

Tutorial zur UVWinLab 6.4: Methode Scan mit Auswertung

Inhaltsverzeichnis

Allgemeines.....	3
Arbeiten unter Simulation	4
Der UVWinLab-Explorer.....	5
Methoden erstellen und speichern.....	6
Methode erstellen	6
Methode speichern	7
Methodentypen.....	7
Methode sperren.....	7
Die Messparameter.....	9
Seite „Datenaufnahme“	9
Die Zubehörseiten	10
Die Korrekturen-Seite	11
Basislinie, wann und wozu?	11
Reflexions-Korrektur:	13
Erstellen eines eigenen Korrektur-Spektrums.....	14
Probentabelle.....	15
Seite Proben-information	15
Spalten hinzufügen	15
Spaltentypen	15
Automatische Probenamen.....	18
Starten der Messung	19
Datenverarbeitung	21
Gleichungen (Formeln)	22
Beispiel: Extinktion bei einer Wellenlänge (Yval)	22
Benennen von Gleichungen.....	23
Ergebnistabelle formatieren	25
Verrechnung mit der Einwaage (A1%)	25
Bedingte Formatierung (Pass/Fail).....	25
Gleichung: Bestimmung einzelner Peaks.....	27
Glättung.....	29

Peaktabelle	30
Was ist ein Task im Vergleich zur Methode?	31
Formatieren und Exportieren eines Spektrums	34
Ergebnisse-Seite	34
Zoomen.....	35
Grafik formatieren.....	37
Spektren überlagern.....	38
Spektren hinzufügen zur Grafik	39
Gemessene Spektren hinzufügen zur Probenliste	39
Spektren manuell exportieren als Datei.....	40
Grafik exportieren in Zwischenablage	41
Report-Optionen einstellen	42
Seite Ausgabe	42
Reportvorlage	42
Report auslösen	42
Spektren und Tabellen automatisch exportieren	45
Report-Vorlagen erstellen	48
Communiqué aufrufen.....	48
Kopieren zwischen zwei Vorlagen.....	49
Layout-Werkzeuge	49
Maßeinheit.....	51
Seitenformat	51
Header und Footer	51
Neue Seite einfügen.....	52
Elemente einfügen: Click and Draw !	52
Neue Überschrift einfügen und formatieren.....	52
Firmenlogo einfügen	54
Platzhalter für die Messdaten:	55
Allgemeine Variablen.....	55
Task-spezifisches:	56
Proben-spezifisches:.....	56
Speziell formatierte Tabellen: Benutzerdefinierte Objekte.....	56
Zwischen-Ergebnis als Preview	57
Vorlage speichern.....	58
Verknüpfen des neuen Vorlagen mit der Methode	58

Allgemeines

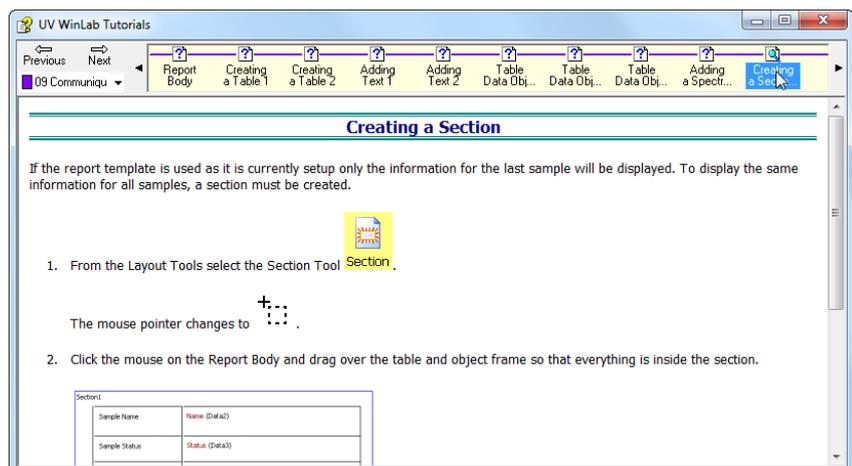
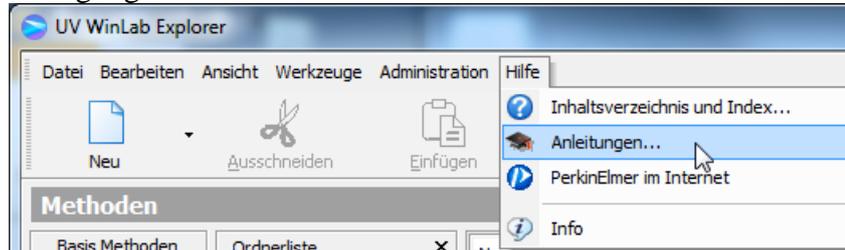
Deutsche Hilfen

Diese Schnellanleitung **ersetzt nicht** die ausführlicheren offiziellen Dokumente (Manuals, Release Notes, Tutorials), die auf den Installations-CDs mitgeliefert sind. Sie dient nur dem schnellen Verständnis der Software, bleibt aber an vielen Stellen ungenau.

Deutschsprachige Hilfen für UVWinLab werden Ihnen auf Wunsch gerne zugesandt.

Englische Hilfen

Nach der Installation der Original UVWinLab steht Ihnen eine ausführliche englischsprachige **Online-Hilfe** (Taste F1 drücken) samt vieler **Tutorials** (Unter dem Menüpunkt „Help“) zur Verfügung:

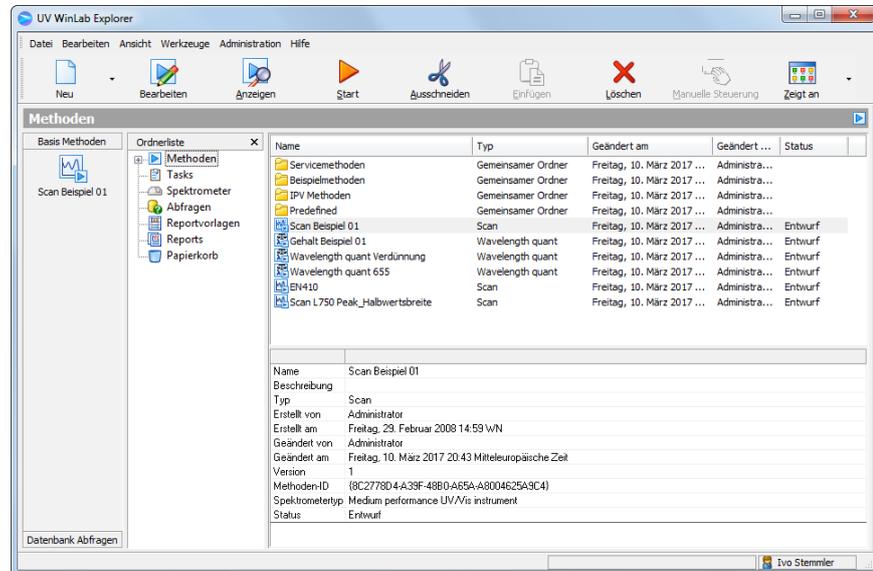


	<p>Interessant ist auch das „Getting Started“ Video in den Tutorials.</p> <p>Auf der Installations-CD befindet sich zudem ein Handbuch in Form einer PDF-Datei, die auf der Online-Hilfe basiert.</p>
Dieses Dokument anschauen	<p>Falls Sie dieses Dokument in MS Word anschauen, so empfiehlt sich Ansicht > Navigationsbereich zu verwenden. Dadurch haben Sie links alle Überschriften und können mit einem Klick darauf leicht im Dokument navigieren. Eine vergleichbare Ansicht kann auch für das *.pdf-Dokument gewählt werden</p>
Vorbereitung	<p>UVWinLab muss installiert sein. Ein Bediener mit Benutzer-Rechten (UVWinLab Standard) bzw. Developer-Rechten (UVWinLab ES). Bitte beachten Sie dazu das entsprechende Tutorial.</p>
Arbeiten unter Simulation	<p>Falls im Simulationsmodus gearbeitet werden soll, so empfiehlt sich das Dokument „Tipp Methodenentwicklung mit Simulation“.</p>

Der UVWinLab-Explorer

Allgemeines

Nach dem Öffnen der Software erscheint ein Bildschirm, der ähnlich dem folgenden ist:

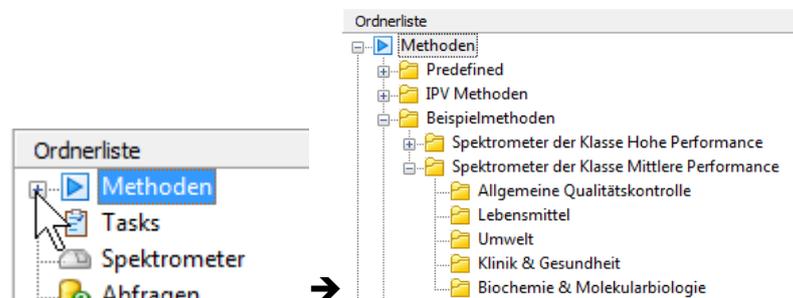


Dieser Bildschirm ist dem Erscheinungsbild gängiger Software nachempfunden, wie z.B. MS Outlook. Dies soll dem Anwender den Einstieg in die Software erleichtern. Je nach dem, was in der „**Ordnerliste**“ ausgewählt wurde, erscheinen die zugehörigen Elemente rechts davon.

Wählt man rechts ein Element aus, erscheinen darunter die **Details** zu diesem Element

Plus-Zeichen

Bitte beachten Sie, dass jedes **Plus** anzeigt, dass man noch **Unterverordner** vorfindet, wenn man auf das Pluszeichen klickt (vergleichbar dem Windows-Explorer):



Beispielmethoden

Es gibt eine Reihe an **Beispielen (Methoden und Reportvorlagen)**, die automatisch mit der Software installiert wurden. Des Weiteren gibt es noch eine Reihe Beispiele, die zum Zeitpunkt der Erstellung der Installations-CD noch nicht zur Verfügung standen. Bitte wenden Sie sich ggf. an Ihre Verbindungsperson von PerkinElmer. U.U. stehen auf unsere Homepage auch Methoden zum Download bereit (www.perkinelmer.com).

Methoden erstellen und speichern

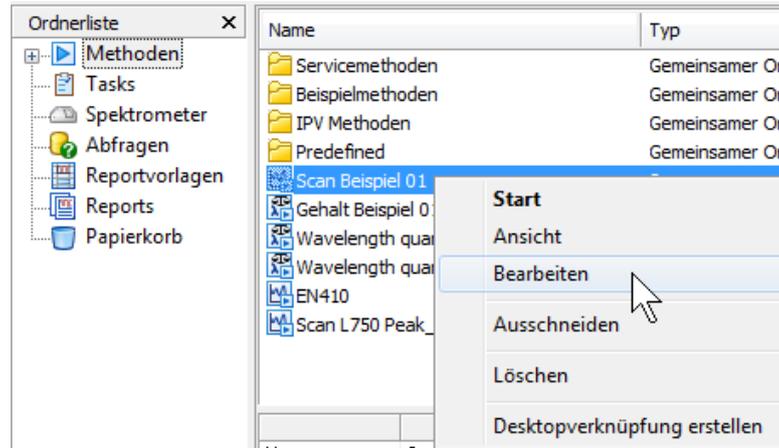
Methode erstellen

Am einfachsten öffnet man dazu eine vorhandene Methode, ändert sie und speichert sie unter neuem Namen wieder ab.

Beispielmethode öffnen

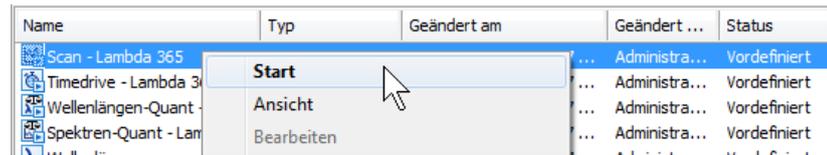


Man kann z.B. eine Beispielmethode öffnen, die auch gleich einige Berechnungsmöglichkeiten aufzeigt. Der Methodenentwickler sollte dies nach Möglichkeit nicht per Doppelklick, sondern mit der **rechten Maustaste** > **Bearbeiten** tun. Gleiches gilt übrigens auch für das Öffnen eines Tasks. Ein Doppelklick würde die Methode im Modus „**Start**“ öffnen. Dies eignet sich für den Bediener, der die Methode nur noch starten. Im Modus Start können manche Methodenparameter möglicherweise nicht verändert werden.



Vordefinierte Methode öffnen

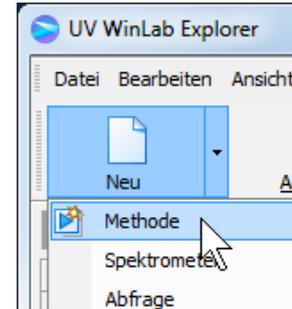
Mit der Installation eines Instruments installiert UVWinLab V6 vordefinierte Methoden für alle Methodentypen. Diese haben den Status „Vordefiniert“ und können nicht überschrieben werden. Dies hat den Vorteil, dass sie unbeschrieben sind und immer gleich vorliegen. Das Öffnen einer solchen Methode ist der beste und sicherste Weg, eine eigene Methode aufzubauen.



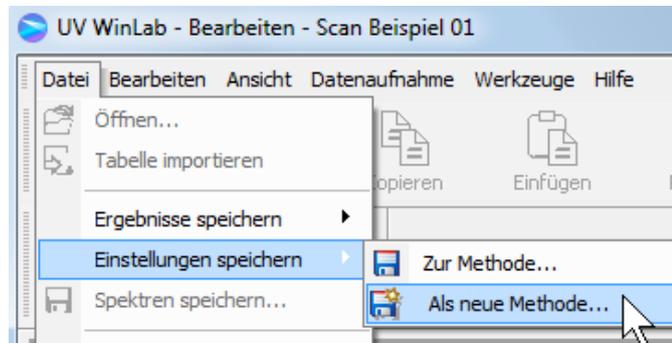
Es empfiehlt sich diese Methode gleich unter einem eigenen Namen zu speichern und erneut zu öffnen.

Neue Methode per Assistent erstellen

Alternativ kann man eine Methode auch über den Assistent öffnen.



Methode speichern



Nach Verändern der Parameter und Zuordnung des gewünschten Report-Vorlagen wird sie dann einfach über **„Datei > Einstellungen speichern > Als neue Methode...“** unter einem neuen Namen abgespeichert.

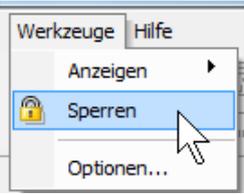
Mit **„Datei > Einstellungen speichern > Zur Methode...“** wird überschrieben. Diese Funktion ist übrigens NICHT auswählbar, wenn z.B. die Methode per Doppelklick (= Modus „Start“) gestartet wurde.

Methodentypen

Methodentyp	Funktion
Scan	Aufnahme von Spektren
Wavelength program	Nimmt nur einzelne Wellenlängen auf
Timedrive	Nimmt bei einer Wellenlänge den zeitlichen Verlauf des Signals auf („ Kinetik “)
Wavelength Quant	Gehaltsbestimmung bei fester Wellenlänge
Scanning Quant	Gehaltsbestimmung über Peak-Funktionen (Fläche, Maximum)

Methode sperren

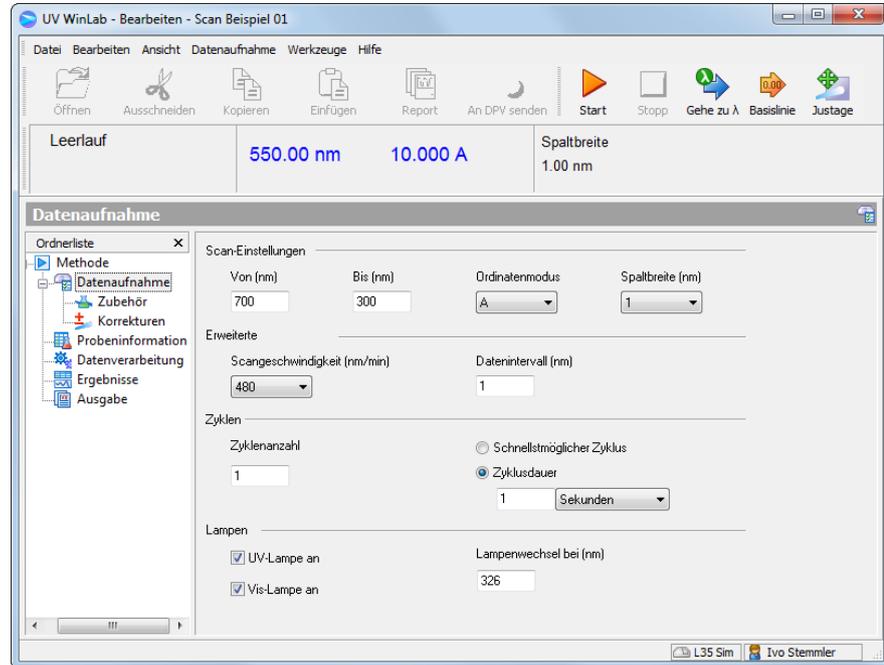
Soll eine Methode vor Veränderung oder Löschen gesichert werden, so kann man sie sperren. Zunächst wird die **Methode** unter ihrem endgültigen Namen **gespeichert**.

	<p>Über das Menü „Werkzeuge > Sperren“ kann nun die Methode gesperrt werden.</p>	
<p>Methode sperren / entsperren</p>	<p>An der gleichen Stelle kann auch wieder entsperrt werden. Es muss ein beliebiges Passwort angegeben werden (UVWinLab Standard).</p> <p>In der ES Version muss hier eine elektronische Signatur gegeben werden, die aus Namen und zugehörigem Passwort besteht.</p> <p>Während der Methodenentwicklung:</p>  <p>Nach dem Sperren:</p> 	
<p>Schutz gegen Veränderung</p>	<p>Die Methode kann nun bis zum „Entsperren“ nicht mehr gelöscht oder bearbeitet werden (Modus „Bearbeiten“ ist ausgegraut). Beim Start über „Start“ können nur noch die Anzahl der Proben verändert werden und das Ausfüllen der Probenliste vorgenommen werden. Alle weiteren Parameter sind grau und können nicht geändert werden.</p>	

Die Messparameter

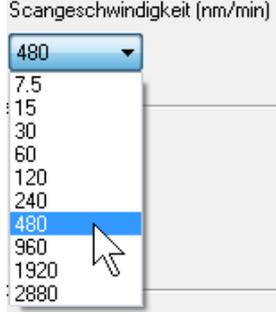
Seite
„Datenaufnahme“

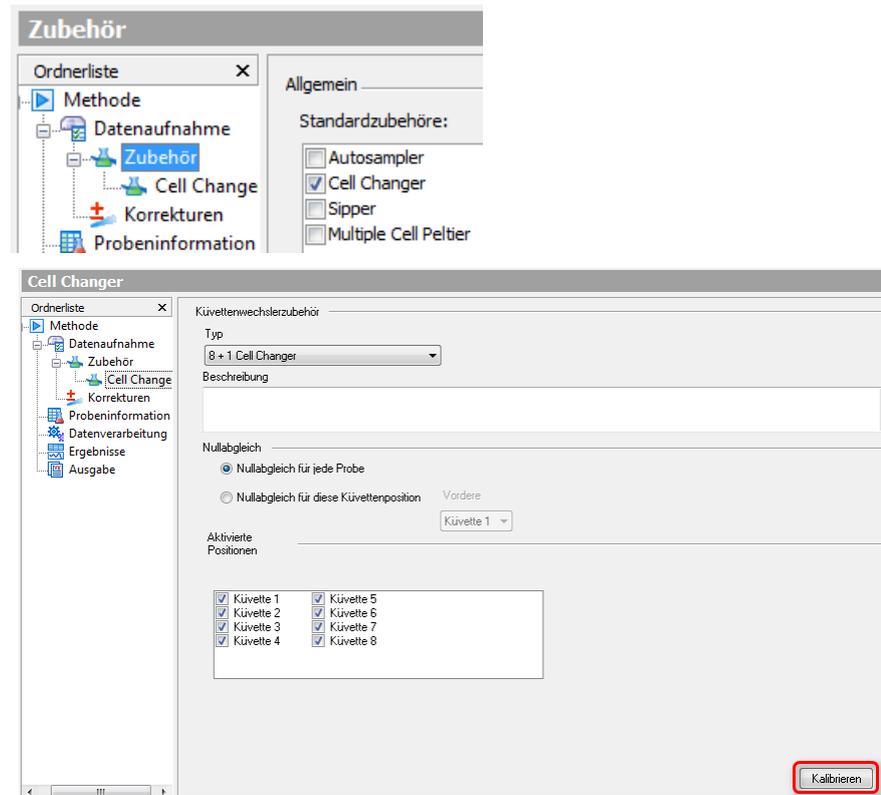
Nach dem sich unsere Scan-Methode (automatisch) geöffnet hat, ergibt sich etwa folgender Bildschirm:



Hinweis: Bei einem **High End Spektrometer** sieht diese Seite naturgemäß ganz anders aus. Siehe gesondertes Dokument.

