



## SpectrumIMAGE – Microscopy Software



## Softwareleitfaden

Version 1.0  
Stand Oktober 2014

Claudia Ries, Applikation Materialcharakterisierung

## Inhaltsverzeichnis

1	Software im Überblick.....	5
1.1	Allgemeine Steuerung & Bedienung.....	5
1.1.1	Steuerung der Grundfunktionen.....	5
1.2	Geräteeinstellungen.....	9
1.3	Übersichtsdarstellung – die Probe im Überblick .....	10
2	Durchführung von Messungen .....	11
2.1	Untergrundposition definieren.....	11
2.2	Einstellung der Parameter für die Spektrenaufnahme .....	11
2.2.1	Probenpositionierung .....	11
2.2.2	Fokussierung .....	12
2.2.3	Beleuchtung .....	12
2.2.4	Blendeneinstellung .....	12
2.2.5	Messpunkt definieren .....	13
2.3	Spektrenaufnahme .....	13
2.3.1	Untergrundaufnahme .....	13
2.3.2	Einzelpunktmessung .....	14
2.3.3	Messequenz.....	14
2.4	Verwendung des MikroATR-Objektivs.....	14
2.4.1.1	Positionieren des MikroATR-Kristalls.....	14
2.4.1.2	Einzelpunktmessungen .....	15
2.4.1.3	Messequenzen.....	15
2.5	LineScan .....	16
2.5.1	Einstellung des LineScans.....	16
2.5.2	Definieren der Scanparameter.....	16
2.5.3	Definieren LineScan-Einstellungen .....	17
2.5.4	Aufnahme des LineScans .....	18
2.6	Mapping .....	18
2.6.1	Einstellung der Map .....	18
2.6.2	Definieren der Scanparameter.....	19
2.6.3	Definieren Map-Einstellungen .....	19
2.6.4	Aufnahme der Map.....	20

3	Imageaufnahme .....	21
3.1	Untergrundaufnahme .....	21
3.2	Imageaufnahme .....	22
3.2.1	Definition der Imageparameter .....	22
4	Datenaufnahme mit ATR-Imaging .....	23
4.1	Einbau des ATR-Imaging Zubehörs .....	23
4.2	Kristallposition registrieren.....	24
4.3	Untergrundaufnahme .....	24
4.4	Imageaufnahme einer Probe .....	25
4.4.1	Automatische Korrekturen .....	25
4.4.1.1	Kristall Image.....	25
4.4.1.2	Grundlinienkorrektur .....	26
4.5	Wechsel zu Punktmessungen oder Imageaufnahmen .....	28
5	Auswertung von Einzelspektren .....	29
6	Auswertung eines LineScan .....	29
6.1	Darstellung von Spektren.....	29
6.1.1	Spektren extrahieren .....	29
6.2	Intensitätsprofil über Wellenzahl anzeigen .....	30
6.3	Differenzspektrum .....	31
7	Auswertung von Mapping/Imaging-Dateien .....	31
7.1	Öffnen von Dateien.....	31
7.2	Darstellung anpassen.....	32
7.3	Allgemeine Funktionsleiste .....	32
7.4	Darstellung von Spektren.....	33
7.4.1	Drop-Down-Menü „Ansicht“ .....	33
7.4.2	Allgemeine Funktionsleiste von Imagedateien .....	33
7.4.2.1	Spektrum anzeigen .....	34
7.4.2.2	Bereichsmittelwertspektrum anzeigen.....	34
7.4.2.3	Querschnittsprofil anzeigen .....	34
7.4.3	Funktion „Spektrum zeigen“ .....	35
7.4.4	Spektren extrahieren .....	36
7.5	Prozesse zur Auswertung.....	36
7.5.1	Atmosphärenkorrektur .....	36
7.5.2	Rauschen vermindern .....	36

