, dass Ihr Spektrometer korrekt funktioniert.
- 6. Warten Sie etwa 2 Stunden zur Temperaturstabilisierung der Lampe ab, bevor Sie das Spektrometer verwenden.

HINWEIS: Wenn Sie über die AVI-Korrektur verfügen, sollten Sie nach jedem Lampenwechsel eine neue AVI-Kalibrierung durchführen.

Ein- und Ausbau der Probenraumfenster

Der IR-Strahl verläuft durch den Probenraum, indem es die Probenraumfenster durchdringt. Er tritt durch das linke Fenster in den Probenraum ein, geht durch die Probe und verlässt den Probenraum durch das rechte Fenster in Richtung Detektor.

Das Spektrometer Spectrum Two ist mit zweierlei Probenraumfenster verfügbar: KBr für einen erweiterten Scanbereich und ZnSe für höhere Luftfeuchtigkeit. Die hygroskopischen KBr-Fenster können mit der Zeit undurchsichtig werden. ZnSe-Fenster sind nicht hygroskopisch und müssen nur ausgetauscht werden, wenn Sie beschädigt wurden.

Zum Austauschen der Fenster benötigen Sie das passende Austausch-Kit: L1600241 für KBr-Fenster oder L1600242 für ZnSe-Fenster. Das Kit enthält ein Paar Ersatzfenster mit Dichtungen und einen hexagonalen Schraubenschlüssel von 1,5 mm.



ZnSe ist bei einer Einnahme hoch giftig. Vermeiden Sie es, das Fenstermaterial zu berühren, indem Sie ausschließlich das Montagewerkzeug verwenden.

VORSICHT

Vermeiden Sie jeden Kontakt von Feuchtigkeit mit den Oberflächen der Fenster. Berühren Sie die Fenster nicht und hauchen Sie nicht darauf.

Für den Austausch muss das Spektrometer eingeschaltet und mit der Software Spectrum, Spectrum ES oder AssureID verbunden sein.

HINWEIS: In der Software AssureID ist die Spektrometer Werkzeugkiste in der Gruppe Spektrometer und Zubehöre konfigurieren des Menüs Werkzeuge verfügbar.

Zum Austauschen der Probenraumfenster:

- 1. Klicken Sie im Menü **Einstellungen** der Software Spectrum auf **Spektrometer**. Die Reiter der Spektrometereinstellungen werden eingeblendet.
- Öffnen Sie den Reiter Erweiterte Einstellungen und klicken Sie auf die Schaltfläche Spektrometer Werkzeugkiste.
 Das Dialogfenster Spektrometer Werkzeugkiste wird eingeblendet.

Adjustments Tool	box		×
	WCal:	Set the wavelength calibration for your instrument.	
•	Align:	Align your instrument.	
*	Centre Burst:	Find the centreburst position for your instrument.	
AVI	AVI Calib:	Perform an AVI calibration for your instrument.	
	Replace Source:	Runs the Source Replacement Wizard	
	Replace Windows:	Runs the Sample Area Window Replacement Wizard	
	Replace Desiccant:	Runs the Desiccant Replacement Wizard	
			Exit

3. Klicken Sie auf

Der Fensteraustausch-Assistent wird eingeblendet.

Window Replacement Wizard	×
Welcome to the Window Replacement Wizard	
This wizard will guide you through changing the sample area windows inside your Spectrum Two	
You will need the Spectrum Two Window Replacement Kit (L1600241 for KBr Windows, L1600242 for ZnSe Windows), which contains the replacement windows and the tools necessary to change them.	······································
It will take approximately 15 minutes to complete this wizard. We strongly recommended the minimum time to avoid ingress of water vapour.	and that you complete the procedure in
If you require any further assistance go to: www.perkinelmer.com/SpectrumTwoSupport	
	Next > Cancel

4. Befolgen Sie die Bildschirmanleitungen.
Austauschen des Luftfilters der Hauptplatine

Wenn Ihr Spektrometer längere Zeit in staubiger Umgebung betrieben wird, kann sich der Luftfilter der Hauptplatine verstopfen. Man erkennt es daran, dass das Gerät längere Zeit zur Stabilisierung braucht. Für den Filteraustausch benötigen Sie das Luftfilter-Kit (L1601717).

HINWEIS: Die Filtermatte kann in Wasser gewaschen werden. Achten Sie darauf, dass er vollkommen trocken ist, bevor Sie ihn wieder in das Gerät einbauen.

- 1. Trennen Sie in der Software die Verbindung zum Spektrometer.
- 2. Schalten Sie das Spektrometer aus und entfernen Sie das Kabel vom Netzgerät und alle anderen an der Rückseite angeschlossenen Kabel.
- 3. Entfernen Sie Messzubehöre aus dem Probenraum; das Gerät muss umgedreht werden.
- 4. Drehen Sie das Gerät behutsam um und legen Sie es mit der Rückseite auf ein weiches Tuch (Abb. 91).