Spaltbreite	Beim Lambda 25 ist die Spaltbreite fest auf 1 nm eingestellt, beim Lambda 35/45 kann gewählt werden: 0,5, 1, 2, 4 nm. Lambda 365: 0,5, 1, 2, 5, 20 nm. Mit kleinerem Spalt wird die spektrale Auflösung besser (schmale Peaks werden evtl. besser aufgelöst), allerdings verschlechtert sich das Signal/Rausch-Verhältnis (weniger Licht). Generell ändert sich die Peakhöhe nicht mehr (bzw. wurde richtig gemessen), wenn die Spaltbreite kleiner gleich 1/5 der Halbwertsbreite des zu messenden Peaks betragen hat.
Startwellenlänge	Die Startwellenlänge ist immer höher als die Endwellenlänge. Dies liegt am möglicherweise Proben-schädigenden Einfluss der kleinen UV-Wellenlängen.
Ordinatenmodus	<p>Der Ordinatenmodus</p> <ul style="list-style-type: none"> • A = Absorbance = Extinktion = Optische Dichte (O.D.) • %T = Transmission, 0...100% • %R = Reflexion, 0...100%).

	<p>Die Spektrometer von PerkinElmer sind Zweistrahlspektrometer. Die Messung findet immer relativ zum Referenzstrahl statt:</p> $\text{Signal} = \frac{\text{Intensität}_{\text{Probenstrahl}}}{\text{Intensität}_{\text{Referenzstrahl}}}$ <p>Im Ordinatensmodus E1 wird nur die Intensität des Probenstrahls, bei E2 die des Referenzstrahls geliefert. Diese Modi eignen sich vor allem für Service-Zwecke.</p>
Scan-Geschwindigkeit	<p>Eine typische Scangeschwindigkeit liegt bei 240 der 480 nm/min.</p> <p>Kleinere Scangeschwindigkeiten erzeugen ein qualitativ besseres Spektrum, größere eignen sich für Übersichtsspektren.</p> 
Datenintervall	<p>Das Datenintervall gibt an, alle wie viel nm ein Datenpunkt im Spektrum gespeichert werden soll. Meist wird hier 1 nm verwendet. Wird hier ein sehr kleines Datenintervall eingegeben, wird es u.U. von der Software automatisch vergrößert, falls gleichzeitig eine hohe Scangeschwindigkeit gewählt wurde.</p>
Zyklen	<p>Über Zyklenanzahl > 1 lassen sich automatisiert mehrere Spektren in bestimmten Zeitabständen aufnehmen.</p>
Lampen	<p>Die kostenintensivere UV-Lampe lässt sich schonen, indem sie in einer Methode deaktiviert wird. Beim Start der Methode wird sie dann ausgeschaltet und erst von der nächsten Methode bei Bedarf wieder aktiviert. Zwischen An- und Ausschalten sollten wenigstens 30 Minuten liegen, damit die Lampe wirklich geschont wird.</p> <p>Die UV-Lampe dient der automatischen Wellenlängenkalibration und muss daher beim Einschalten des Spektrometers funktionieren.</p> <p>Die Vis-Lampe bleibt am besten immer an, da sie wenig kostenintensiv ist und das Spektrometer gleichmäßig „temperiert“.</p>
Online-Hilfe	<p>Ein Druck auf die F1-Taste (Online-Hilfe) bringt auch hier viele hilfreiche Tipps.</p>
Die Zubehörseiten	<p>Sofern Zubehör beim Erstellen der Methode ausgewählt wurde, erscheint eine entsprechende Seite, wo die Funktion des Zubehörs festgelegt wird. Natürlich muss die Software für das Zubehör zuvor installiert worden sein (Accessory CD).</p>



Die Korrekturen-Seite

Die Korrekturen-Seite regelt, wann ein **Basislinie** aufgenommen werden muss, sowie alle weiteren Korrekturspektren.

Basislinie, wann und wozu?

Eine 100% T/0A Basislinie (= „Autozero“) setzt den aktuellen Zustand des Spektrometers im gesamten spektralen Bereich auf die **Extinktion Null** (daher der Name Autozero, gleichbedeutend mit **100% Transmission**). Dazu wird ein „Spektrum“ mit den aktuellen Einstellungen gefahren. Dabei werden alle Komponenten (Küvetten, Detektoren, Strahlteiler, Breite bzw. Form des Lichtstrahls, beide Strahlengänge usw.) und alle Parameter wie die Scangeschwindigkeit, Filterwechsel etc. berücksichtigt. Macht man gleich im Anschluss ein Spektrum, so zeigt sich je nach Ordinatenmodus eine Linie bei 0 A bzw. 100 % T.

Z.B. durch thermische Einflüsse kann es im Laufe der Zeit zu einer **Drift** der Nulllinie kommen. Daher empfiehlt sich je nach geforderter Empfindlichkeit eine neue Basislinie alle 1 bis 8 Stunden.

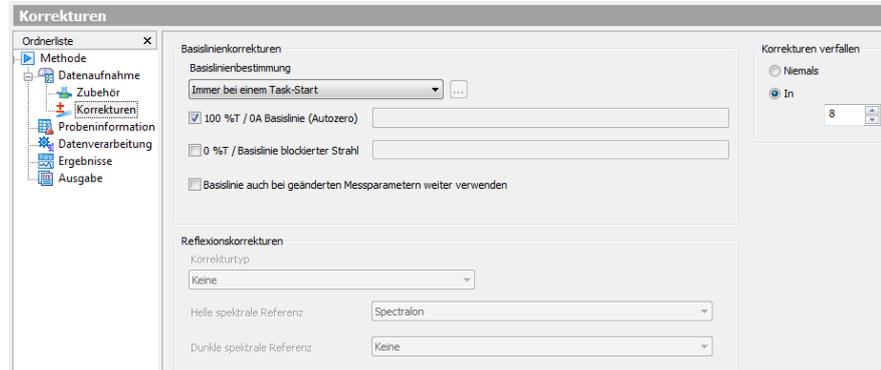
Unbedingt notwendig ist eine Basislinie nach dem Verändern entscheidender Parameter auf der Instrument-Seite, z.B. die Scangeschwindigkeit und die Spaltbreite.

Sollen stark blockierende Substanzen gemessen werden (nahe 0% T) oder der Lichtstrahl anderweitig begrenzt werden, dann empfiehlt es sich zusätzlich eine **0%T Basislinie** aufzunehmen. Dabei wird dann nach der ersten Basislinie noch eine weitere aufgenommen, bei welcher der Probenstrahl blockiert ist. Dies simuliert eine **vollständig blockierende Probe** und berücksichtigt

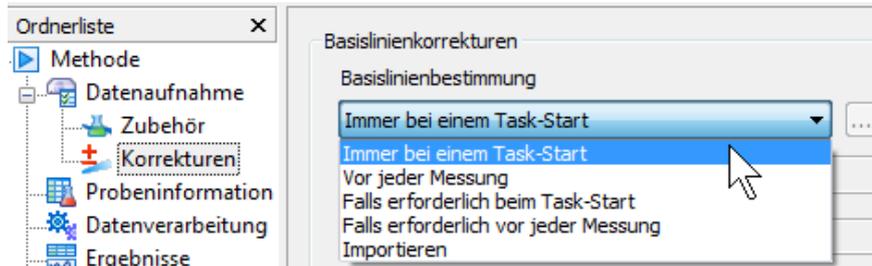
dabei auch den Dunkelstrom des Detektors.

Korrekturen-Seite

Im Ordinatensmodus A erscheint eine Seite analog folgender:



Basislinien-
bestimmung



Immer bei einem
Start

Empfohlen. Erzwingt eine Basislinie beim Start des Tasks, also beim ersten Drücken



auf . Alle weiteren Proben können ohne weitere Basislinie gemessen werden, jedoch maximal bis die angegebene Zeit verstrichen ist:



Vor jeder Messung

Erzwingt vor jeder Probe eine neue Basislinie. Interessant z.B. für Messungen mit wechselnden Scan-Parametern innerhalb einer Probenliste (z.B. URA-Zubehör).

Falls erforderlich
beim Task Start

Interessant **für versierte Benutzer**: Liegt noch eine gültige Basislinie vor, wird keine neue verlangt.

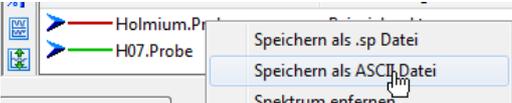
Falls erforderlich
vor jeder Messung

Schaut nach, ob für die jeweiligen Parameter je Probe noch eine gültige Basislinie vorliegt und verwendet dann diese.

	<p>Importieren Nur für Experten.</p> <p>Eine Basislinie kann immer zwischendurch über den Button  ausgelöst werden.</p>						
<p>0% T...</p>	<div data-bbox="518 481 1157 660"> <input checked="" type="checkbox"/> 100 %T / 0A Basislinie (Autozero) <input type="text"/> <input type="checkbox"/> 0 %T / Basislinie blockierter Strahl <input type="text"/> <input type="checkbox"/> Basislinie auch bei geänderten Messparametern weiter verwenden </div> <table border="1" data-bbox="518 672 1388 1164"> <tr> <td data-bbox="518 672 766 817">100% T / 0A Basislinie (Autozero)</td> <td data-bbox="766 672 1388 817">Messung des vollen Lichtsignal ohne Probe</td> </tr> <tr> <td data-bbox="518 817 766 996">0% T / Basislinie</td> <td data-bbox="766 817 1388 996">Hier wird mit einem zweiten Scan das Restsignal bei blockiertem Strahl gemessen. Dies spielt für hohe optische Dichten eine Rolle (s.o.).</td> </tr> <tr> <td data-bbox="518 996 766 1164">Basislinie auch bei geänderten Messparametern ...</td> <td data-bbox="766 996 1388 1164">Nur für Experten! Lässt z.B. zu, dass eine Probe mit einem Spalt von 1nm gemessen wird, obwohl bei Basislinie mit Spalt 4 nm gemessen wurde</td> </tr> </table>	100% T / 0A Basislinie (Autozero)	Messung des vollen Lichtsignal ohne Probe	0% T / Basislinie	Hier wird mit einem zweiten Scan das Restsignal bei blockiertem Strahl gemessen. Dies spielt für hohe optische Dichten eine Rolle (s.o.).	Basislinie auch bei geänderten Messparametern ...	Nur für Experten! Lässt z.B. zu, dass eine Probe mit einem Spalt von 1nm gemessen wird, obwohl bei Basislinie mit Spalt 4 nm gemessen wurde
100% T / 0A Basislinie (Autozero)	Messung des vollen Lichtsignal ohne Probe						
0% T / Basislinie	Hier wird mit einem zweiten Scan das Restsignal bei blockiertem Strahl gemessen. Dies spielt für hohe optische Dichten eine Rolle (s.o.).						
Basislinie auch bei geänderten Messparametern ...	Nur für Experten! Lässt z.B. zu, dass eine Probe mit einem Spalt von 1nm gemessen wird, obwohl bei Basislinie mit Spalt 4 nm gemessen wurde						
<p>Basislinie mit der Methode abspeichern</p>	<p>Beim Abspeichern der Methode findet sich unten ein Häkchen, welches das Abspeichern der Basislinien-Messwerte erlaubt. Per Default ist es gesetzt.</p> <div data-bbox="1021 1187 1348 1288"> <input checked="" type="checkbox"/> Korrekturen speichern <input type="button" value="Speichern"/> </div> <p>Diese Basislinie steht dann beim nächsten Laden der Methode wieder zur Verfügung und wird auch ungefragt verwendet, falls die Option „Falls erforderlich beim Task-Start“ verwendet wurde und sie noch nicht „verfallen“ ist.</p>						
<p>Reflexions-Korrektur: Helle spektrale Referenz</p>	<p>Falls in der Instruments-Seite der Ordinatenmodus %R  gewählt wurde, wird auch das Menü zur Reflexionskorrektur („Reflexion korrigiert mit Referenzdaten %RC“) zugänglich:</p> <div data-bbox="518 1747 1029 1915"> <p>Reflexionskorrekturen</p> <p>Korrekturtyp</p> <ul style="list-style-type: none"> Reflexion korrigiert mit Referenzdaten (%RC) Keine Reflexion korrigiert mit Referenzdaten (%RC) Reflexion korrigiert (Wurzel) für IV- und VW-Zubehö... (%RA) </div> <p style="text-align: right;">→</p>						



Verwenden Sie z.B. eine **Integrationskugel** („Ulbrichtkugel“) zur Messung der Reflexion, so wird für die Basislinie ein Spectralon-Standard verwendet. Eine unkorrigierte Messung ergibt dann 100%, wenn die Probe so gut wie der Standard reflektiert. Um die echte Reflexion zu erhalten, muss also noch mit den bekannten Werten des Standards korrigiert werden. Für Spectralon sind typische Werte standardmäßig mitinstalliert.

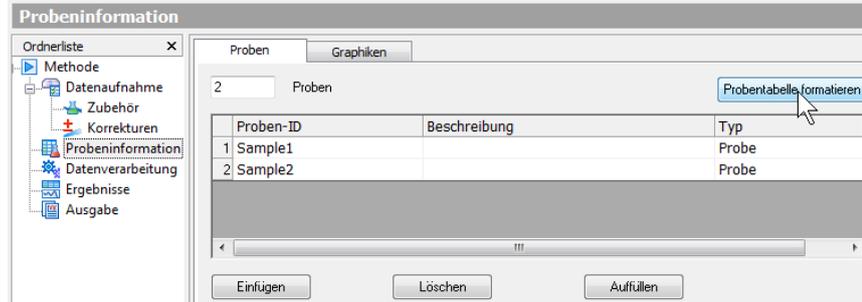
<p>Dunkle spektrale Referenz</p>	<p>Normalerweise auf „Keine“. Wichtig aber z.B. beim Vermessen von stark durchlässigen Proben mit der Integrationskugel. Hier muss noch mit dem Signal korrigiert werden, welches ohne Probe von der Lichtfalle wieder zurück in die Kugel reflektiert wird.</p>
<p>Reflexionskorrektur mit Werten vom Zertifikat</p>	<p>Sollen das mit dem Zertifikat mitgelieferte Spektrum für die Korrektur verwendet werden, so muss dieses über die Import-Funktion eingeladen werden.</p> <p>Häufig benötigte Korrekturspektren können in einem Pfad analog dem folgenden abgelegt werden: „C:\Program Files (x86)\PerkinElmer\UVWinLab\6.4\Data\Corrections Data“.</p> <p>Dort liegen Spektren für Spectralon und BaSO₄. „SPECTRLN_R1_cs.sp“ ist die absolute Reflexion des Spectralon, „SPECTRLN_R0_cs.sp“ ist das Spektrum, das ohne den Standard gemessen wird (Reflexionsport ist offen).</p> <p>Es empfiehlt sich, das Rauschen der Korrekturspektren minimal zu halten, da dieses Rauschen sonst jede Messung überlagert.</p>
<p>Erstellen eines eigenen Korrektur-Spektrums.</p>	<p>Falls die Daten nicht in einem lesbaren PerkinElmer Format vorliegen (z.B. nur als Papierform im Zertifikat), so muss ein entsprechendes Spektrum selbst erstellt werden.</p> <p>Man nimmt am einfachsten ein Dummy-Spektrum mit entsprechendem Datenabstand und Wellenlängenbereich (Ordinatenmodus %R) auf. Mit der rechten Maustaste auf die Grafik kann diese dann als ASCII abgespeichert werden.</p>  <p>Mit dem Windows-Editor („Notepad.exe“ im Windows-Ordner) können die Werte dann editiert werden. Word oder ähnliche Programme können wegen unsichtbarer Steuerzeichen</p>

problematisch sein. Bequemer geht das über eine **Excel-Vorlage** (anfordern bei ivo.stemmler@perkinelmer.com)

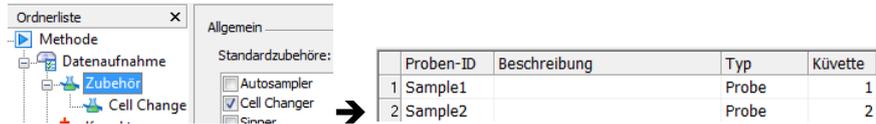
Probentabelle

Seite Proben-information

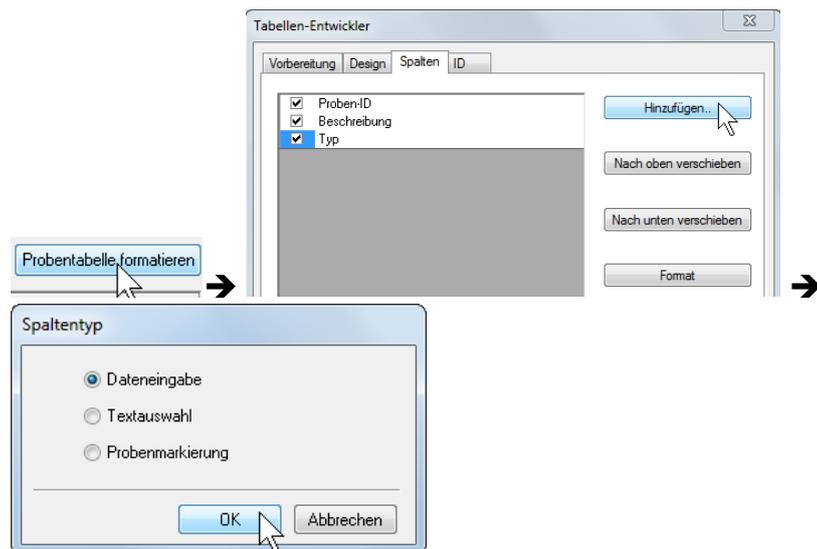
Hier werden alle **Informationen zur Probe** eingegeben. Zunächst sieht die Tabelle so aus:



Bei verwendeten Zubehören werden automatisch auch weitere Spalten hinzugefügt. Beispiel Küvettenwechsler:

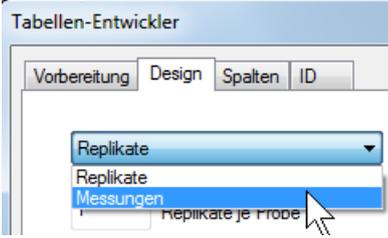
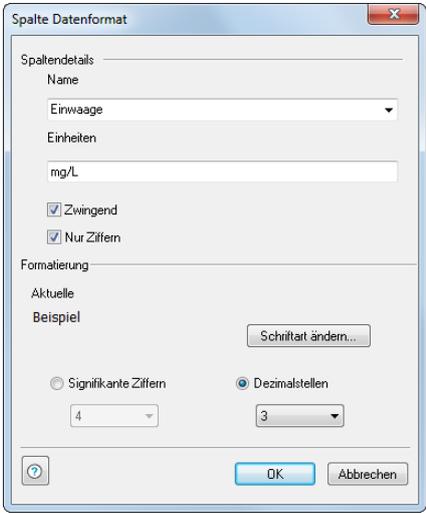


Spalten hinzufügen



Spaltentypen

Spaltentyp	Funktion
Dateieneingabe	Zur freien Eingabe von Text oder Zahlen . Zahlen stehen für Rechnungen in der Auswertung (Datenverarbeitung) zur Verfügung.