7.5.3	Struktur anzeigen .....	37
7.5.4	Normierung .....	39
7.5.5	Ableitung bilden .....	39
7.5.6	Glätten .....	40
7.5.7	Grundlinienkorrektur .....	40
7.6	Graphische Auswertungen von Mapping- oder Imagedatein.....	41
7.6.1	Intensitätsimage über Wellenzahl anzeigen .....	41
7.6.2	ChemiMap.....	42
7.6.3	Einzelwellenzahldarstellung.....	43
7.6.4	Korrelationsvergleich .....	43
7.6.5	Differenzspektrum .....	44
8	Dokumentation .....	45
8.1	Einzelpektren.....	45
8.2	Visuelle Mikroskopaufnahmen/Übersichtsdarstellungen .....	45
8.3	LineScan-, Map- oder Image-Dateien .....	46

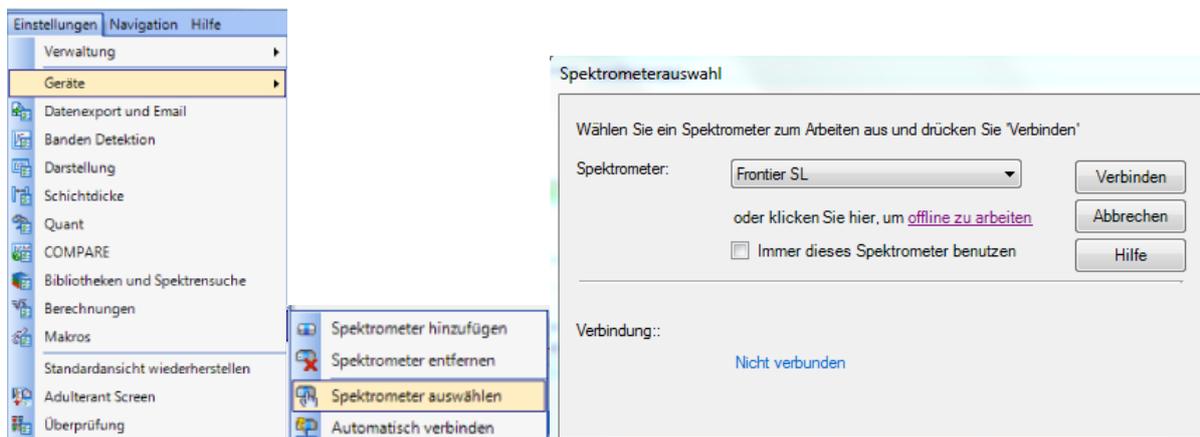
# 1 Software im Überblick

## 1.1 Allgemeine Steuerung & Bedienung

Bei der Anwendungssoftware SpectrumIMAGE handelt es sich um ein Softwarepaket zur Steuerung und Datenaufnahme der PerkinElmer Spotlight™ Produkte. Diese kann immer in Kombination mit PerkinElmer Spectrum10, der IR-Anwendungssoftware, genutzt werden.

Anmerkung: Spectrum10 und Spectrum Image können nicht gleichzeitig auf das Spektrometer bzw. Mikroskop zugreifen, während Mikroskopiemessungen kann Spectrum10 aber offline zur Auswertung genutzt werden.

Verbindung zwischen Spectrum10 und dem Spektrometer kann über *Einstellungen – Geräte – Spektrometer auswählen* eingestellt werden

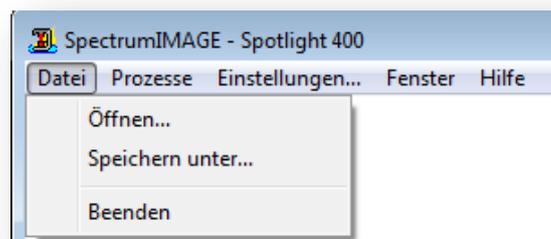


### 1.1.1 Steuerung der Grundfunktionen

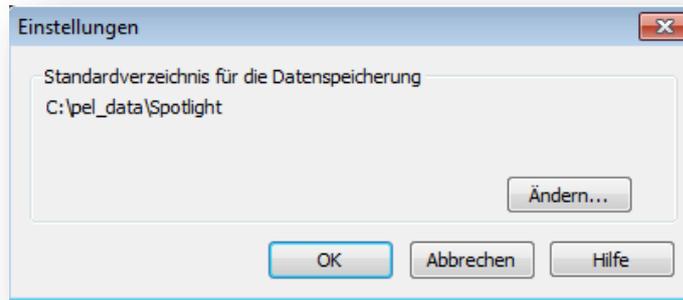
Grundlegende Einstellungen können in der Leiste der Grundfunktionen angepasst werden