Abb. 91. Hauptplatinengehäuse an der Geräteunterseite

 Lösen Sie mit einem Schlitzschraubenzieher die Befestigungsschrauben an der Abdeckung des Hauptplatinengehäuses und nehmen Sie diese ab (Abb. 92).
 Bewahren Sie die Schrauben an einer sicheren Stelle auf.

> Die Hauptplatine enthält Bauteile mit statischer elektrischer Ladung.
> Berühren Sie nicht die Platine oder deren Komponenten beim Austauschen des Luftfilters.

VORSICHT



Abb. 92. Entfernen der Befestigungsschrauben

6. Orten Sie den Luftfilter (Abb. 93).



Abb. 93. Position des Filters

7. Entfernen Sie den verbrauchten Filter (Abb. 94).



Abb. 94. Entfernen des verbrauchten Filters

8. Setzen Sie einen neuen Filter ein und achten Sie darauf, dass er flach anliegt.

9. Legen Sie die Abdeckung zurück an ihre Stelle und sichern Sie sie mit den in Schritt 2 gelösten Halteschrauben.

Achten Sie darauf, dass das weiße Hauptplatinenkabel, wie in Abb. 95 dargestellt, nicht eingeklemmt wird, sondern durch die Aussparung des Platinengehäuses führt.



Abb. 95. Einsetzen der Abdeckung des Hauptplatinengehäuses

HINWEIS: Wenn die Abdeckung falsch aufliegt, können nicht alle Befestigungsschrauben eingeführt werden.

Ergänzende Zubehörteile

Folgende optionale Zubehör- und Ersatzteile sind verfügbar:

Optionales Zubehör

Bestell-Nr.	Beschreibung		
L1600238	Tragbarkeitspaket für Spectrum		
L1600233	Batteriesatz für Spectrum Two (mit PKW-Adapter, 12 V)		
L1600246	Wireless Router Kit für Spectrum Two		
L9004198	Funk-Dongle		
L9004128	PKW-Adapter, 12 V, für Spectrum Two		
L9004199	Tragetasche für Spectrum Two		
L9004200	Tragetasche für UATR-Einheit des Spectrum Two		
L1250404	Kit für MIR-Validierung		
L1202057	Polystyrol-Testfilm, 0,038 mm (nicht rückführbar)		
L1250462	Methan-Testküvette (für AVI)		
L1600234	Kit für Optikspülung des Spectrum Two		
L1600235	Kit Für Probenraumspülung des Spectrum Two		
L1200466	Ethernet-Verbindungskabel		
L9004196	Barcode-Leser		
5101188	Kit für Kristallpolierung		
L1365311	Kit für FTIR-Messungen von Flüssigproben und Verreibungen		
L1365312	Mehrzweck-Kit für FTIR-Messungen		

Ersatzteile

Bestell-Nr.	Beschreibung
L1600243	Strahlungsquellenaustausch-Kit für Spectrum Two
L1600244	Trockenmittelaustausch-Kit für Spectrum Two
L1600242	ZnSe Fensteraustausch-Kit für Spectrum Two
L1600241	KBr Fensteraustausch-Kit für Spectrum Two
L1601717	Hauptplatinenluftflter für Spectrum Two
L9004169	USB-Kabel
L1200466	Ethernet-Verbindungskabel
L1600232	Kit J-Stoppkarten für Spectrum Two
L9002298	Netzgerät für Spectrum Two
L1600216	Probenraumdeckel für Spectrum Two
L1202057	Polystyrol-Testfilm, 0,038 mm (nicht rückführbar)
L1250462	Methan-Testküvette für AVI-Kalibrierung

Nachrüstungen

Nachrüstungen erfordern eine Installation durch den PerkinElmer-Kundendienst.

Bestell-Nr.	Beschreibung		
L1600265	Nachrüstung Standard- auf Temperaturstabilisierter Detektor		
L1600266	Nachrüstung mit APV-Filterrad		

<u>Anhänge</u>

Anhang 1: Anschlussdetails

	Port/LED	Beschreibung	Anschluss- Typ	Spannung	Max. Strom- stärke
A	USB	Standardmäßiges Interface zwischen PC und Spektrometer.	USB (Typ B)	_	_
В	ethernet	100 Base-T Ethernet-Anschluss Standardmäßiges Interface zwischen einem LAN und dem Spektrometer. Auch für direkten PC-Anschluss geeignet.	Ethernet	<5 V	<100 mA
С	EXT DETECTOR	Port für Stromversorgung des optionalen Wireless Router oder für ein externes Zubehör.	Weiblicher, hoch dichter 15-Wege d- Anschluss; ±CAN-Bus; i-Taste	+12 V Ausgang	500 mA
				-12 V Ausgang	100 mA
				Analog- eingänge ±12 V max.	
				1K5 Ohm	
				0 V	
E	DC Power Port	Gleichstrom-Port; Anschluss des Netzgeräts, des optionalen Batteriesatzes oder des PKW- Adapters.		18 V	3 A

Anhang 2: Spektrometervalidierungs-Kit

Das MIR Leistungsvalidierungs-Kit (L1250404) enthält eine Polystyrol- und eine NG11 Schottglas-Referenzprobe.