Textauswahl	Zur Eingabe von Text über ein definiertes Dropdown-Menü .
Probenmarkierung	<p>Zur Eingabe von Proben-„Kategorien“ über ein definiertes Dropdown-Menü. In der Datenverarbeitung kann z.B. dann automatisch Kategorie1 und 2 miteinander verrechnet werden.</p> <p>Hinweis: Als Probenmarkierung darf nicht die von UVWinLab verwendete Probentypbezeichnung „Sample“, „Blank“, „Control“, „Probe“, „Blindwert“ oder „Kontrollprobe“ verwendet werden.</p> <p>Hinweis: Sollen immer zwei zusammengehörige Proben miteinander verrechnet werden, so sollte man diese nicht über Sample tag, sondern über „Messungen“ (Auf der Seite „Design“) definieren:</p> 
<p>Beispiel für Data Entry: Einwaage</p>	<p>Der häufigste und wichtigste Typ ist also „Dateneingabe“:</p> <p>In diesem Beispiel wird eine Spalte zur Eingabe einer Einwaage als Zahl erzeugt.</p> <p>„Dezimalstellen“: Hier wird beim Eingeben einer Zahl auf 3 Nachkommastellen gerundet und anschließend beschnitten.</p> <p>„Signifikante Ziffern“ = Anzahl der signifikanten Stellen (999,9 = 4 signifikante und 1 Nachkommastelle).</p> <p>„Zwingend“ = zwingend. Die Messung wird verweigert, wenn in diese Spalte nichts eingetragen wurde.</p> 



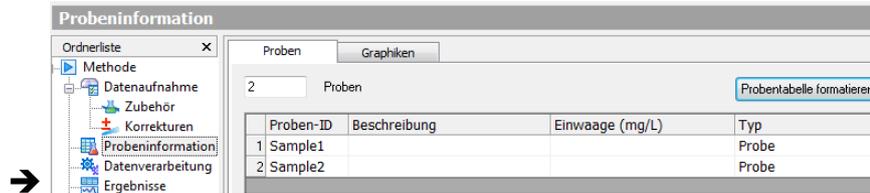
Hinweis: Es empfiehlt sich, die Einheit direkt in den Namen zu integrieren (hier: „Einwaage (mg/L)“), statt sie in das Feld Einheiten zu schreiben. Dies ermöglicht die Ausgabe der Einheit auch bei benutzerdefinierten Tabellen im Report.

Spalte verschieben

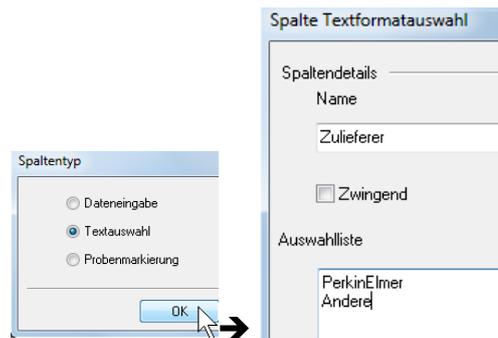
Ist die Spalte Einwaage nun noch markiert, kann sie mit einem Klick auf „Nach oben verschieben“ nach oben verschoben werden:



Die erzeugte Spalte taucht sogleich in der Probeninformation auf.



Beispiel für Text Probenmarkierung:
Zulieferer



Jede Zeile nachher einer Textauswahl in der Probeninformation:



Beispiel:
Holmium-Simulation

Solange keine besonderen Einstellungen für die Simulation getroffen wurden, steht nur die Probe Holmium für die Simulation zur Verfügung. Daher setzen wir die Probenzahl nun auf 1 und schreiben als „**Proben-ID**“ den Probennamen „**Holmium**“:

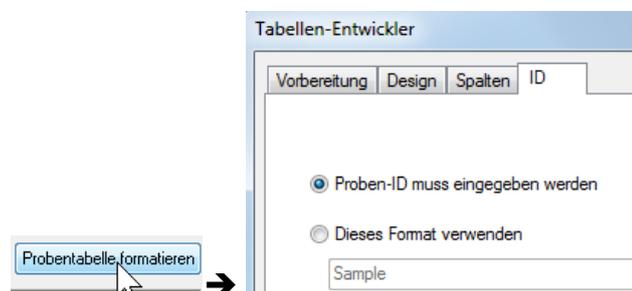
	Proben-ID	Beschreibung	Typ	Zulieferer	Einwaage (mg/L)	
✓	1	Holmium	Beispielspektrum	Probe	PerkinElmer	60.457

Hinweis: Für weitere **Simulations-Proben** siehe auch Dokument „Tipp Methodenentwicklung mit

Simulation“). Ansonsten tritt eine Fehlermeldung beim Starten der Methode auf. Jeder Probenname (Proben-ID) darf nur einmal verwendet werden.

Automatische Probennamen

Es gibt noch eine weitere Option für die Probentabelle, nämlich auf der Seite ID:



Wird hier das Format „**Dieses Format verwenden**“ > „**Sample**“ verwendet, dann werden alle **Probennamen automatisch** mit dem verwendeten Begriff (hier: „Sample“) und einer fortlaufenden angehängten Zahl benannt (**Sample1, Sample2, ...**). Außerdem wird die Zahl bei jedem Aufruf der Methode automatisch erhöht. Besteht die Probenliste z.B. nur aus einer Probe, dann heißt diese beim ersten Aufruf der Methode Sample1, beim zweiten Sample2 usw.

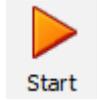
Der eingetippte individuelle Probennamen „**Holmium**“ wird nur dann abgespeichert, wenn hier die Option „**Proben-ID muss eingegeben werden**“ gewählt wurde. In diesem Modus werden die Felder der Probennamen (Proben-ID) nicht automatisch gefüllt.

Weitere Einstellungen der Probeninformation

Weitere Einstellungen für die Probentabelle sind in der Hilfe beschrieben.

Hinweis: Beim Erstellen der Spalten kann die **Schriftart** eingegeben werden, die sich auf die Darstellung hier und ebenso im Ausdruck des **Reports** auswirkt. Die Spaltenbreite kann mit der Maus temporär eingestellt werden, wird allerdings vom Communiqué bei Standardtabellen nicht berücksichtigt. Communiqué optimiert alle Spaltenbreiten innerhalb des aufgezogenen Rahmens automatisch. Falls Sie die Spalten und das Erscheinungsbild einer Tabelle im Detail selbst bestimmen möchten, so sei das **Tutorial „Communiqué Tabellen mit Seitenumbruch“** empfohlen.

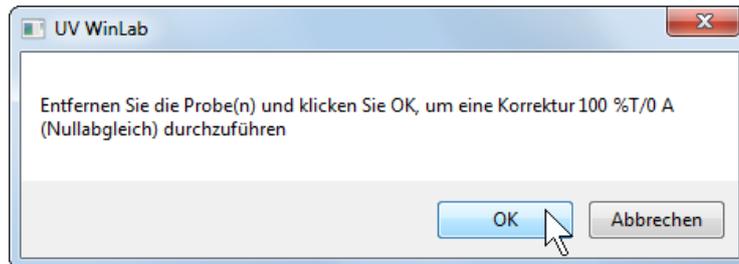
Starten der Messung



An dieser Stelle soll bereits einmal die Messung gestartet werden, um die Auswirkungen der anschließenden Datenauswertung direkt beim Programmieren beobachten zu können. Drücken Sie dazu auf den Start-Button.

Basislinie

Da mit dieser Methode noch keine Basislinie gemacht wurde, wird in jedem Fall zunächst eine Basislinie verlangt:

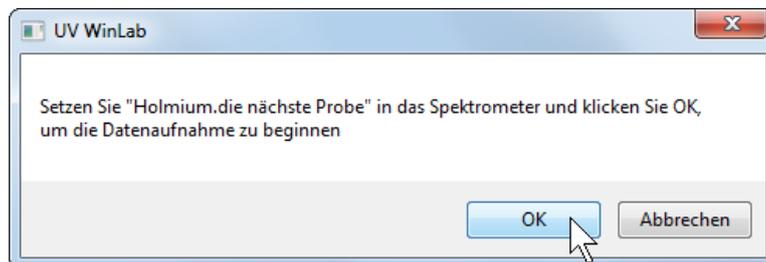


Hinweis: Eine Basislinie kann auch manuell ausgelöst werden über:

Wenn in der Seite „**Korrekturen**“ aber eine Basislinie vor jeder Messung verlangt wird, dann wird nach dem Drücken des Start-Buttons trotzdem noch einmal eine Basislinie verlangt.

Probe messen

Anschließend wird die Probe Holmium verlangt. UVWinLab springt dabei automatisch zur Grafik.



Sind alle Proben gemessen, erscheint folgende Meldung und im Gerätestatus wird angezeigt, dass das Spektrometer bereit für die nächste Messung ist („**Leerlauf**“)

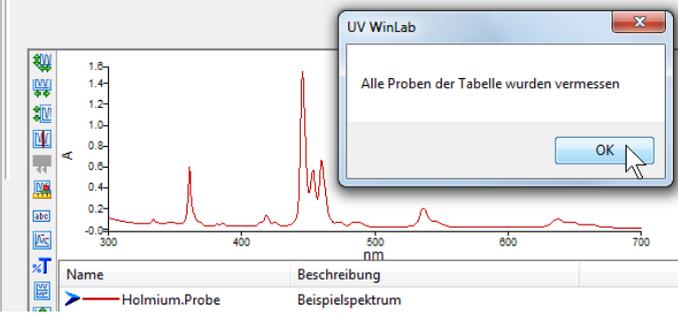
Leerlauf 308.00 nm 0.120 A Spaltbreite
1.00 nm

Probeninformation

Ordnerliste

- Methode
 - Datenaufnahme
 - Zubehör
 - Korrekturen
 - Probeninformation
 - Datenverarbeitung
 - Ergebnisse
 - Ausgabe

Proben Graphiken



UV WinLab

Alle Proben der Tabelle wurden vermessen

OK

Name	Beschreibung
Holmium.Probe	Beispielspektrum

Proben Graphiken

1 Proben

	Proben-ID	Beschreibung
✓	1	Holmium
		Beispielspektrum

Nach erfolgreichem beenden ein Haken

Datenverarbeitung

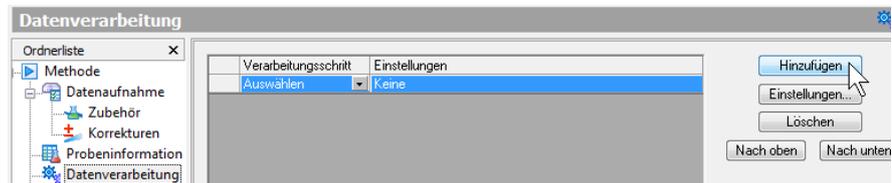
Allgemeines

UVWinLab bringt umfangreiche Funktionen mit, um die aufgenommenen Daten direkt auszuwerten. Die Auswertung wird zusammen mit der Methode abgespeichert und läuft künftig automatisch im Hintergrund ab. Die Auswertung kann übrigens auch nach Ablauf der Messung noch verändert werden und dann wieder als neue Methode abgespeichert werden. Ein Vorteil ist, dass auf jeden Fall stets die originalen Messwerte erhalten bleiben und Übertragungsfehler, sowie Validierungsprobleme entfallen bzw. minimiert werden.

In diesem Beispiel sollen exemplarisch nur wenige Funktionen programmiert werden, um ein Gefühl für die Möglichkeiten der Software zu bekommen.

Berechnungen hinzufügen

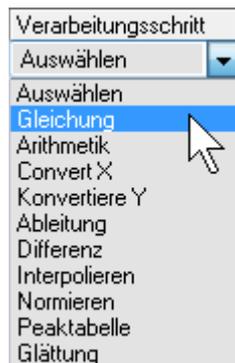
Über „**Hinzufügen**“ können nahezu beliebig viele Zeilen („Berechnungen“) eingefügt werden.



In jeder Zeile steht eine Berechnung. **Alle Aktionen werden Zeile für Zeile von oben nach unten abgearbeitet.** Die Reihenfolge kann mit den Buttons „**Nach oben**“ und „**Nach unten**“ verändert werden. „**Löschen**“ löscht die markierte Zeile.

Auswählen einer Berechnungsart

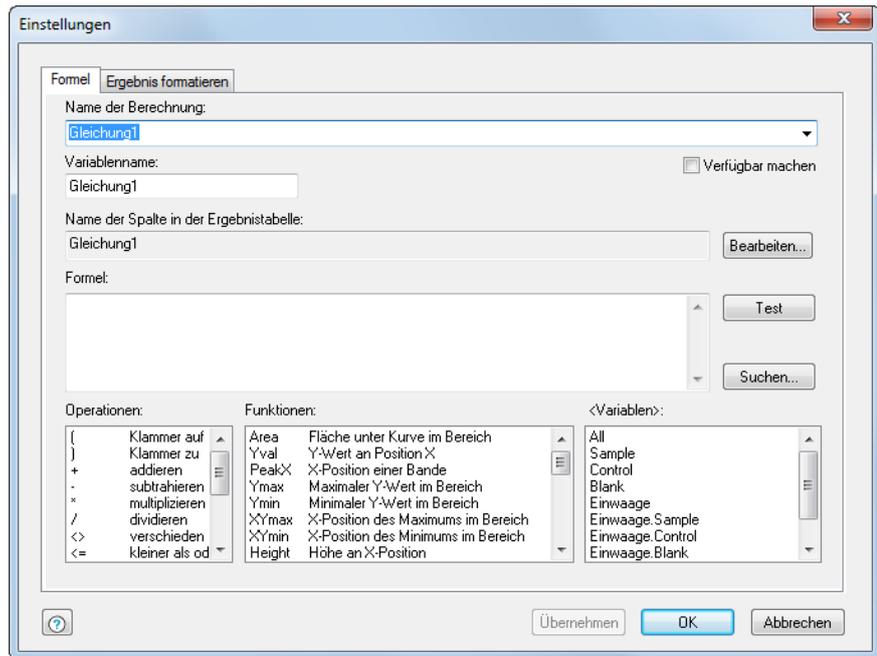
Beim Klicken auf Select ergeben sich für die eingefügte Zeile folgende Möglichkeiten:



Die meist genutzten Berechnungen sind z.B. „**Peaktabelle**“, „**Glättung**“, „**Ableitung**“ und vor allem die „**Gleichung**“ (Formel), die im nächsten Abschnitt ausführlicher behandelt werden. Wird „Gleichung“ ausgewählt, erscheint folgendes Fenster:

Hinweis: Nach dem Schließen des Fensters kann man es wieder über Doppelklick auf die Zeile öffnen oder über den Button „**Einstellungen**“.

Gleichungen (Formeln)



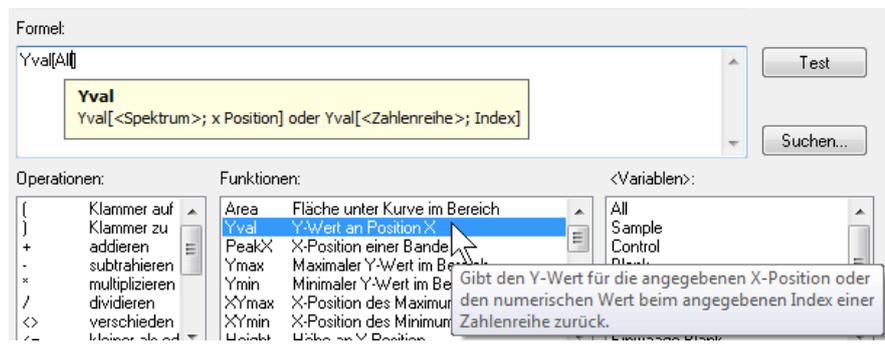
Weitere Funktionen erscheinen beim scrollen nach unten:

Height	Höhe an X-Position	SD	Standardabweichung
Interval	Datenpunktabstand	RMS	Quadratisches Fehlermittel
Npts	Anzahl Datenpunkte	Trend	Lineare Regression
Ende	Letzter X-Wert	Tcalc	Schichtdicke
Start	Erster X-Wert	Ri	Brechungsindex
MaxHt	Maximumhöhe im Bereich	RCoeff	Korrelationskoeffizient
Mean	Mittelwert	XVal	X-Position eines Y-werts
YShift	Ordinatenversatz		
Exp	Exponentialfunktion		
Log	Logarithmus zur Basis <n>		
Ln	Natürlicher Logarithmus		
Sqr	Quadratur		
Sqrt	Quadratwurzel		

Es gibt noch weitere Funktionen, die der Experte eintippen kann, die aber nicht mit der Maus ausgewählt werden können. Bitte ggf. anfordern über ivo.stemmler@perkinelmer.com, Stichwort „Inacalc“. Über diese Funktionen könnten z.B. bedingte Berechnungen innerhalb einer Zeile bewerkstelligt werden.

Beispiel: Extinktion bei einer Wellenlänge (Yval)

Das Auslesen eines Wertes aus dem Spektrum erfolgt über die Yval-Funktion. Dazu wird die Funktion einmal angeklickt:



Der Cursor steht nun direkt bereit zum Eingeben der Parameter der Funktion.

Der erste Parameter „**All**“ wird schon vorgegeben. Er bedeutet, dass jede „Probe“ aus der Probenliste verwendet wird. Dies entspricht dem Normalfall. Man könnte im Extremfall aus der Variablenliste auch gezielt nur die Probe „**Holmium.Sample**“ auswählen, dann würde diese Berechnung ausschließlich für diese Probe durchgerechnet und das Ergebnis unter Ergebnisse > „**Benutzerdefiniert**“ abgelegt. Als weitere sinnvolle Variablen stehen noch der in der Probenliste festgelegte Probentyp „**Probe**“, „**Blindwert**“ und „**Kontrollprobe**“, sowie der evtl. ebenfalls dort zugefügte „**Probenmarkierung**“ zur Verfügung. Wir lassen hier „**All**“ stehen.

Der zweite Parameter wird wie angezeigt abgetrennt. Bei deutschen Ländereinstellungen wird also mit einem **Semikolon** abgetrennt, das eingetippt werden muss. Als Parameter tippen wir z.B. **445** ein:

Formel:

`Yval[All;445]`. Diese Berechnung liefert uns also die Extinktion bei 445 nm für jedes gemessene Spektrum.

Hinweis: Alle Eingaben hier sind reiner ASCII-Text, welcher von UVWinLab interpretiert wird. Man kann sich die Funktionen also auch aus der Zwischenablage einfügen.

Benennen von Gleichungen

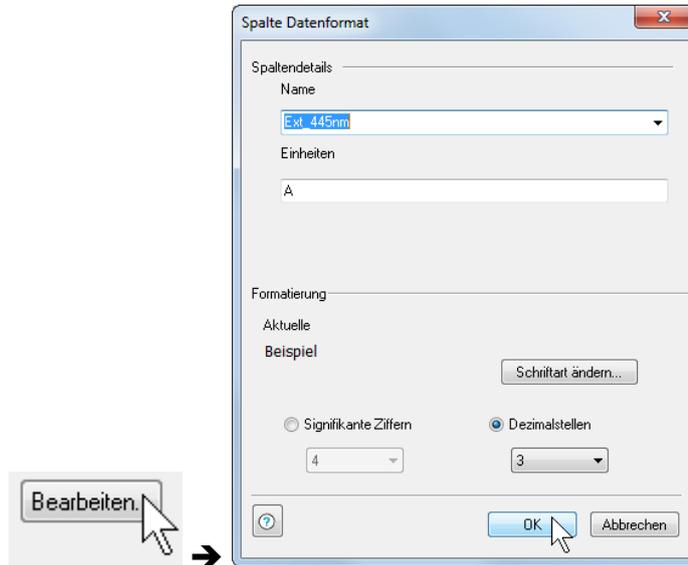
Für die eigene Übersicht sollte man am besten alle Berechnungen benennen. Jede Berechnung ist durch drei Namen charakterisiert, die zunächst durch UVWinLab automatisch benannt wurden.

Am einfachsten ist es, wenn man alle drei Namen gleich oder ähnlich benennt. Der Variablenname taucht dann automatisch in der Variablenliste auf. So kann einfach von einer zweiten Berechnung das Ergebnis der ersten Berechnung weiter verrechnet werden.

Name der Berechnung:	Name der Berechnung:
Gleichung1	Ext_445nm
Variablenname:	Variablenname:
Gleichung1	Ext_445nm
Name der Spalte in der Ergebnistabelle:	Name der Spalte in der Ergebnistabelle:
Gleichung1	Ext_445nm (A)

➔

Zur Bearbeitung der Benennung für die Ergebnistabelle wird auf Bearbeiten geklickt.



Die angegebene Einheit „A“ ist nur eine Information und erscheint in Klammern im Spaltennamen.