- Öffnen von aufgenommenen/gespeicherten Dateien



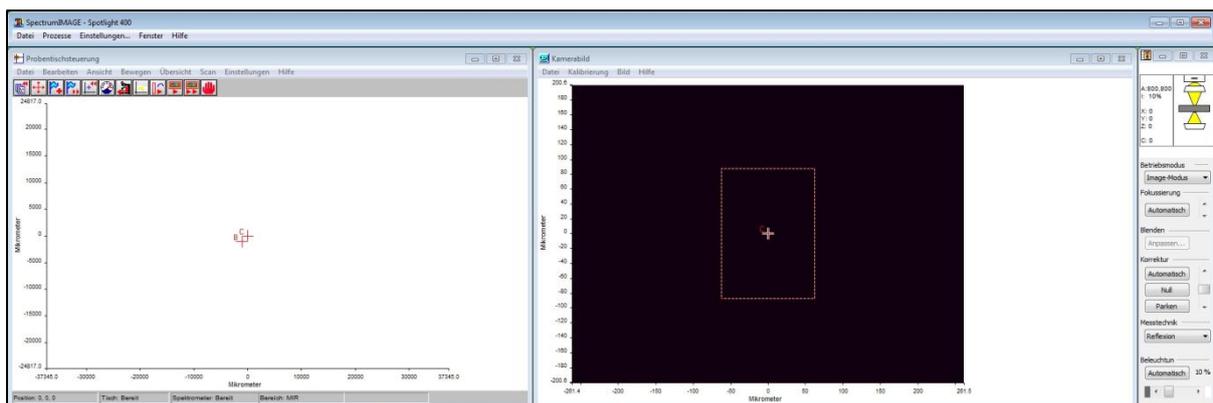
- Einstellung eines Standardverzeichnis



- Zugriff auf verschiedene Hilfedateien

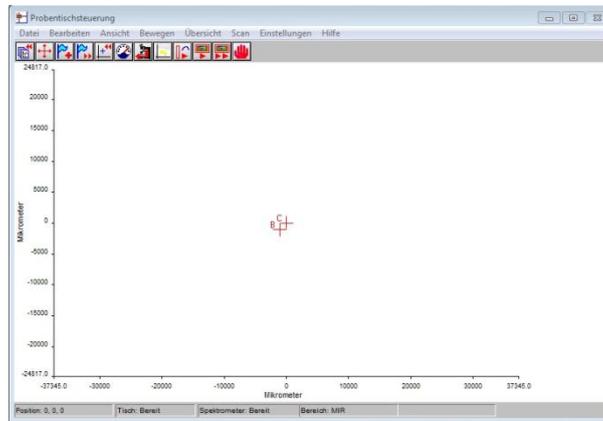


SpectrumImage zeigt drei Fenster zur allgemeinen Steuerung:

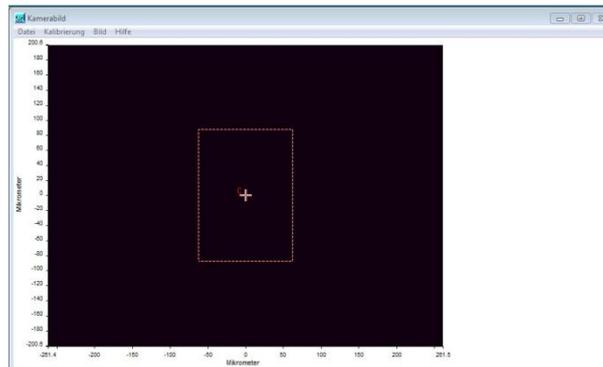


C gibt die aktuelle Cursor-Position, B die Position der letzten Untergrundaufnahme

- Probenstischsteuerung  
Umfasst alle Funktionen zum Einrichten der Messungen, Definieren von Messpunkten und -parametern