Mit der Software Spektrum (ab Version 10.3) werden auch Makros geliefert, die mit dem Spektrometervalidierungs-Kit bei der Erstellung eines Zertifizierungsreports Ihres Spektrometers verwendet werden können.

Anhang 3: Dekontamination und Reinigung

Bevor Sie eine andere Reinigungs- oder Dekontaminierungsmethode anwenden, als das von PerkinElmer vorgegebene Verfahren, sollten Sie bei PerkinElmer nachfragen, ob Ihre Methode das Gerät nicht beschädigt.

Dekontamination

Wenn Kunden einen Messplatz und/oder Zubehör an PerkinElmer zur Reparatur, Wartung, Garantieaustausch oder Inzahlungnahme senden möchten, müssen die betreffenden Teile als rein und frei von Kontamination zertifiziert sein.

Der Laborleiter des Kunden ist für das Dekontaminierungsverfahren ("Equipment Decontamination Procedure") und für das Ausfüllen des Dekontaminationszertifikats ("Certificate of Decontamination") zuständig. Diese Dokumente sind auf der öffentlichen Internetseite von PerkinElmer verfügbar, unter:

http://las.perkinelmer.com/OneSource/decontamination.htm

Alternativ können Sie auch Ihre regionale PerkinElmer-Kundenbetreuung anrufen, unter:

Customer Care USA:	1-800-762-4000	(Innerhalb der USA)	
(8:30 a.m. – 7 p.m. EST)	(+1) 203-925-4602	(Außerhalb der USA)	
PerkinElmer Deutschland:	(0800) 181 00 32		
PerkinElmer Österreich:	(0800) 111 933		
PerkinElmer Schweiz:	(0800) 000 015		

Falls Sie sich außerhalb dieser Regionen befinden, rufen Sie ihre regionale PerkinElmer-Niederlassung an.

Reinigen des Spektrometers

Externe Oberflächen können mit einem weichen Tuch gereinigt werden, das mit einem milden Spülmittel befeuchtet ist. Verwenden Sie keine aggressiven Putz- oder Scheuermittel.

Anhang 4: Entsorgung von PerkinElmer-Produkten



Das Kennzeichen aus einem durchgestrichenen Abfallbehälter und einem rechteckigen Balken darunter zeigt an, dass das Produkt der "Waste Electrical and Electronic Equipment" (WEEE) Richtlinie unterliegt und nicht als öffentlicher Restmüll entsorgt werden darf. Solcherart gekennzeichnete Produkte müssen getrennt und gemäß regionalen Vorschriften gesammelt und entsorgt werden.

Programmziele sind die Erhaltung, der Schutz und die Verbesserung der Umweltqualität, zum Schutz der Gesundheit und für einen umsichtigen und vernünftigen Umgang mit unseren Ressourcen. Die besondere Umsetzung von WEEE ist unabdingbar zum Vermeiden, dass Schadstoffe in Recyclingmaterialien oder im Reststoffstrom in Umlauf gebracht werden. Diese Vorgehensweise ist der effizienteste Weg zum Schutz der Umwelt unserer Kunden.

Die Anforderungen für Wertstoffsammlung, Weiterverwendung, Wiederverwertung und die Wiederaufnahmeprogramme werden durch die örtliche Aufsichtsbehörde gestellt. Informieren Sie sich bei der verantwortlichen Person vor Ort (z. B. Ihr Laborleiter) oder einem autorisierten Repräsentanten über die geltenden Entsorgungsvorschriften.

Spezifische Informationen zu den PerkinElmer-Produkten finden Sie auf der folgenden PerkinElmer-Internetseite:

Internetadresse:

http://las.perkinelmer.com/OneSource/Environmental-directives.htm

PerkinElmer-Systeme können Produkte anderer Hersteller enthalten. Diese Hersteller sind direkt verantwortlich für das Sammeln und Verwerten ihrer Reststoffe entsprechend der WEEE-Richtlinie. Vor der Entsorgung dieser Produkte treten Sie bitte mit den Herstellern in Kontakt.

Die Namen und die Webadressen finden Sie auf der oben genannten Internetseite von PerkinElmer.

120 . Handbuch Spectrum Two