Zu beachten bei der Benennung einer Gleichung

Name der Berechnung:	Ext_445nm
Variablenname:	Ext_445nm
Name der Spalte in der Ergebnistabelle:	Ext_445nm (A)

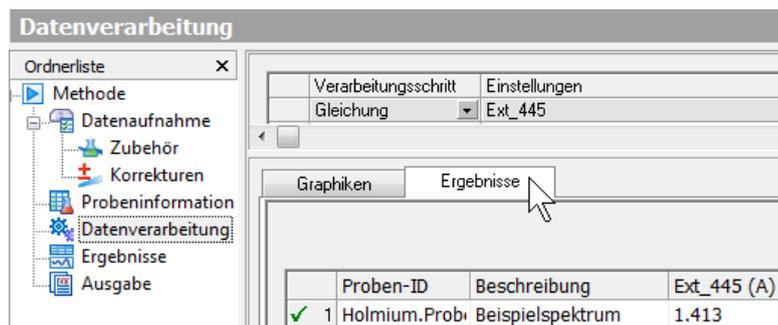
UVWinLab muss die Namen der Berechnung in weiteren Berechnungen interpretieren können. Um Fehlinterpretationen vorzubeugen, sollte man bei der Benennung von Gleichung und Variablenamen möglichst vorbeugend vorgehen:

- Keine Namen einbauen, die UVWinLab bereits verwendet: Namen von Spalten, Variablen, Funktionsnamen.
- Keine Trennzeichen (Semikolon, Komma, etc.)
- Sicherheitshalber sogar möglichst auf Leerzeichen verzichten. Lieber einen Unterstrich „_“ verwenden.

Es kann sein, dass UVWinLab Ihre Eingaben richtig interpretiert, obwohl Sie sich nicht an die obigen Vorsichtsmaßnahmen gehalten haben. Diese Strategie dient aber der vorbeugenden Sicherheit und gilt generell beim Programmieren.

Berechnung in der Ergebnistabelle zeigen

Nach dem Verlassen der Seite „**Bearbeiten**“ kann man auf die Seite „**Ergebnisse**“ klicken (ohne „**Datenverarbeitung**“ verlassen zu müssen):



Ergebnistabelle formatieren

In dieser so genannten „**Ergebnis-Tabelle**“ werden automatisch alle Gleichungen als neue Spalte hinzugefügt (sofern sie nicht in die Ergebnistabelle „**Benutzerdefiniert**“ geschrieben werden, s.o.). Über den Button „**Spalten anordnen...**“ kann die Spalte verschoben oder auch ausgeblendet werden oder es können sogar Spalten aus der Probeninformation hinzugefügt werden:

Hinweis: Die Ergebnis-Tabelle kann wie die Probeninformation auch mit einem Mausklick in die Report-Vorlage gebracht werden (s.u.). Beide Tabellen können auch automatisch als von Excel lesbares ASCII-Format exportiert werden (s.u.).

Verrechnung mit der Einwaage (A1%)

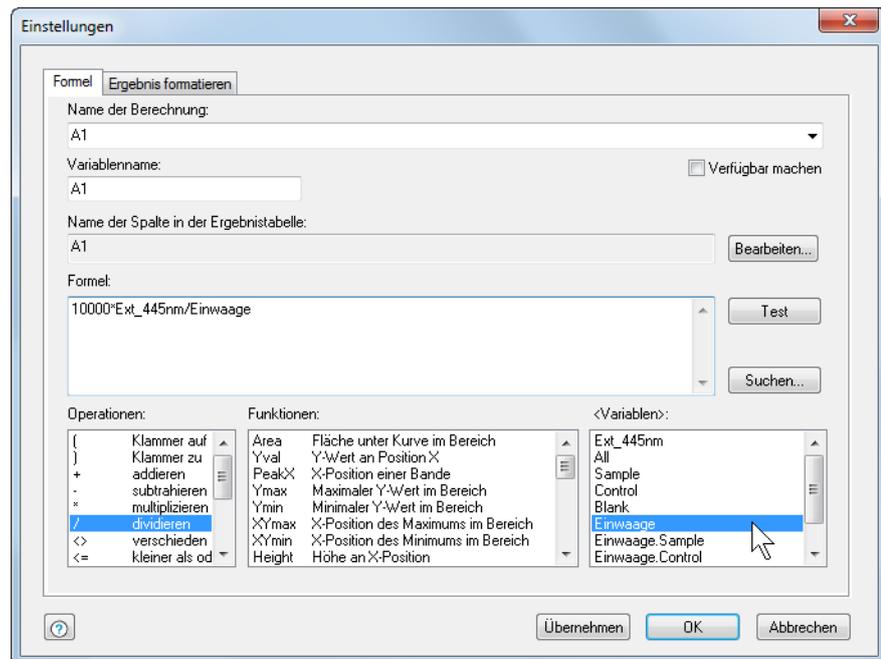
Formel

Häufig möchte man eine Probeninformation mit dem Messwert verknüpfen. Wir machen dies am Beispiel der Umrechnung Extinktion → A1%-Wert. Dies ist ein in der Pharmazie gebräuchlicher Wert, der beschreibt, wie hoch die Extinktion mit einer 1cm Küvette wäre, falls die Einwaage 10 g/L (10000 mg/L) betragen würde. Die Einwaage hatten wir in der Probeninformation bereits definiert mit 60.457 mg/L. Die Formel lautet daher:

$$A1\% \text{ _ Wert} = \frac{\text{Extinktion}}{\text{Einwaage [mg / L]}} \cdot 10000$$

Berechnung einfügen

Über Datenverarbeitung > Hinzufügen wird eine neue Gleichung eingefügt.



Durch Eintippen von „10000“, Klicken auf „*“, Klicken auf die Variable „Ext_445nm“, Klicken auf „/“, Klicken auf die Variable „Einwaage“ ist die Formel einfach zu erstellen.

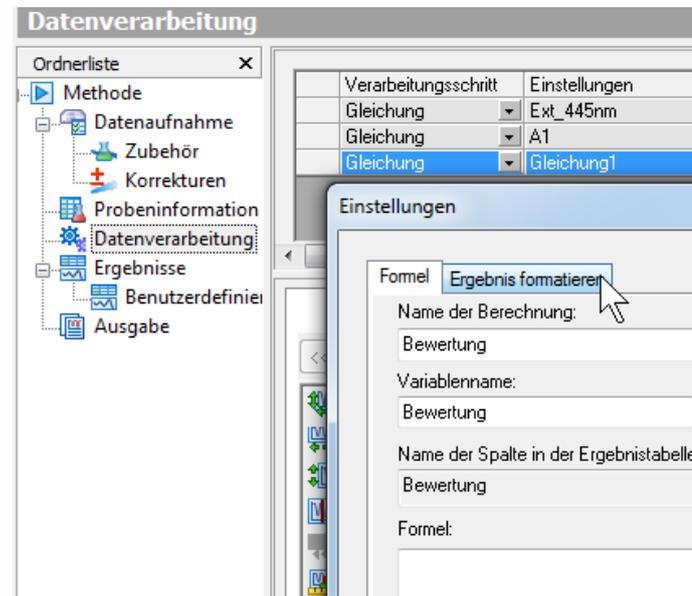
Bedingte

Erfüllt eine Berechnung eine bestimmte Vorgabe (PASS / FAIL),

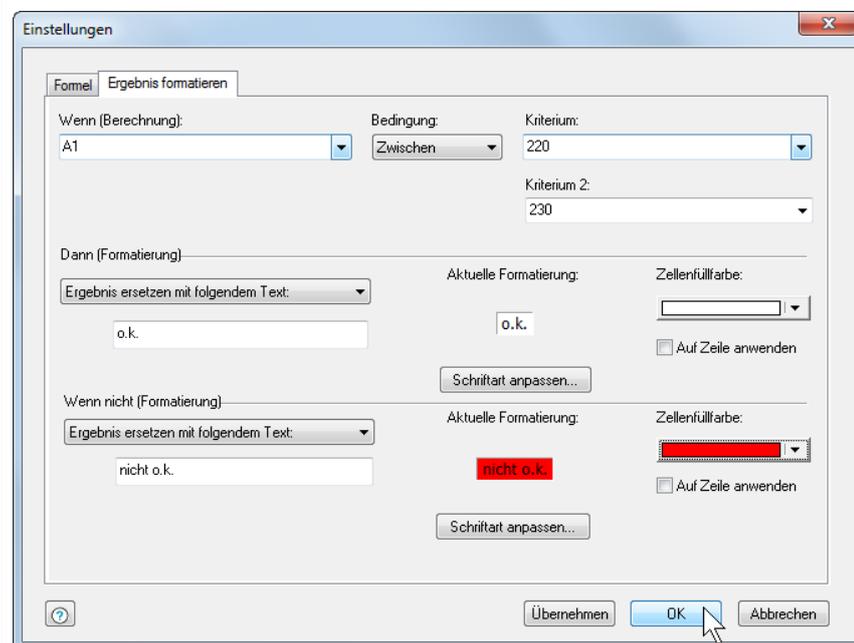
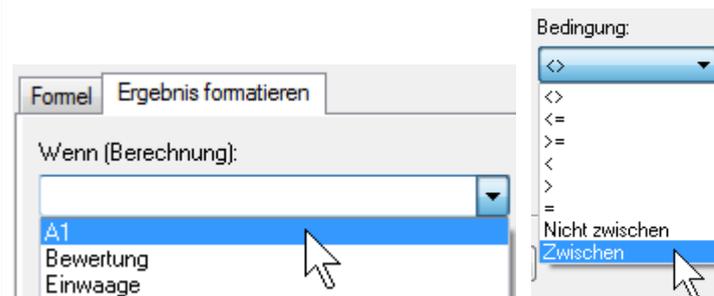
Formatierung (Pass/Fail)

so kann man dies wie im folgenden Beispiel darstellen.

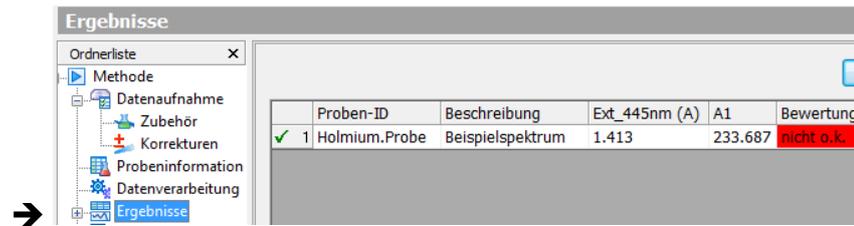
Dazu erzeugen wir eine weitere Gleichung im Anschluss an die Gleichung „A1“ eine weitere Gleichung und benennen diese als „Ergebnis“.



Eine Formel muss hier nicht eingegeben werden. Durch einen Klick auf das zweite Tab „**Ergebnis formatieren**“ können die Bedingungen (Grenzwerte) formuliert werden:



Das Ergebnis lässt sich sogleich begutachten:



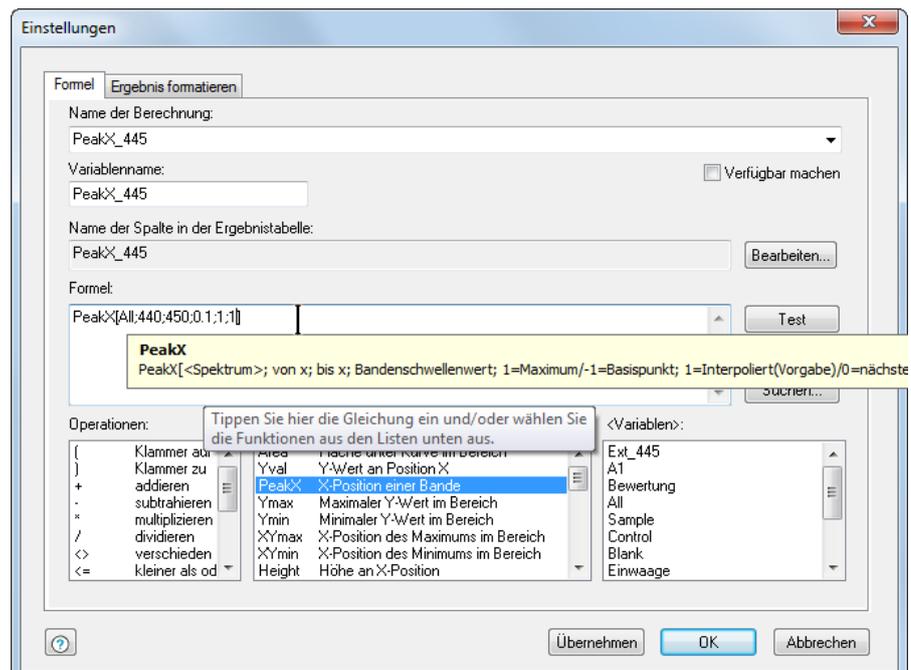
Hinweis: Die **Attribute** (Schriftgröße, Fett, Hintergrundfarbe) werden **nur in der „Ergebnis-Tabelle“** in UVWinLab selbst angezeigt, **nicht aber von Communiqué** in den Report übernommen. Im Communiqué wird aber ein entsprechend modifizierter Ergebnistext übernommen, z.B.:

Sample ID	Ext bei 361 nm (A)	Peak
Holmium.Sample	0,608 zu hoch	

Gleichung: Bestimmung einzelner Peaks

Für manche Bestimmungen ist es notwendig, die Extinktion im Peak-Maximum zu ermitteln. Dazu werden zwei weitere Gleichungen eingerichtet. Die erste bestimmt die **Wellenlänge des Peak-Maximums**:

Bestimmung der Wellenlänge des Peaks



PeakX[All;440;450;0.1;1;1]

Die Parameter verstehen sich wie folgt:

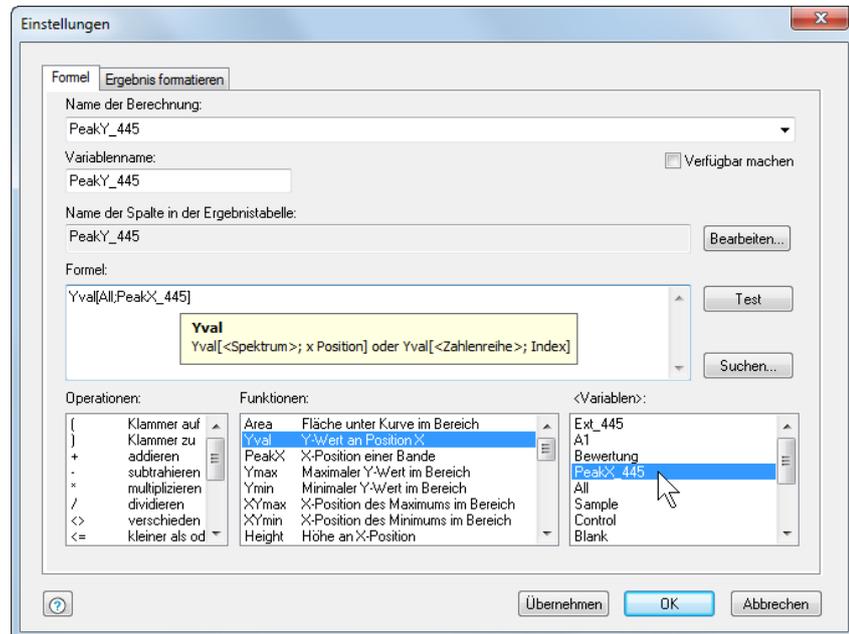
- **All:** Die Berechnung wird für jedes Spektrum durchgeführt.
- **von x** und **bis x** (hier: 440 bis 450 nm) geben den Bereich

an, in welchem der Peak gesucht werden soll.

- **Bandenschwellwert** (hier: 0.1 bzw. 0,1 je nach Windows-Regionaleinstellungen) ist der der Schwellwert, der einen echten Peak von Rauschen trennen soll. Steigen die Werte im Spektrum zunächst (von links nach rechts) an und fallen anschließend wieder, so ist im Maximum zunächst ein Peak gefunden. Dieser Peak wird allerdings erst dann als Peak gewertet, wenn das Spektrum anschließend wieder mindestens um den angegebenen Schwellenwert (0.1) fällt.
- Soll ein Peak („Maximum“, 1) oder ein Tal (-1, „Basispunkt“) gefunden werden
- Soll die genaue **Peakposition** „interpoliert“ werden oder nur der nächstgelegene echte Messpunkt gewählt werden? Bei einem Datenabstand (s. „[Die Messparameter](#)“, S. 9) von 1 nm könnten bei „**nächster Datenpunkt**“ nur ganzzahlige Werte herauskommen. Dieser Parameter kann auch weggelassen werden, wenn interpoliert werden soll.

Extinktion im Peakmaximum bestimmen

Die zweite Gleichung bestimmt den **Extinktionswert in diesem Peakmaximum:**



Yval[All;Peak445_nm]

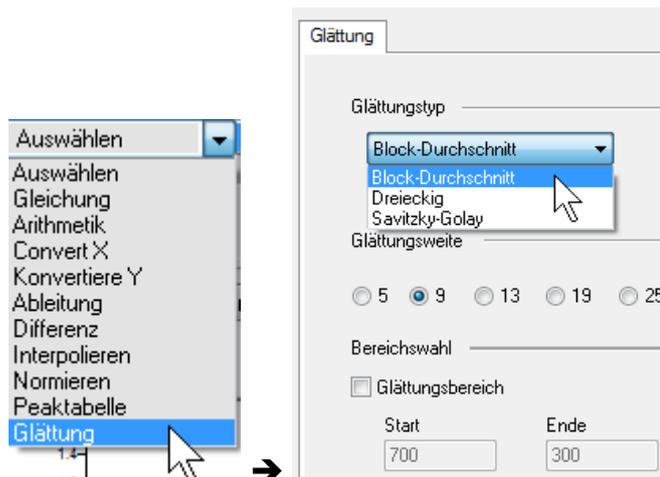
Die Variable „**Peak445_nm**“ (das Ergebnis der so benannten Berechnung) für den Yval-Befehl finden wir in der Variablen-Liste zum Anklicken.

Ergebnis

Proben-ID	Beschreibung	Einwaage (mg/L)	Ext_445 (A)	A1%	Bewertung	PeakX_445	PeakY_445
✓ 1	Holmium.Prob. Beispielspektrum	60.457	1.413	233.7	nicht o.k.	445.7	1.541

Glättung

Wir erzeugen einen weiteren Datenverarbeitung Schritt und klicken auf **Select > Smooth**. Dabei geht das Settings Fenster auf:

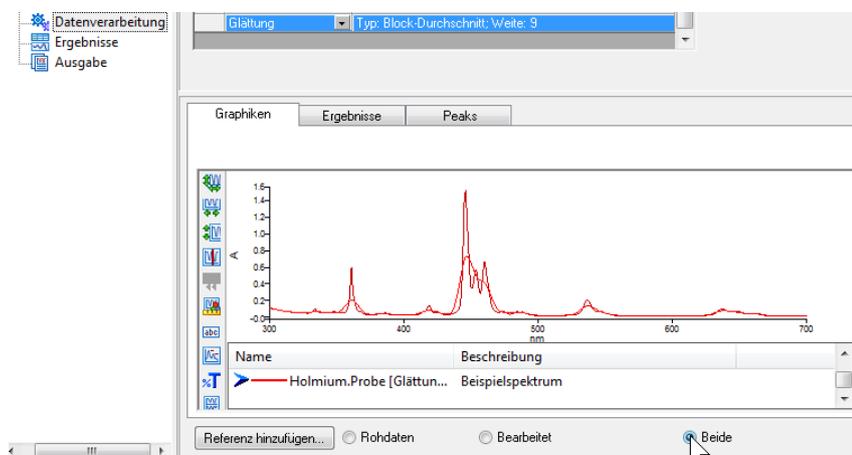


Parameter

Der „**Savitzky Golay**“ Algorithmus nähert die Peakhöhe von schmalen Peaks gut an, zeigt aber sogenannte Überschwinger bei starken Steigungswechseln. Für breite Peaks empfiehlt sich „**Block Durchschnitt**“, da dieser Algorithmus das Rauschen am effektivsten entfernt, dafür aber schmale Peaks stark abflacht. Der Modus „**Dreieckig**“ (mittengewichteter Block-Durchschnitt) liegt ein wenig dazwischen.