- Kamerabild  
Visuelles Bild der Probe und aktuellen Position



○ Steuerung



Umfasst alle Geräteeinstellungen:

Aktuelle Cursorposition (X/Y/Z)

Position des unteren Cassegrainobjektivs (C)

Schema des Strahlenganges mit aktueller Stagehöhe

Messmodus: Punktmessungen/Image-Modus/ATR-Imaging (Abhängig vom Spotlight Modell)

Fokussierung: Automatische Fokussierung oder Korrektur der Stageposition über den Cursor

Blendeneinstellung:  
(Größeneinstellung, Winkel)

Korrektur: Steuerung der Position des unteren Cassegrainobjektivs

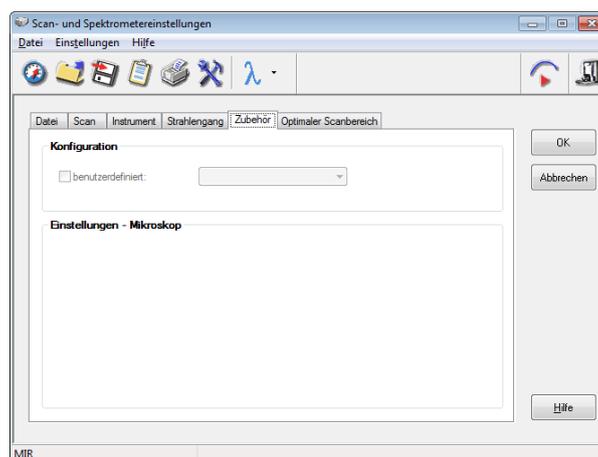
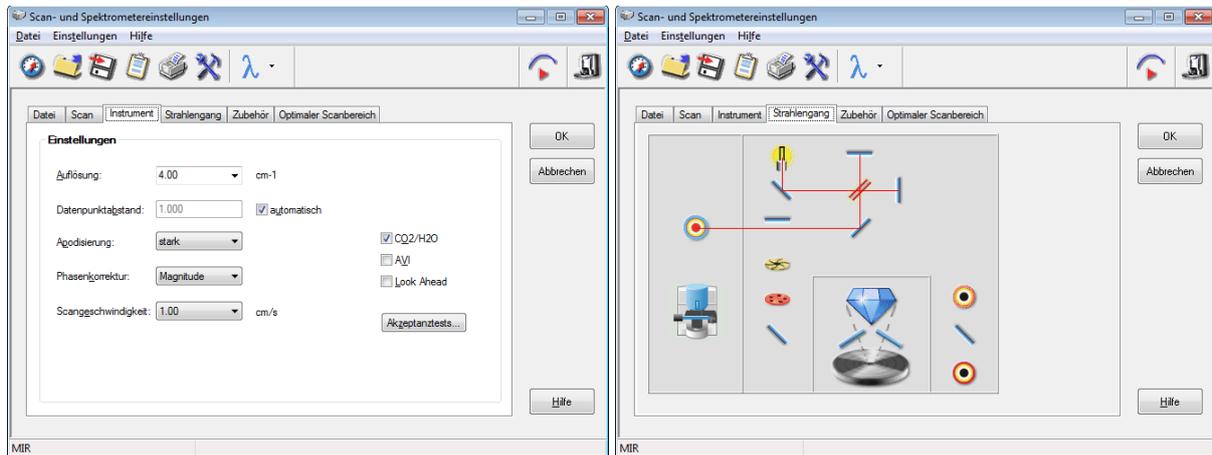
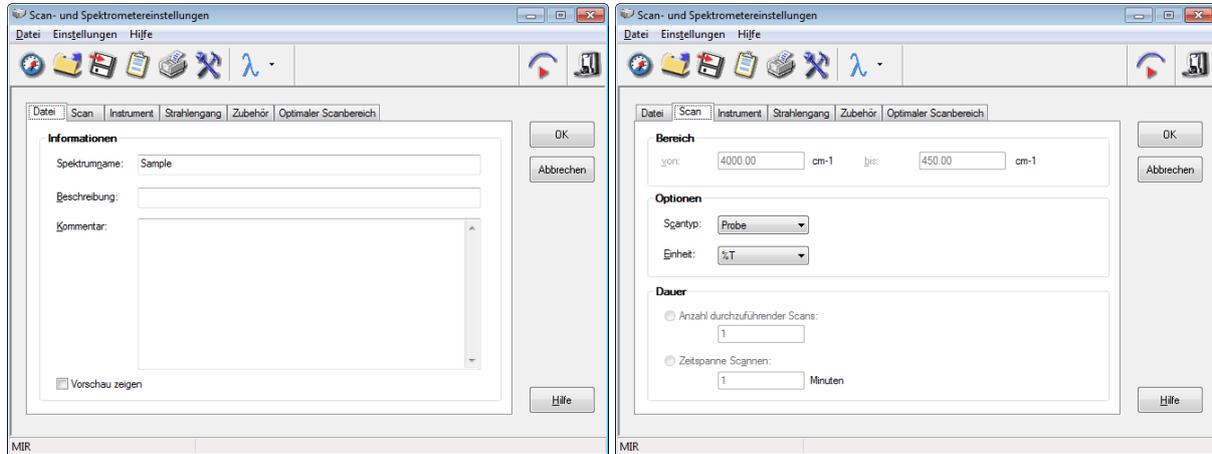
- Automatisch: Korrektur der Cassegrainposition, wichtig bei der Verwendung einer Diamantzelle für Transmissionsmessungen
- Null/Parken: Positionseinstellung zum Ausbau des Cassegrainobjektivs

Messtechnik: Reflexion oder Transmissionsmodus

Beleuchtung: Einstellung der Lichtintensität, automatisch oder individuell über die Cursor anpassbar

## 1.2 Geräteeinstellungen

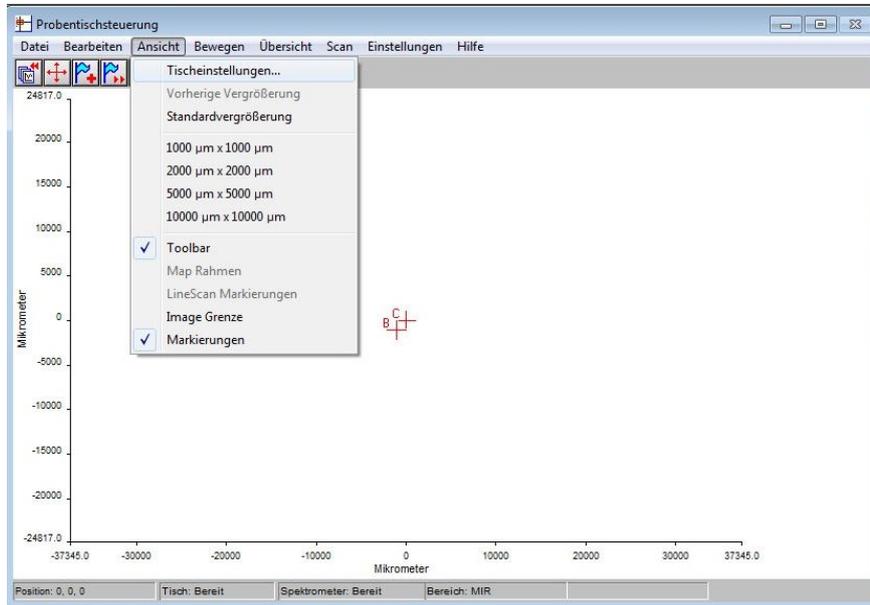
Alle wichtigen Einstellungen wie Informationen zur Probe, Scanparameter oder Zubehör können unter *Scan – Geräteeinstellungen* angepasst werden.