Sichtkontrolle

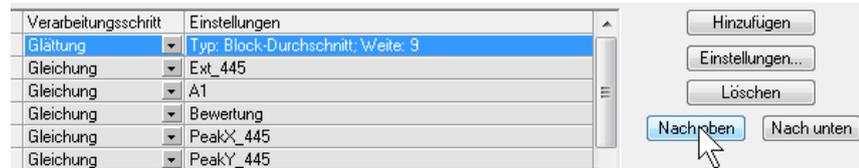
Beim **Optimieren der Glättungsparameter** („**Glättung**“) empfiehlt sich die Kontrolle per Auge durch Überlagern beider Spektren (Option „**Beide**“ in der Grafik in der Datenverarbeitung). Eine Glättung ist nur dann zulässig, solange sie die Charakteristik des Spektrums (z.B. die Peakhöhe) nicht verändert.



Diese Glättung wäre also mit Sicherheit nicht zulässig. Wir lassen die Parameter dennoch so, damit man den Unterschied besser sieht.

Reihenfolge ändern

Soll zuerst geglättet werden und die Auswertung (z.B. Peak-Bestimmung) mit den geglätteten Daten gemacht werden, dann muss der Datenverarbeitungs-Schritt „**Glättung**“ an die erste Stelle verschoben werden.



Dabei verändern sich auch gleich die Ergebnisse:

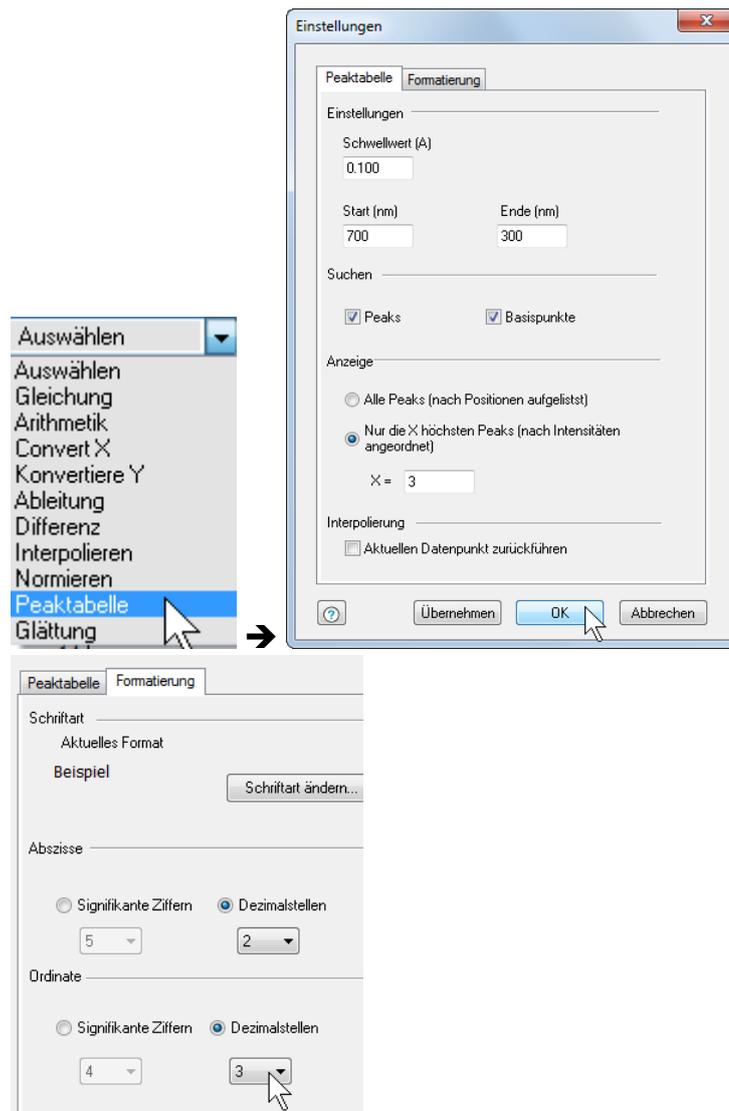
Einwaage (mg/L)	Ext_445nm (A)	A1	Bewertung	PeakX_445 (nm)	PeakY_445 (A)
60.457	1.413	233.7	nicht o.k.	445.73	1.541



Einwaage (mg/L)	Ext_445nm (A)	A1	Bewertung	PeakX_445 (nm)	PeakY_445 (A)
60.457	0.769	127.2	nicht o.k.	447.91	0.831

Peaktabelle

Erzeugen der Peaktabelle



Es werden hier also nur die stärksten 3 Peaks und Täler *des geglätteten Spektrums* (!) aufgelistet.

Peaktabelle immer am Schluss

Achtung: Die Peaktabelle muss die letzte Berechnung sein, sonst bleibt sie im Communiqué leer.

Ergebnis

Insgesamt erhalten wir sogleich folgendes Ergebnis, wenn wir vorher noch auf das Tab Peaks klicken (die Datenverarbeitung muss dazu nicht verlassen werden).

Graphiken		Ergebnisse		Peaks	
<< < 1 von 1 > >>					
Proben-ID	Holmium.Probe [Glättung]				
Beschreibung	Beispielspektrum				
Schwellenwert	0.100				
Bereichsanfang (nm)	700				
Bereichsende (nm)	300				
Suche	Peaks und Basispunkte				
Anzeige	Nach Intensitäten sortiert (3)				

	Position (nm)	Intensität (A)	
1	537.26	0.161	Peak
2	447.91	0.831	Peak
3	361.64	0.237	Peak
4	503.01	0.030	Basispunkt
5	402.50	0.036	Basispunkt

Was ist ein Task im Vergleich zur Methode?

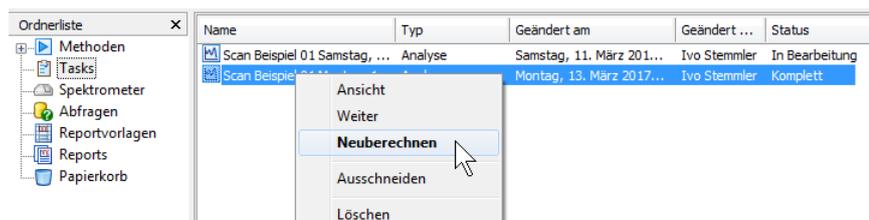
Methode

Die **Methode** ist die Vorlage zur Erstellung eines Tasks. Die Methode beinhaltet alle Messparameter, Berechnungen und die Zuordnung zu einem Report-Vorlage, sowie ggf. die aufgenommenen Korrekturspektren (z.B. Basislinie).

Task

Der **Task** enthält zusätzlich noch die gemessenen Ergebnisse. D.h. sobald eine Methode gestartet wurde, wird ist sie automatisch ein Task. Wenn der abgespeicherte **Task wieder geöffnet**, dann sieht er exakt so aus, wie er verlassen wurde. Alle Parameter sind vorhanden, das Erscheinungsbild stimmt mit der Methode überein. Die Auswertung und das Reporting kann dann nochmals verändert werden.

Task wieder öffnen

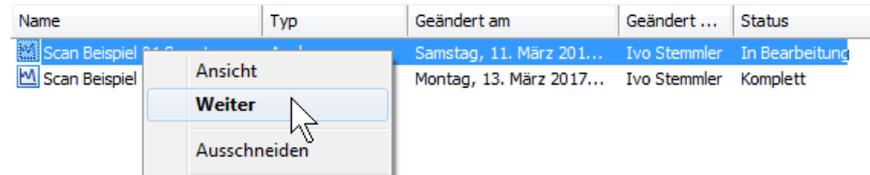


Mit einem Doppelklick wird nur der Modus „**Ansicht**“ geöffnet. Es kann keine Veränderung z.B. der Datenverarbeitung vorgenommen werden. Ein Spektrometer muss nicht angeschlossen sein.

Mit dem Modus „**Weiter**“ kann ein Task aufgerufen werden und weitere Messungen angefügt werden. Ggf. muss die

Probeninformation noch um weitere Proben erweitert werden, falls der Status des Tasks auf „Komplett“ stand, also alle Proben der Liste gemessen wurden. Es muss in jedem Fall eine neue Basislinie gemessen werden.

Im Modus „**Neuberechnen**“ kann man z.B. andere Berechnungen vornehmen und einen Report drucken. Dieser Modus steht nicht zur Verfügung, falls der Status „In Bearbeitung“ ist, also noch nicht alle Proben der Liste gemessen wurden.



Methode erzeugen aus Task

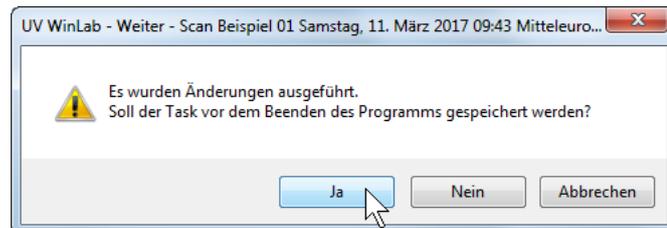
Auch das Erzeugen einer Methode aus einem (modifizierten) Task ist möglich mit „**Datei > Einstellungen speichern > Als neue Methode ...**“.

Automatisches Speichern des Tasks

Sobald die erste Probenmessung gestartet wurde, bekommt der Task einen vorläufigen automatischen Namen und wird unter diesem **vorläufig automatisch abgespeichert in der Datenbank**. Dieser Name setzt sich zusammen aus dem Methodennamen und dem Zeitpunkt, als die Methode geöffnet wurde.

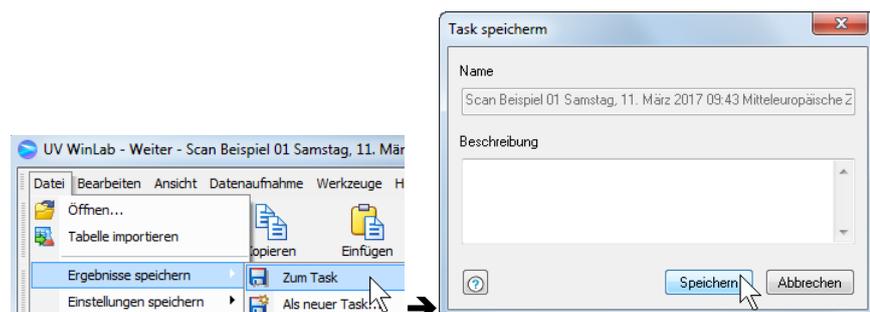
Der Zeitpunkt wird im langen Format dargestellt, welches sich generell über Windows-Einstellungen beeinflussen lässt.

Wird der Task geschlossen, so muss man bestätigen, dass der Task gespeichert werden soll. Ansonsten wird er wieder gelöscht:



Task manuell speichern

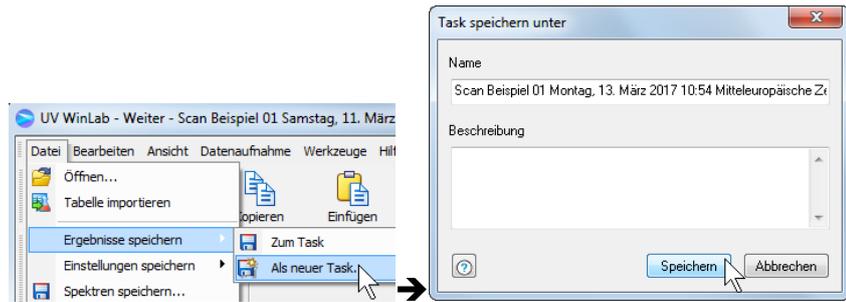
Nach folgendem Schema wird der Task unter seinem bereits vorhandenen Namen gespeichert:



Hinweis: Wird der Task erstmals abgespeichert, so wird der automatisch vergebene Namen vorgegeben

(Zeitpunkt des Öffnens der Methode, s.o.).

Task manuell speichern unter neuem Namen:

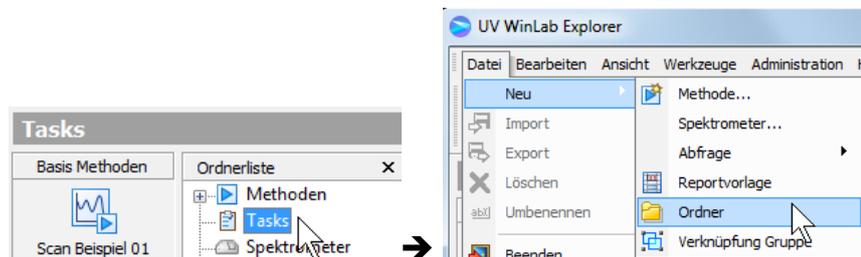


Hinweis: Wird der Task erstmals abgespeichert, so wird der automatisch vergebene Namen vorgegeben (Zeitpunkt des Abspeicherns der Methode).

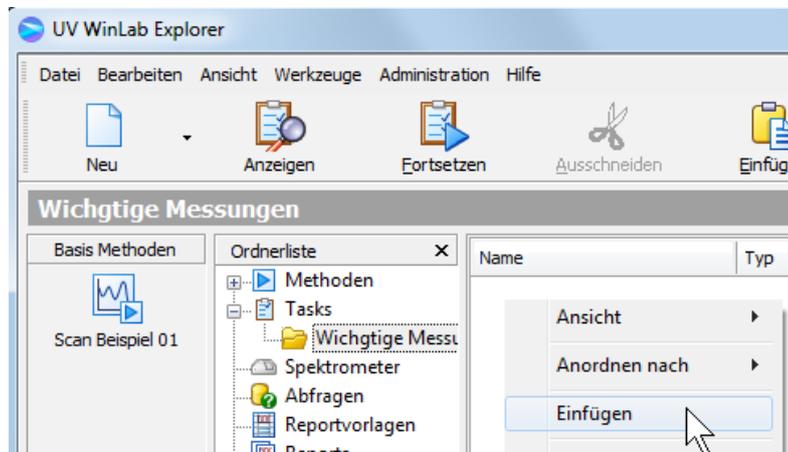
Sortieren von Tasks in neue Ordner

Wie bei den Methoden auch, so können die Tasks in Ordner sortiert werden:

Zunächst per „Rechtsklick auf den Task > **Ausschneiden**“ den Task in die Zwischenablage kopieren. Dann in einen anderen Ordner wechseln. Zum Erstellen eines **neuen Ordners** innerhalb des Tasks dort über „Datei > Neu > Ordner“ einen neuen Ordner erstellen:



Im neuen Ordner per „Rechtsklick > **Einfügen**“ den Task einfügen:



Formatieren und Exportieren eines Spektrums

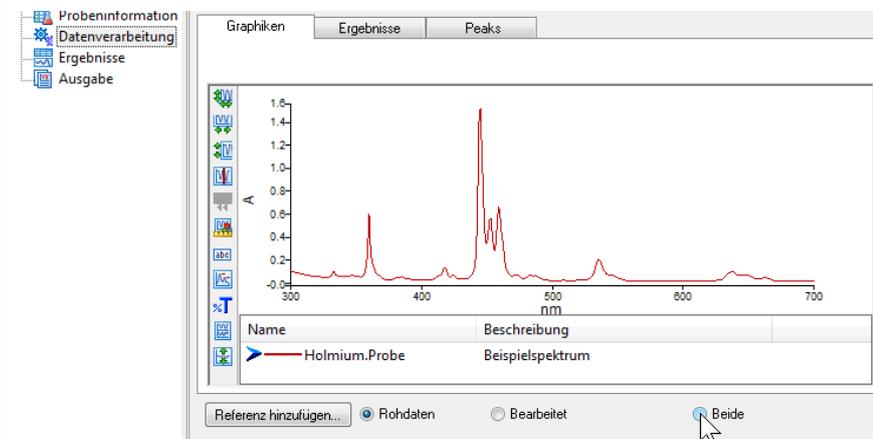
Hier sollen die Möglichkeiten gezeigt werden, wie der Graph formatiert werden kann. **Die hier vorgenommenen Einstellungen wirken sich allerdings nicht auf die Grafik im Report aus und sind nur zum Teil mit der Methode abspeicherbar.** Diese werden direkt in der Report-Vorlage festgelegt, wobei die Menüführung dort fast identisch ist.

Graph in:

- Proben-information
- **Daten-verarbeitung**
- Ergebnisse

Die Graphen in Probeninformation, Datenverarbeitung und Ergebnisse hängen prinzipiell zusammen. In der **Probeninformation** ist nur das Rohspektrum und in den **Ergebnissen** nur das verarbeitete Spektrum zu sehen. Das verarbeitete Spektrum ist noch nicht während der Messung zu sehen. In der **Datenverarbeitung** lässt sich das Rohspektrum und das verarbeitete Spektrum („bearbeitet“, z.B. geglättet) anschauen.

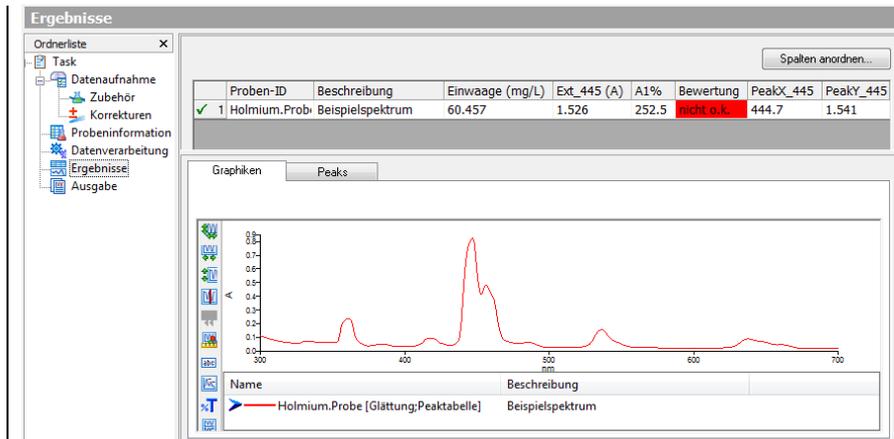
Daher ist es sinnvoll, sich die Spektren unter der Rubrik „Datenverarbeitung“ anzuschauen.



Ergebnisse-Seite

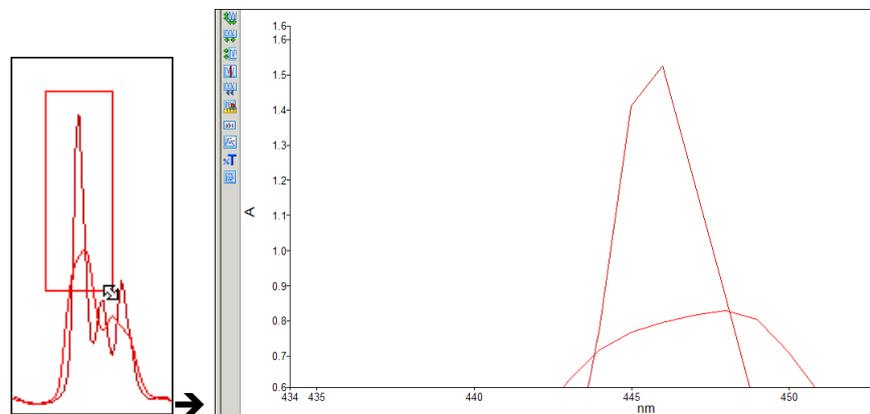
In dieser Seite werden wie im übrigen auch in der Datenverarbeitung noch einmal die Ergebnisse dargestellt. Allerdings bietet sich hier nicht die Option zwischen dem Rohspektrum und dem verarbeiteten zu wählen. Es wird **nur das „Bearbeitet“** (geglättete) angezeigt.