### 1.3 Übersichtsdarstellung – die Probe im Überblick

Einen Überblicksausschnitt über einen größeren Probenausschnitt kann mit einer Übersichtsdarstellung erstellt werden:

Probentischsteuerung: *Ansicht – Größe des Ausschnitts wählen*



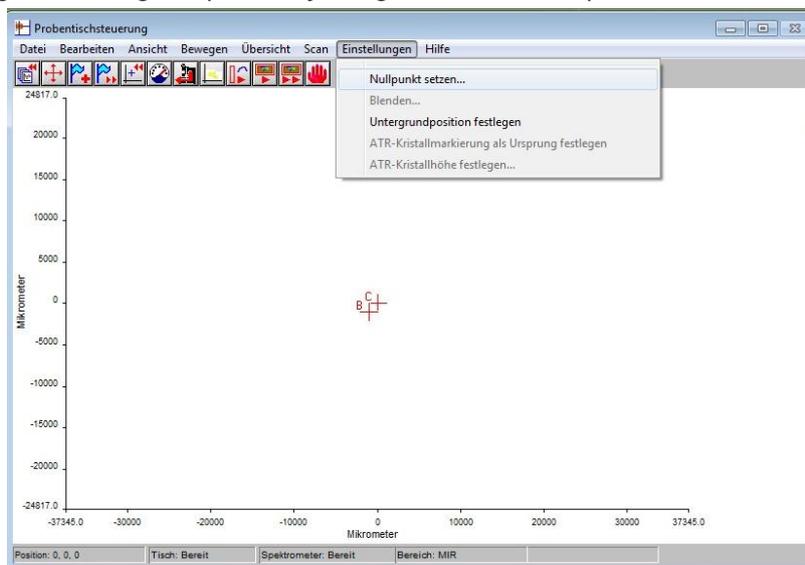
Die Übersicht wird über *Übersicht – Übersichtsdarstellung erstellen* gestartet.

## 2 Durchführung von Messungen

### 2.1 Untergrundposition definieren

Es kann eine Untergrundposition festgelegt werden, an welcher immer die Untergrundaufnahme erfolgen soll. Dies ist insbesondere während der Aufnahme von Messsequenzen mit verschiedenen Messparametern notwendig.

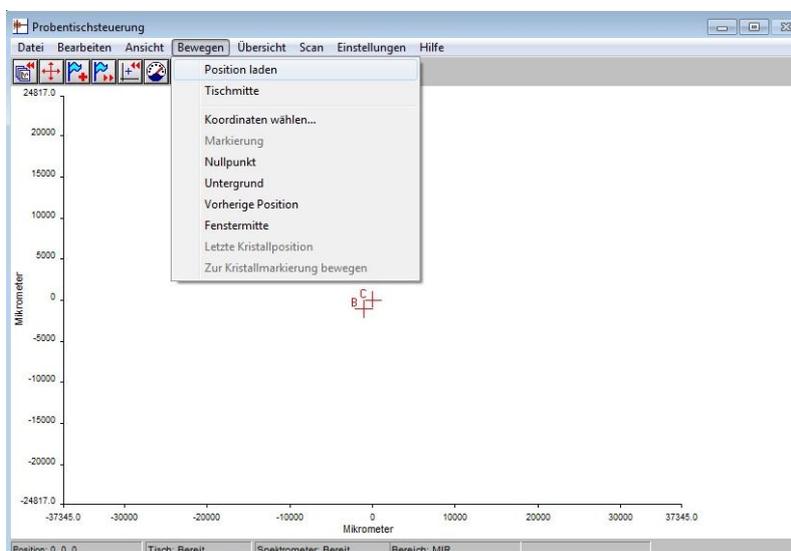
Zur Bestimmung der Untergrundposition den Probenstisch zur gewünschten Position navigieren, unter *Einstellungen – Untergrundposition festlegen* die Position speichern



### 2.2 Einstellung der Parameter für die Spektrenaufnahme

#### 2.2.1 Probenpositionierung

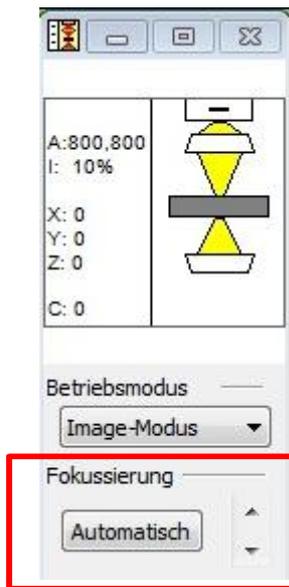
Um Proben aufzulegen/positionieren: Probenstisch über Joystick herausfahren oder *Bewegen – Position laden*. Die Probenposition kann über Joystick verändert werden oder durch das Verschieben des Cursors (C) Messfenster