Der Hintergrund ist, dass diese Seite **für den einfachen Bediener zur schnellen Überprüfung der Ergebnisse** konzipiert wurde. Daher ist sie so einfach wie möglich gehalten:



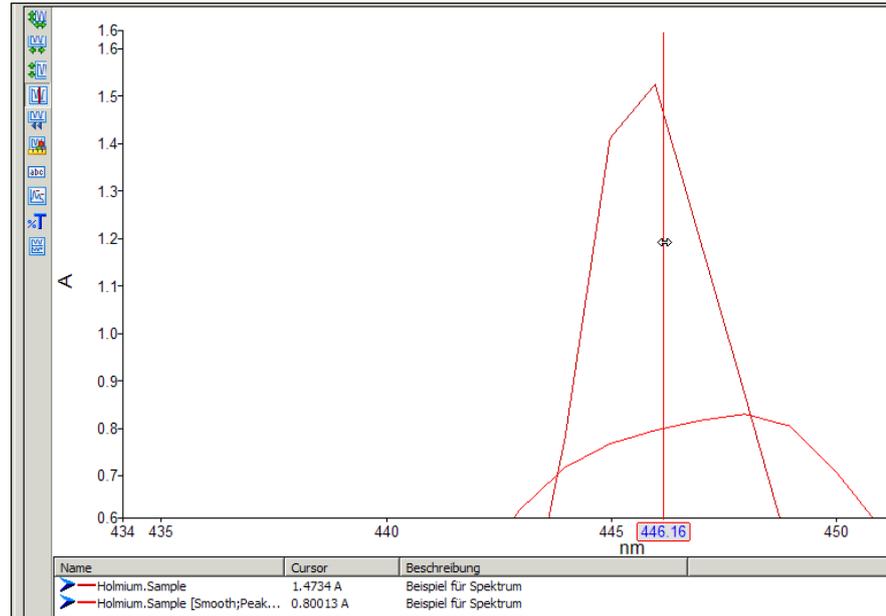
Zoomen

Zum **Hineinzoomen** in die Grafik wird mit der linken Maustaste ein beliebiger Rahmen in die Grafik gezeichnet. Anschließend zoomt man in diesen Bereich durch Doppelklick innerhalb des aufgezogenen Rahmens. In die **vorige Ansicht** zurück gelangt man mit dem Button .



Cursor

Nachfolgendes Bild zeigt zusätzlich den **vertikalen Cursor** durch Klick auf .


Kontextmenüs

Das **Kontextmenü** unterscheidet, wo im Grafik-Fenster man rechtsklickt:

Rechtsklick auf freie Fläche

- Vorherige Ansicht
- Ganze Achsenweite
- Vertikaler Cursor
- Horizontaler Cursor
- Überlagert / getrennt
- Ankerpunkt setzen
- Text hinzufügen...
- Bereich Marker hinzufuegen
- Bitmap einfügen...
- Drucken...
- Kopieren
- Eigenschaften...

Rechtsklick auf Spektrum

- Ankerpunkt setzen
- Nur dieses Spektrum asuwählen
- Punktkoordinaten einfügen
- Peaks benennen
- Speichern als .sp Datei
- Speichern als ASCII Datei
- Spektrum entfernen
- Informationen
- Darstellung anpassen...

Buttonleiste

Links neben der Grafik befindet sich die Buttonleiste:

	Kontextmenü	Erläuterung
	Ganze Achsenweite	Spreizt die Skalierung, um alle markierten Spektren vollständig darzustellen.
	Autoweite X	Spreizt die x-Achse.
	Autoweite Y	Spreizt die y-Achse, um alle markierten Spektren im gewählten x-Achsenbereich vollständig darzustellen.

	Vertikaler Cursor	Schaltet den vertikalen Cursor an und aus.
	Vorherige Ansicht	Zurück zur letzten Zoom-Stufe.
	Grafik formatieren	Öffnet einen Dialog mit vielen Optionen.
	Text hinzufügen	Öffnet einen Dialog zur Eingabe von Text.
	Peaks beschriften	Öffnet einen Dialog, um Peaks in den zuvor markierte Spektren zu labeln.
		Umrechnen von Extinktion nach Transmission (und umgekehrt).
	Anzeige splitten	Zieht alle Spektren vertikal auseinander, so dass auch übereinander liegende Spektren erkannt werden können.

Grafik formatieren

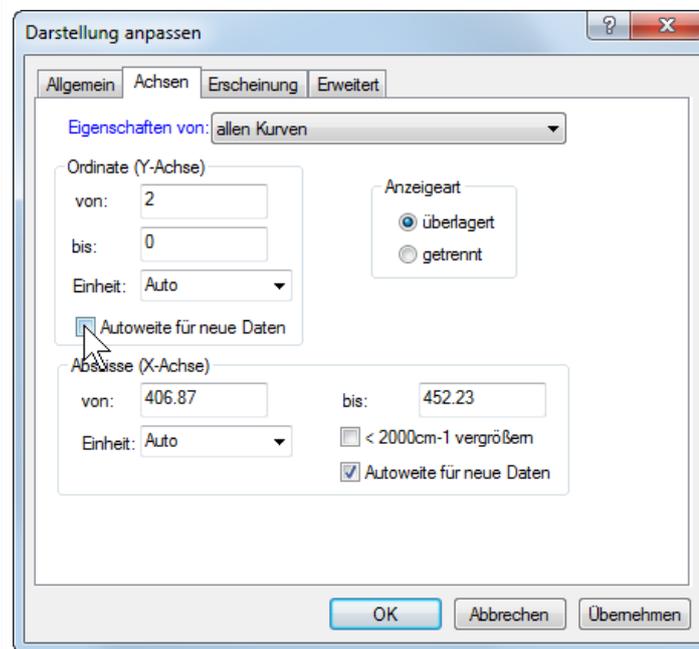


bzw.

- Vorherige Ansicht
- Ganze Achsenweite
- Vertikaler Cursor
- Horizontaler Cursor
- Überlagert / getrennt
- Ankerpunkt setzen
- Text hinzufügen...
- Bereich Marker hinzufügen
- Bitmap einfügen...
- Drucken...
- Kopieren
- Eigenschaften...**

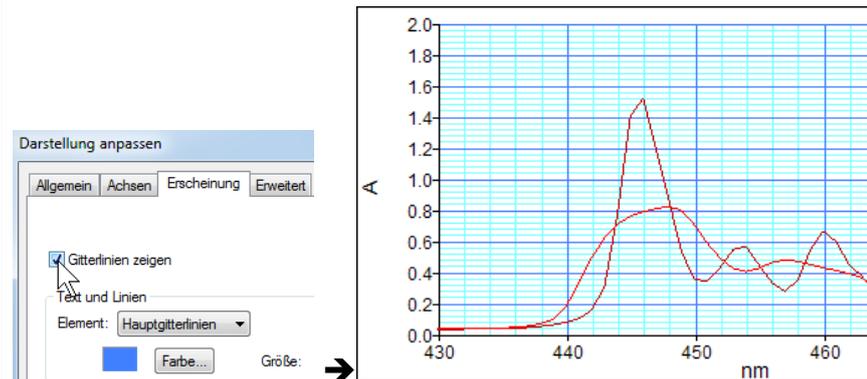
Um die Einstellungen für alle Spektren generell zu ändern, wird der Dialog Grafik formatieren aufgerufen. Dies geht entweder über die Buttonleiste oder Rechtsklick in einen freien Bereich der Grafik.

In dem nachfolgend gezeigten Menü kann man z.B. einstellen, dass sich die Grafik stets von 0 bis 2 (Extinktionen) in y-Richtung öffnen soll. Durch deaktivieren des Häkchens bei „Autoweite für neue Daten“ wird diese Darstellung nicht geändert, falls z.B. ein neues Spektrum aufgenommen wird. Diese Einstellungen können mit der Methode abgespeichert werden:



Gitternetzlinien

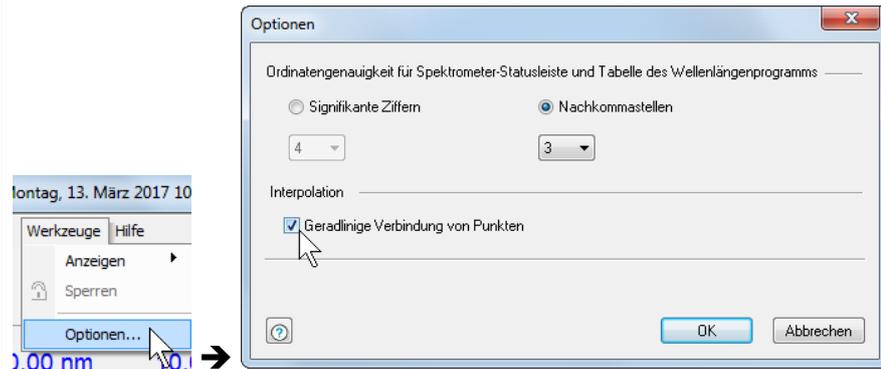
Im nächsten Tab kann man die Gitternetz-Linien aktivieren und einstellen. Diese Einstellung kann mit der Methode abgespeichert werden:


weitere Einstellungen

In dem Menü zur Formatierung der Grafik, gibt es noch vielen weitere Einstellungen, welche jedoch in der Regel nicht mit der Methode abgespeichert werden können.

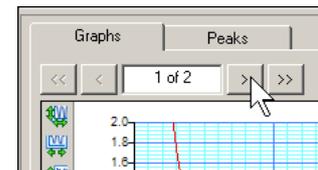
Linienglättung (Spline) vermeiden

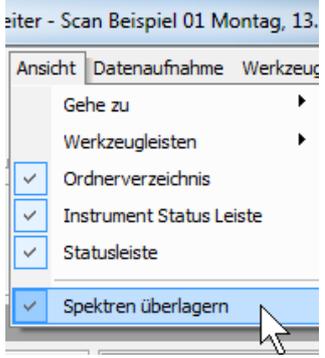
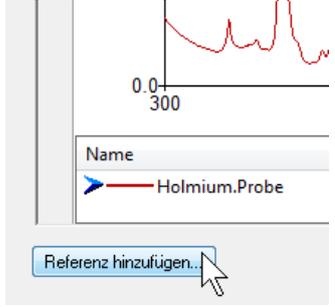
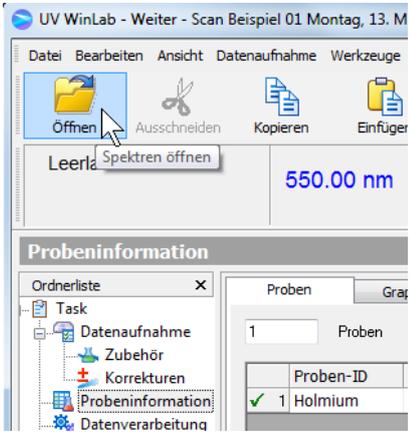
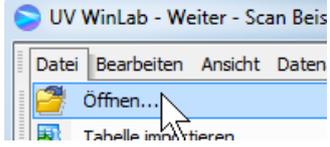
Per Default ist meist eingestellt, dass die einzelnen Messpunkte in der Grafik mit einer kubischen Interpolation (Spline) verbunden werden. Oftmals ist jedoch erwünscht, die **Messpunkte mit geraden Linien zu verbinden**. Dies lässt sich über den Haken bei „Werkzeuge > Optionen... > Geradlinige Verbindung von Punkten“ vorgeben.


Spektren überlagern

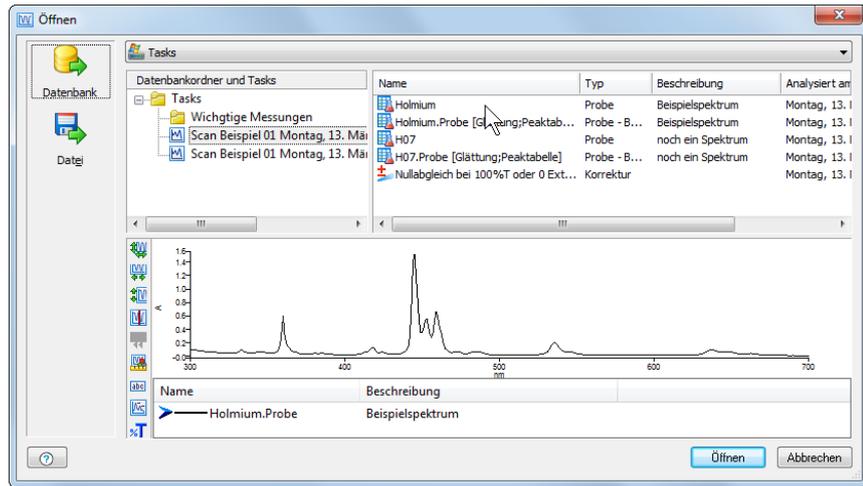
Verschiedene Möglichkeiten zur Überlagerung von Spektren sind vorgesehen:

Normalerweise gibt es **für jede Probe eine eigene Grafik**. Über die Buttons oberhalb der Grafik kann man jeweils durchblättern.



	<p>Alternativ gibt es aber auch die Möglichkeit, alle Spektren automatisch zu überlagern. Dies wird über das Hauptmenü „Ansicht > Spektren überlagern“ gemacht:</p>	
<p>Spektren hinzufügen zur Grafik</p>	<p>Man hat auch die Möglichkeit, einzelne Spektren zur Grafik hinzuzufügen. Diese Spektren werden dann in grauer Farbe dargestellt. Sie haben für die Datenverarbeitung keine Bedeutung sondern dienen lediglich der Visualisierung eines Vergleichsspektrums. Einfügen über den Button „Referenz hinzufügen...“ unterhalb der Grafik.</p>	
<p>Gemessene Spektren hinzufügen zur Probenliste</p>	<p>Durch das Hinzufügen von Spektren zur Probenliste stehen diese Spektren dann auch für die Datenauswertung (Datenverarbeitung) zur Verfügung. Das Einfügen erfolgt über „Datei > Öffnen...“.</p> <p>Hinweis: Zuvor muss man sich auf der Seite Probeninformation befinden!</p>	 <p>oder</p> 

Dialog Spektren hinzufügen

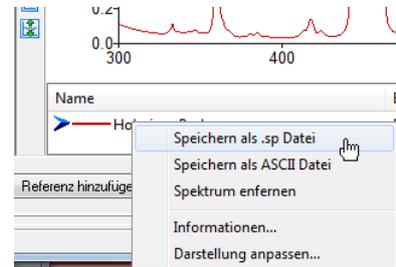


Beim Hinzufügen von Proben zur Grafik oder zur Probenliste (s.o.) kann man sich Spektren aussuchen aus:

- **Datenbank** = UVWinLab-Datenbank
- **Datei** = Windows-Ordner (exportierte Spektren)

Spektren manuell exportieren als Datei

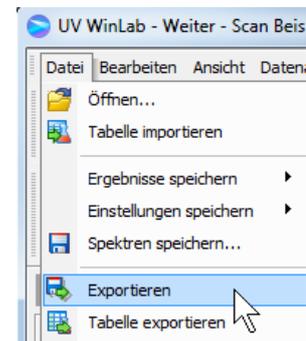
Durch **Rechtsklick auf ein einzelnes Spektrum** erhält man die Möglichkeit, die Spektren als binäre *.sp-Datei oder im Format *.asc direkt zu speichern.



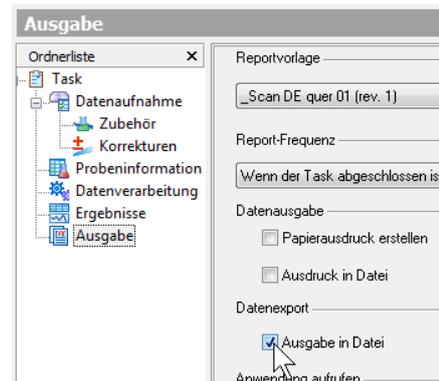
Soll dies für alle/**mehrerere Spektren** geschehen, so gibt es unter zwei Möglichkeiten:

- „Datei > **Spektren speichern ...**“
- „Datei > **Exportieren**“

Letztere speichert den gesamten Task samt Proben- und Ergebnistabellen als Dateien.

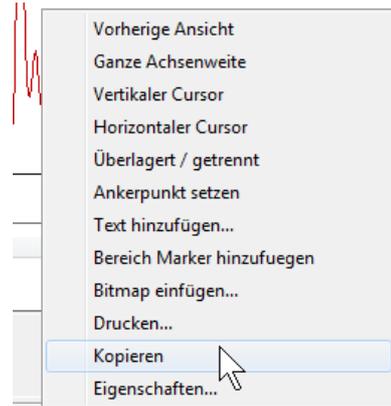


Weitere Details zum Dialog siehe unter der **automatisierten Variante** des Exports aller Spektren und Tabellen weiter unten.



**Grafik
exportieren in
Zwischenablage**

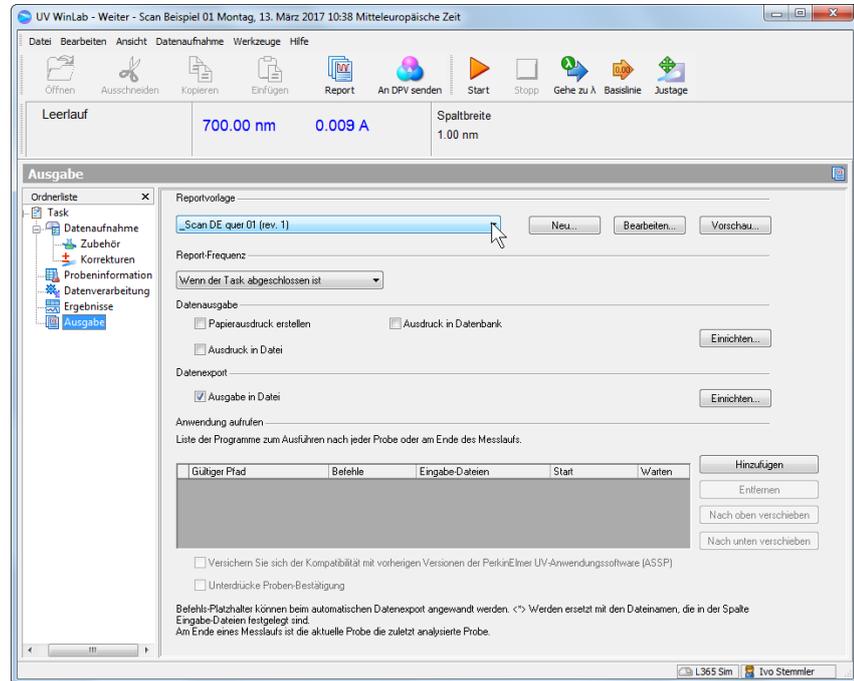
Um die Grafik so wie sie ist in einen Report einzufügen, kann sie per Rechtsklick in die freie Fläche der Grafik in die Zwischenablage kopiert werden und von dort z.B. in Word einkopiert werden.



Report-Optionen einstellen

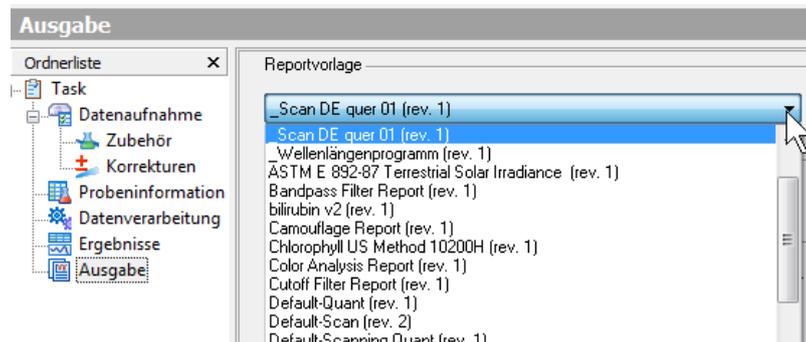
Seite Ausgabe

Auf der Seite „**Ausgabe**“ wird das Erscheinungsbild des Report-Ausdruckes festgelegt, bzw. was alles automatisch geschehen soll, wenn der Task beendet wird (s.u.).



Reportvorlage

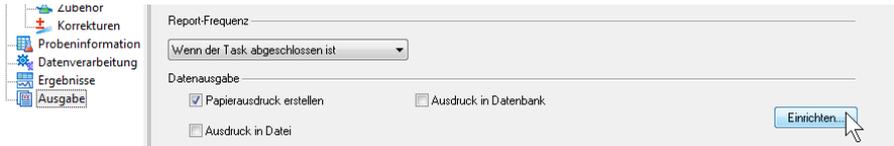
Man kann die Darstellung der Ergebnisse bestimmen, indem man der Methode eine zuvor erstellte **Reportvorlage** zuordnet:



Diese Einstellung wird dann mit der Methode abgespeichert.

Report auslösen automatisch

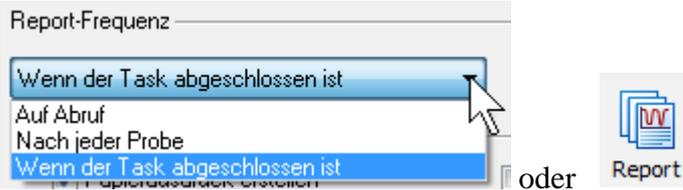
Die Methode kann so eingestellt werden, dass automatisch ein Report erstellt wird, **sobald der Task abgeschlossen, d.h. gespeichert wird (s.o.)**. Dabei werden dann alle auf der Seite Ausgabe vorgegebenen Optionen automatisch ausgeführt.



Wichtig dabei ist, dass „**Report-Frequenz**“ auf „**Wenn der Task abgeschlossen ist**“ steht und z.B. „**Papierausdruck erstellen**“ gewählt ist.

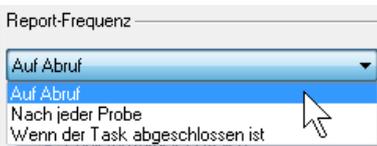
Wann wird der Report gedruckt?

Entweder automatisch beim Beenden/Abspeichern des Tasks (s.o.) oder Manuell (s.o.)

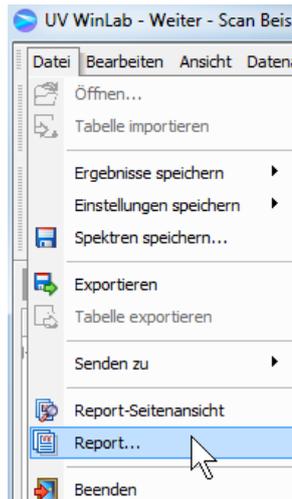


Report manuell auslösen

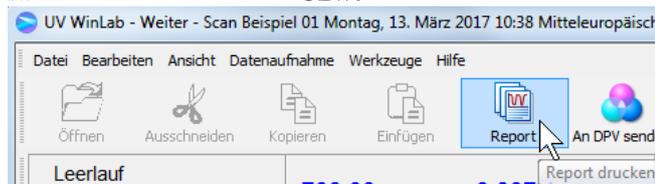
Steht z.B. die „**Report-Frequenz**“ auf „**Auf Abruf**“, dann wird man den Report von Hand auslösen wollen.

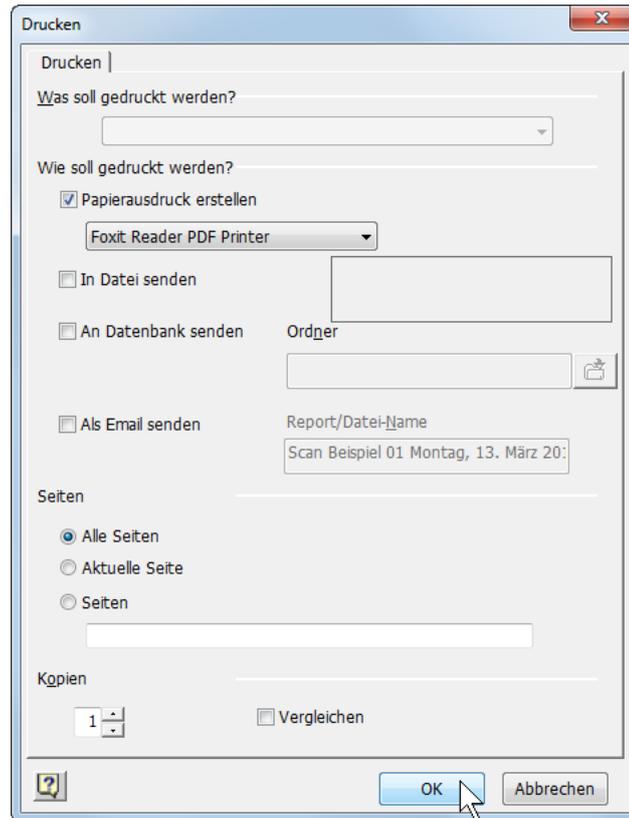


Zum Drucken wählt man dann entweder den Button Report oder das Menü „File > Report...“



bzw.





In diesem Beispiel ist als Drucker ein PDF Drucker ausgewählt, d.h. es wird eine PDF Datei erstellt. Bitte installieren Sie hierzu einen PDF Drucker Ihrer Wahl.

Alternativ kann man natürlich zunächst die Vorschau ansehen und von dort aus drucken:



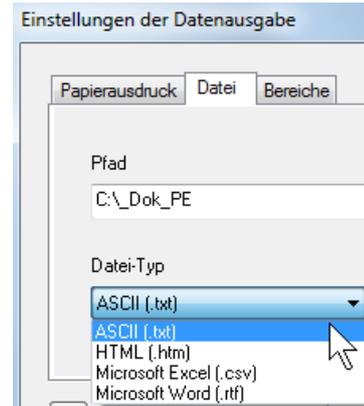
Weitere Optionen für den Report

Weitere Optionen sind über den Button „**Einrichten...**“ im Abschnitt „**Datenausgabe**“ zu erreichen:



Hier lässt sich z.B. der Drucker einstellen.

Verschiedene Formate stehen zur Verfügung, um den **Report als Datei** automatisch zu exportieren. Der Dateiname ergibt sich dabei aus dem Tasknamen.



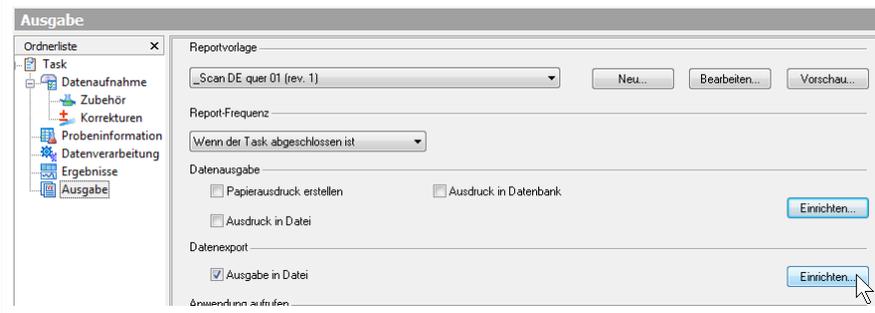
Hinweis: Die hier verwendeten Dateiformate werden nicht immer überzeugen. Das beste Ergebnis erhält man, indem man einen **PDF-Druckertreiber (s.o.)** installiert und über diesen den Report zu drucken. Vorteil ist auch die Kompatibilität zu künftigen Betriebssystemen.

Das Menü „**Bereiche**“ ist mehr etwas für Profis und soll hier nicht behandelt werden.

Spektren und Tabellen automatisch exportieren

Einrichten

Data Export (Ausgabe to file): Ein besonders interessanter Punkt für Freunde von Excel oder LIMS ist der **automatische Daten-Export**:



Was wird gespeichert?

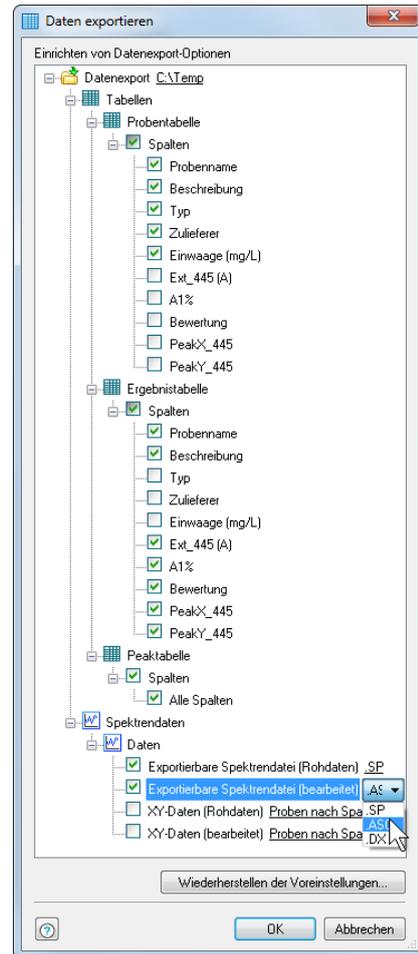
Per Default werden alle Tabellen als ***.csv**, so wie sie in der Methode konfiguriert wurden (Reihenfolge und Sichtbarkeit der Spalten).

Tabellen:

- Probentabelle
- Ergebnistabelle
- Peaktabelle
- (Benutzerspezifische Tabelle)

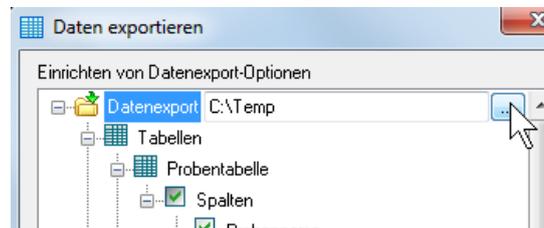
Dateiformate für Spektren:

- ***.sp** (binär)
- ***.asc** (länderspezifisches ASCII-Format)
- ***.dx** (JCAMP-Format)



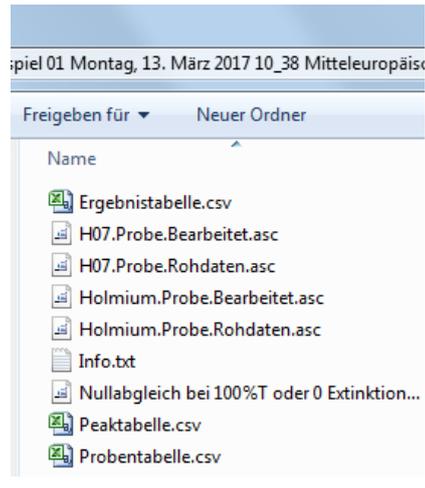
Wo wird gespeichert?

Der Pfad, wo gespeichert wird, kann nach Klick auf die Zeile mit dem Pfad eingestellt werden. Dort auf den Button mit den drei Punkten klicken:



Innerhalb dieses Ordners wird ein Ordner mit dem Task-Namen erstellt, worin sich alle Dateien befinden.

Ergebnis im Windows-Explorer



Report-Vorlagen erstellen

Hier sollen nur grundlegende Dinge gezeigt werden. Mehr gibt es in weiteren Tutorials und Tipps.

Communiqué aufrufen

Auf der Seite Ausgabe unseres Scan-Tasks befindet sich der Zugang zum Communiqué. Der Communiqué kümmert sich um Report-Vorlagen und Reports:



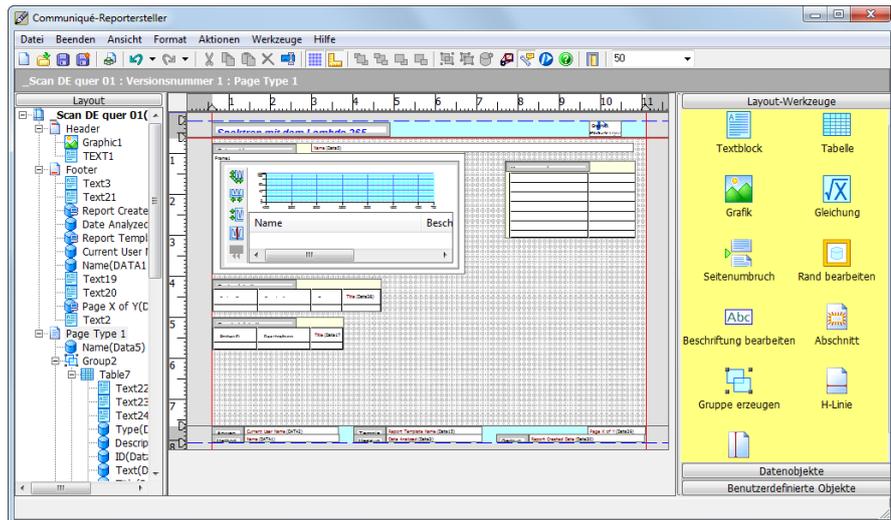
Die Vorlagen aus der Datenbank können wie erwähnt der Methode bzw. dem aktuellen Task zugeordnet werden.

Vorschau... Zeigt eine Vorschau auf das Druckergebnis.

Neu... Öffnet eine gänzlich unbeschriebene Report-Vorlage – Eine Option für Fortgeschrittene.

Bearbeiten... Öffnet die angegebene Vorlage zur Bearbeitung.

Der Editor



Links ist eine **Baumstruktur**, die alle Elemente der Vorlage logisch gegliedert enthält. Durch Klick auf ein Element im Baum wird das zugehörige Element im Layout-Bereich aktiviert und umgekehrt.

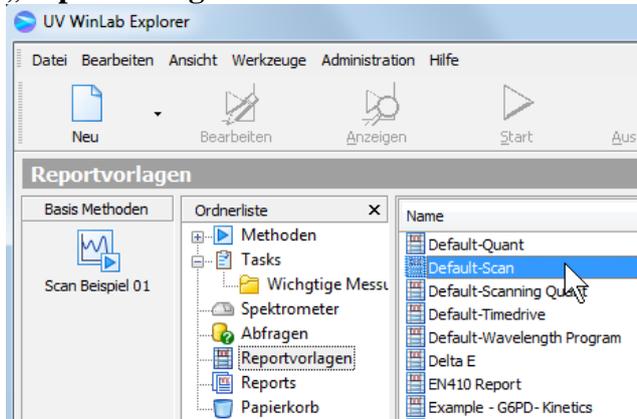
Undo-Funktion

Der Communiqué verfügt über eine Undo-Funktion.

Kopieren zwischen zwei Vorlagen

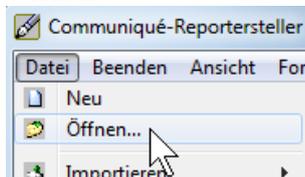
Es können auch **mehrere Vorlagen gleichzeitig geöffnet** werden, zwischen denen dann mit Kopieren/Einfügen (Copy/Paste) Elemente ausgetauscht werden können. Die zweite Vorlage kann man auf zwei Arten öffnen:

1. Über den UVWinLab-Explorer aus dem Bereich „**Reportvorlagen**“:



Hier geht ein separates Communiqué-Fenster auf.

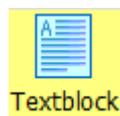
2. Direkt über den geöffneten Communiqué heraus über „Datei > Öffnen...“



Hier verzweigt sich der Baum innerhalb des Communiqué-Fensters.

Layout-Werkzeuge

Rechts ist eine Ansammlung an „**Layout-Werkzeuge**“ zu sehen, die Funktionen für einen einfachen Text und Layout enthält.



Zum Einfügen von einfachem **Text** oder **Überschriften**



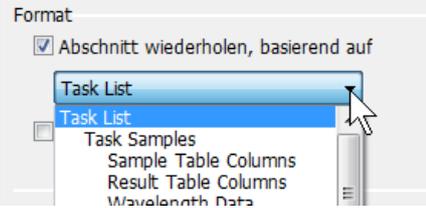
Erzeugt eine **leere Tabelle**, deren einzelne Zellen z.B. mit Text, Bildern oder Graphen gefüllt werden können



Zum Einfügen des **Firmenlogos**

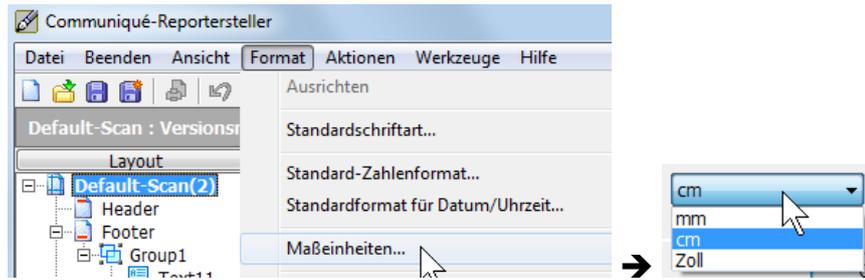


Eine Funktion, die für UVWinLab **ohne Bedeutung** ist und vielmehr für zukünftige Anwendungen gedacht ist, z.B. IR.

 <p>Seitenumbruch</p>	<p>Einfügen eines Seitenumbruches. Eine Seite sichtbare Seite im Layout kann mehrere Seiten generieren.</p> <p>Es können aber auch „echte“ neue Seiten angefügt werden (s.u.)</p>
 <p>Rand bearbeiten</p>	<p>Zum Bearbeiten des Rahmens um ein Objekt (Graph, Tabelle, Variable, Rahmen, ...). Jedes Objekt enthält einen Rahmen, der jedoch auch unsichtbar sein kann.</p> <p>Alternative: über rechte Maustaste auf das Objekt.</p>
 <p>Beschriftung bearbeiten</p>	<p>Bearbeitet die „Beschriftung“ eines Objekts (Beschriftung/Titel eines Objekts). Zu jedem Objekt (Graph, Tabelle, Variable, Rahmen, ...) kann eine Beschriftung dargestellt werden. Man kann dazu natürlich auch ein separates Text-Objekt verwenden.</p> <p>Alternative: über rechte Maustaste auf das Objekt.</p>
 <p>Abschnitt</p>	<p>Fasst mehrere Objekte mit einem unsichtbaren Rahmen zusammen. Diese sog. „Abschnitt“ kann z.B. automatisch für jede Probe wiederholt werden. Das entsprechende Menü erscheint automatisch nach dem Aufspannen des Rahmens (Menü „Eigenschaften“), wo dann</p> <div data-bbox="735 1272 1161 1480" data-label="Image">  </div> <p>„Abschnitt wiederholen basierend auf“ ausgewählt wird.</p> <p>So kann z.B. für jede Probe ein Spektrum mit zugehörigen Angaben automatisch wiederholt werden.</p>
 <p>Gruppe erzeugen</p>	<p>Kombiniert eine Reihe von Elementen zu einer Gruppe, die dann z.B. in den „Benutzerdefinierte Objekte“ abgelegt werden kann und so für die nächste Vorlage mit einem Mausklick zur Verfügung steht.</p>
  <p>H-Linie V-Linie</p>	<p>Erzeugen Linien für Layout-Zwecke.</p>

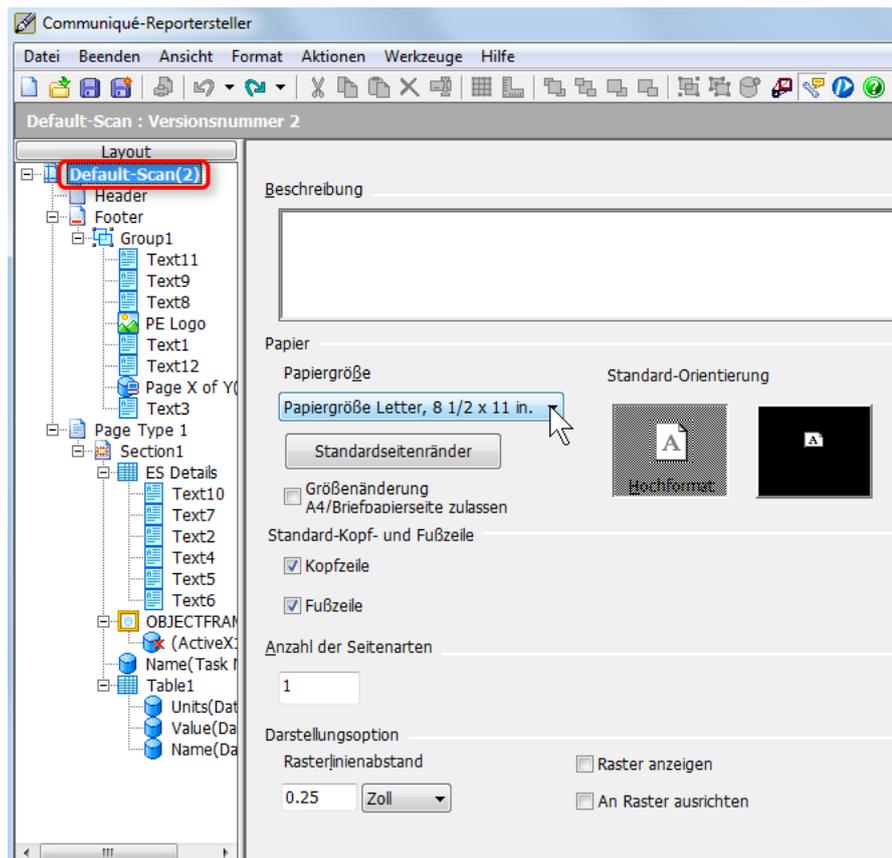
Maßeinheit

von Inch auf cm umstellen

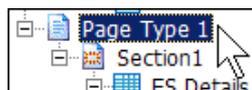


Seitenformat

Um z.B. das **Seitenformat** festzulegen, muss man in der Baumstruktur auf das oberste Element klicken.

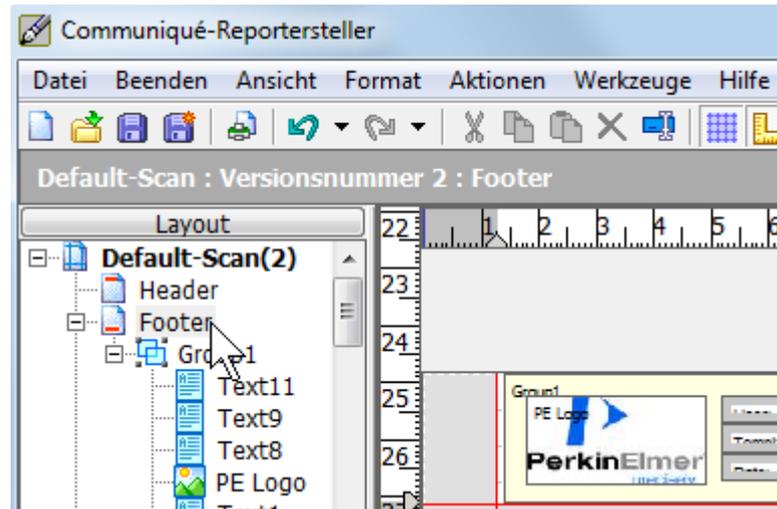


Um wieder **in den Layout-Bereich zurück** zu gelangen, empfiehlt sich ein Klick auf „**Page Type 1**“ in der Baumstruktur.



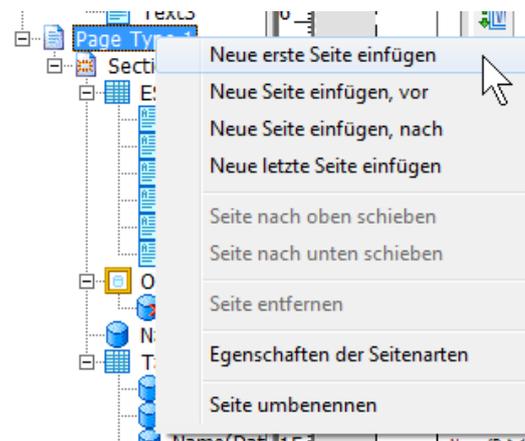
Header und Footer

Kopfzeile („**Header**“) und Fußzeile („**Footer**“) wiederholen sich auf jeder Seite.



Neue Seite einfügen

Um eine **neue Seite einzufügen**, klickt man mit der rechten Maustaste in der Baumstruktur auf das Element einer Seite:



Es erscheint eine neue leere Seite („**Page Type 2**“).

Elemente einfügen: Click and Draw !

Der Communiqué funktioniert **NICHT über Drag&Drop, sondern über Click&Draw**. D.h. Sie klicken einmal auf das Element auf der rechten Seite, lassen die Maus los und gehen in den Layout-Bereich in der Mitte. Der Mauszeiger weist dann eine spezielle Form auf. Hier kann dann ein Rahmen aufgezo-gen werden oder auch nur mit einem einfachen Klick ein Element gewählt oder abgelegt werden.

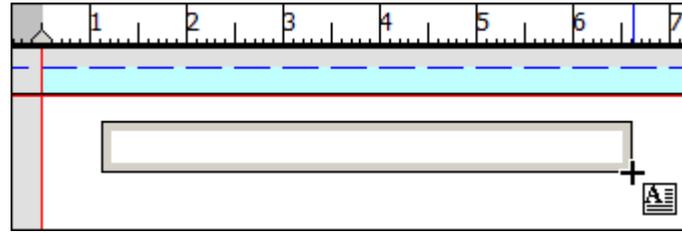
Neue Überschrift einfügen und formatieren

Auf der neu angelegten Seite können wir neue Objekte anlegen, z.B. eine **neue Überschrift**:

Dazu klicken wir einmal auf das Layout-Werkzeug „**Textblock**“

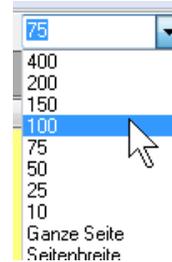


Textblock und lassen die Maustaste wieder los. Wenn wir dann ins Seiten-Layout wechseln, können wir mit der linken Maustaste einen Rahmen aufziehen, der die Begrenzung für den Text sein soll:



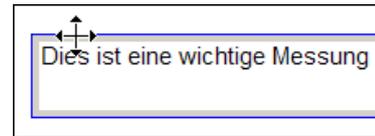
Zoom anpassen

Nach dem Loslassen der Maus kann in das Feld geklickt werden und der **Text editiert**. Ist der Text zu klein zum Lesen, so kann der Zoom noch angepasst werden:

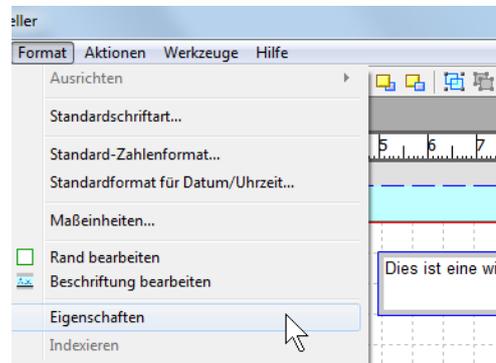


Überschrift formatieren

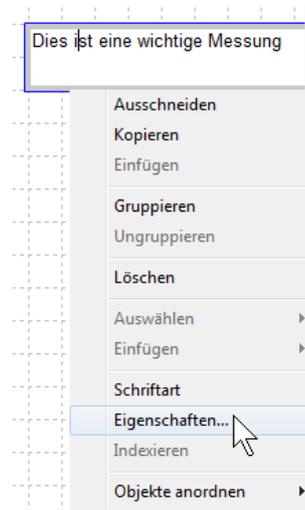
Klickt man auf den **Rahmen**, so dass dieser **blau und somit aktiviert** wird. Der Rahmen wird übrigens nicht gedruckt:



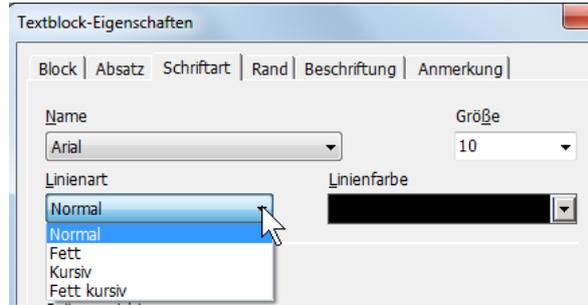
Nun kann man über das Menü „Format > Eigenschaften“ das angewählte Element formatiert werden.



Alternativ kann man auch mit der rechten Maustaste exakt auf den blauen Rahmen klicken.

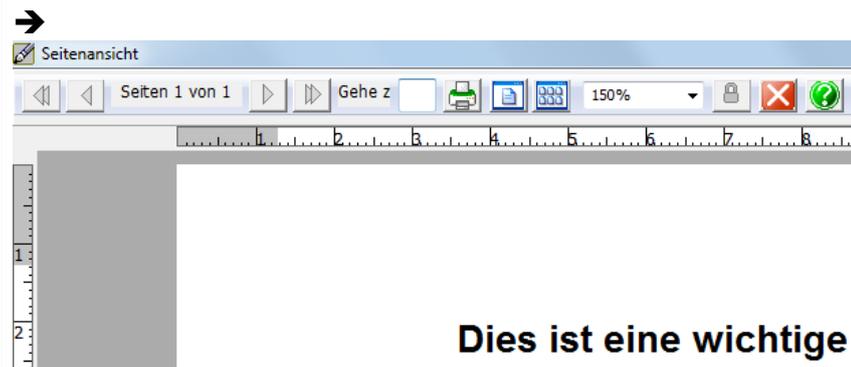
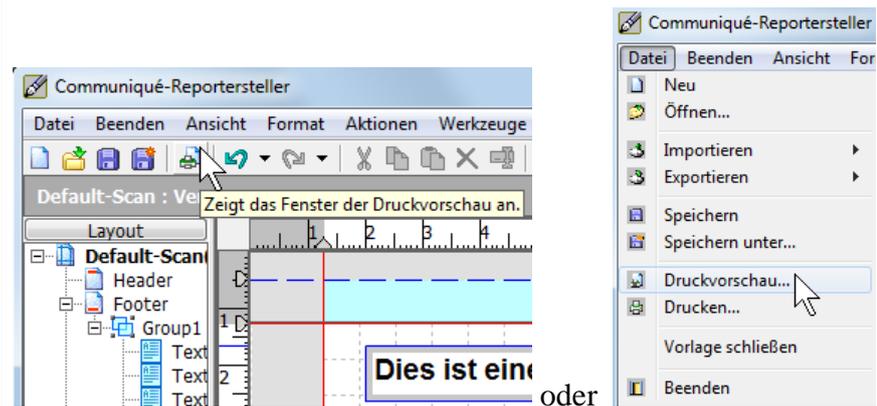


Hier kann Schriftgröße und -art festgelegt werden:



Vorschau auf den Report

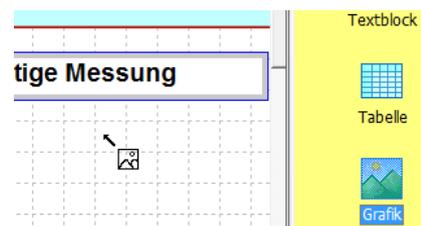
Um einen Eindruck zu bekommen, wie der Ausdruck ausschauen könnte, kann man direkt in die Druckvorschau wechseln. Dies geht entweder über das Menü „Datei > Druckvorschau...“ oder den Button :



Mit den Pfeil-Buttons kann man auch die anderen Seiten anschauen.

Firmenlogo einfügen

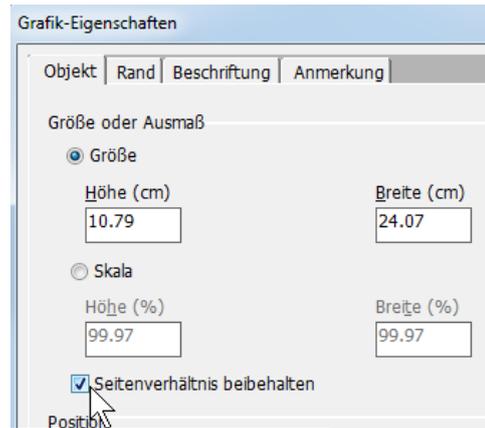
Um das Firmenlogo einzufügen, muss analog vorgegangen werden. Einfacher Mausklick auf das Layout-Werkzeuge „**Grafik**“, anschließend ein **Einfach**click im Layout (nicht Bereich aufspannen, da dies verzerrt):



Bitmap-Grafik skalieren

Falls das Logo noch skaliert werden muss, so geht das am besten wie beim Text über „Format > Eigenschaften“.

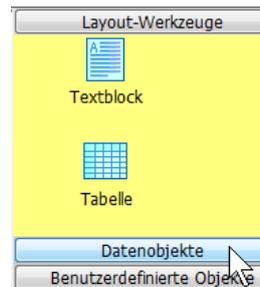
Wichtig hierbei ist, dass mit „**Seitenverhältnisse beibehalten**“ gesorgt wird. Dies geht nicht beim Ziehen mit der Maus.



Platzhalter für die Messdaten:

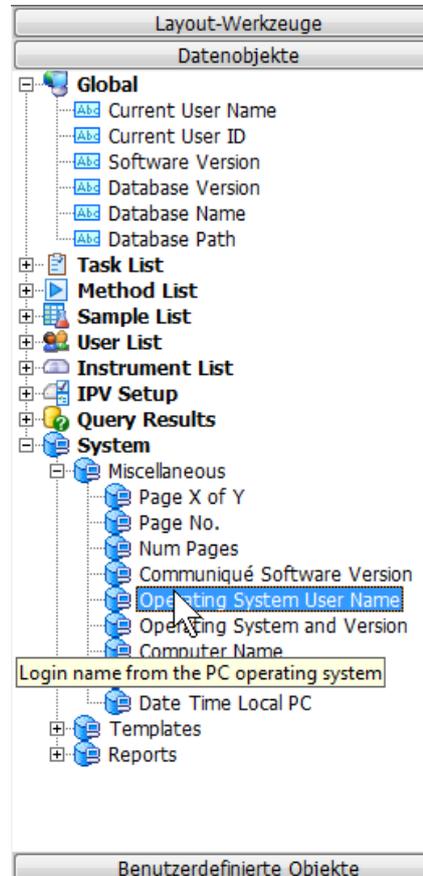
Datenobjekte

Hauptaufgabe des Reports ist sicher, die **Messdaten** und die **Messbedingungen** zu dokumentieren. Die entsprechenden Objekte finden sich den „**Datenobjekte**“



Allgemeine Variablen

In dieser Baumstruktur finden sich praktisch alle erfassten Variablen, die wiederum einmal angeklickt werden und dann im Layout mit der Maus auf eine bestimmte Größe aufgezogen werden oder per Einfachklick in Standardgröße im Layout platziert werden.



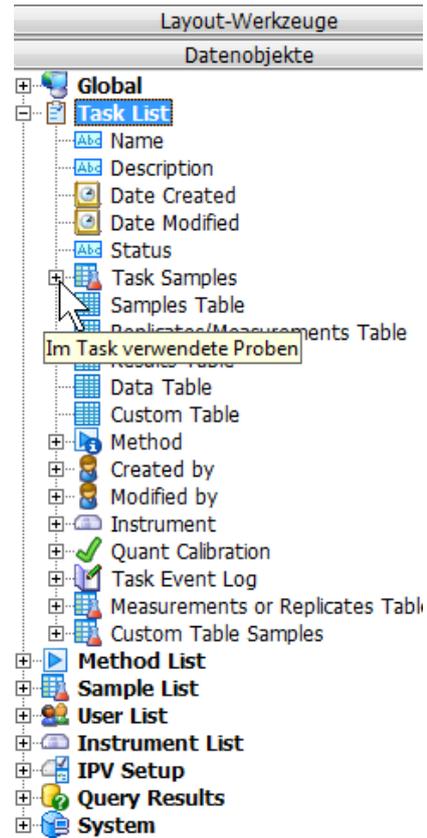
Task-spezifisches:

Task List

- Probentabelle
- Ergebnistabelle

In der Verzweigung „**Task List**“ können wir z.B. einfach die **Probentabelle** („**Probeninformation**“) und die **Ergebnistabelle** („**Ergebnisse**“) anklicken und dann im Layout in der gewünschten Größe aufspannen.

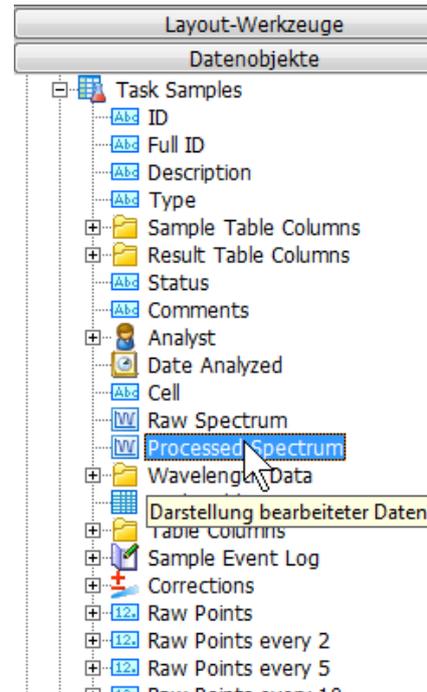
Praktisch alle benötigten Variablen zur Messung selbst finden sich in der Verzweigung **Task List**. **Suchen Sie also zuerst hier**, bevor Sie in die anderen Verzweigungen gehen.


Proben-spezifisches:

Task List > Task Samples

- Spektren
- Peaktable

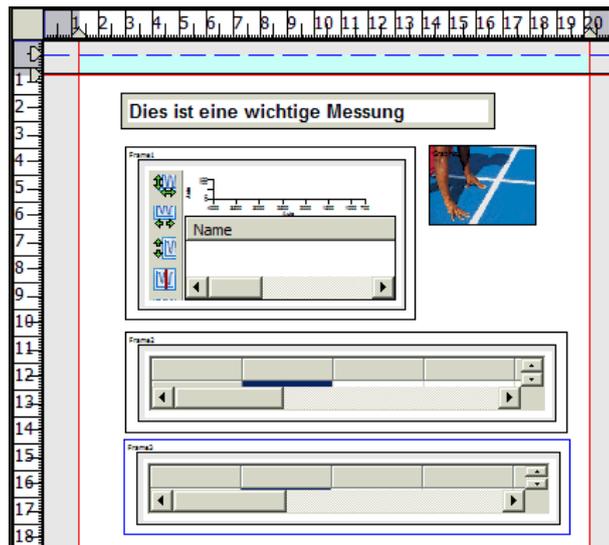
Spektren und anderen Elemente (z.B. die Peaktable), die sich nicht auf den gesamten Task, sondern **auf die einzelne Probe beziehen**, finden wir dementsprechend in der Unterverzweigung „**Task List > Task Samples**“


Speziell formatierte Tabellen: Benutzerdefinierte Objekte

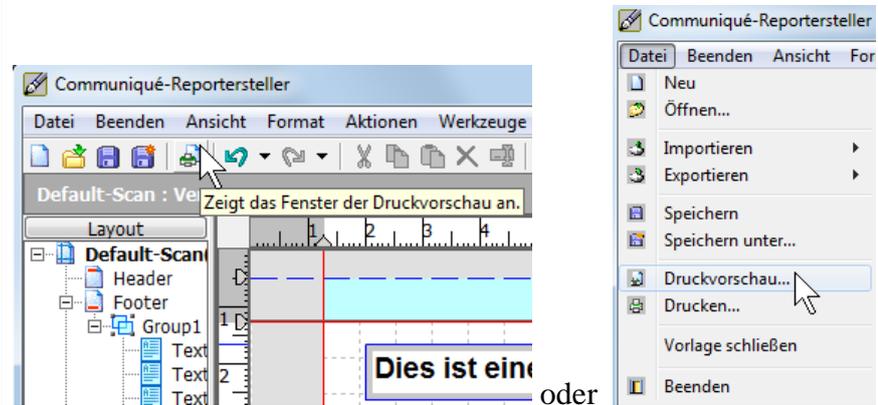
Es gibt immer wieder Bedarf an Tabellen mit anderen Eigenschaften (z.B. Tabellen mit Seitenumbruch). Einige interessante Tabellen wurden bereits von PerkinElmer Mitarbeitern erstellt und können bequem als Benutzerdefiniertes Objekt importiert werden. Details hierzu finden sich **in einem gesonderten Tutorial**.

Zwischenergebnis

Unsere Übung könnte dann im Layout-Bereich etwa so aussehen:



**Zwischen-
Ergebnis als
Preview**



Über diese zwei Möglichkeiten kann man sich anzeigen lassen, wie das Ergebnis mit der Vorlage aussehen würde. Voraussetzung ist, dass man den Editor mit dem Bearbeiten-Button aus der Methode heraus aufgerufen hat.

So sieht dann z.B. der zugehörige **Ausdruck** aus:

Dies ist eine wichtige Messung

Proben-ID	Beschreibung	Typ	Zulieferer	Einwaage (mg/L)
Holmium	Beispielspektrum	Probe	PerkinElmer	60.457

Proben-ID	Beschreibung	Einwaage (mg/L)	Ext_445 (A)	A1%	Bewertung	Peak_X_445	Peak_Y_445
Holmium.Probe	Beispielspektrum	60.457	1.526	252.5	nicht o.k.	444.7	1.541

User: Ivo Stemmer
 Template: test1
 Date: 03.13.2017 12:47 Mitteleuropäische Zeit
 Seite 1 von 2

Vorlage speichern

Anschließend wird die Reportvorlage in die Communiqué-Datenbank gespeichert, hier als „Scan-Test 01“:

Verknüpfen des neuen Vorlagen mit der Methode

Nach dem Schließen des Communiqué muss noch die neue **Report-Vorlage mit der Methode verknüpft** werden.

Dies muss auch geschehen, wenn es sich nur um eine Modifikation handelt, da sich hierbei die Revision ändert.

Als letzter Schritt wird dann noch die **Methode abgespeichert**.