### 2.2.2 Fokussierung

Die Fokussierung auf die Probenoberflächen kann über den Joystick oder über die Software erfolgen

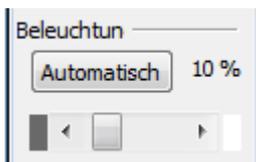
- Automatisch
- Manuell über die Cursor



### 2.2.3 Beleuchtung

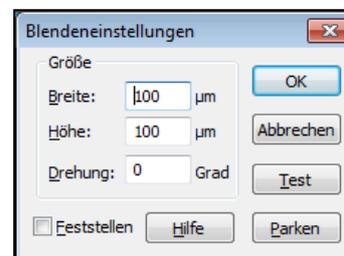
Die Einstellung der Lichtintensität erfolgt über die Software:

- Automatisch (Standard 9% Licht)
- manuell über die Cursor

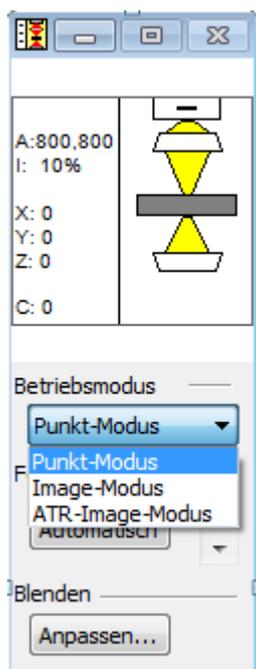


### 2.2.4 Blendeneinstellung

Die Blenden können individuell an jeden Messpunkt angepasst werden



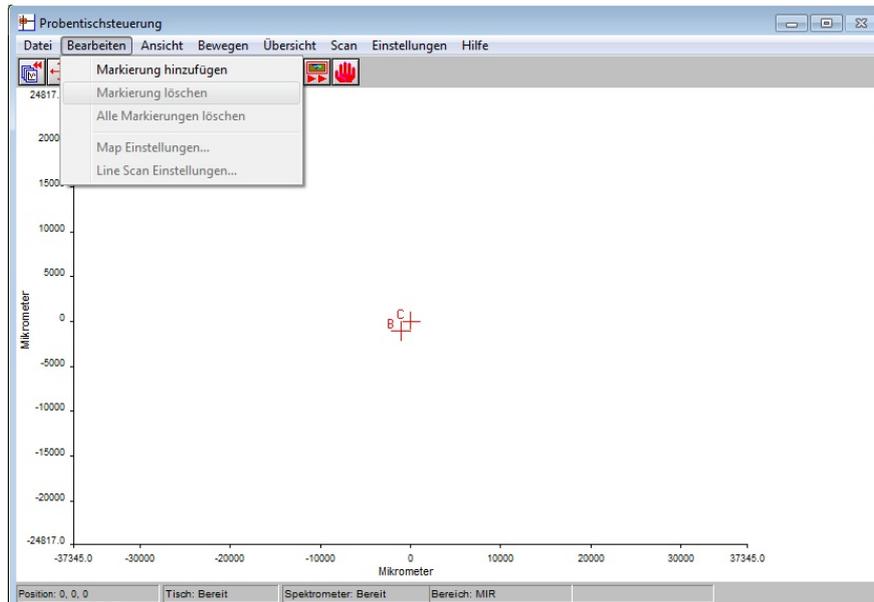
Werte können hier eingeben werde oder die Größe und Position interaktiv über den Rahmen im Fenster Kamerabild anpassen werden



## 2.2.5 Messpunkt definieren

Punktmessungen können an markierten Punkten auf der Probe durchgeführt werden. In der Markierung wird X, Y und Z-Position sowie Winkel der Blendeneinstellung gespeichert.

Diese Messpunkte werden im Kamerabild oder in der Übersichtsdarstellung über Rechte-Maus „Markierung hinzufügen“ definiert oder unter *Probentischsteuerung* – *Bearbeiten* – *Markierung hinzufügen*



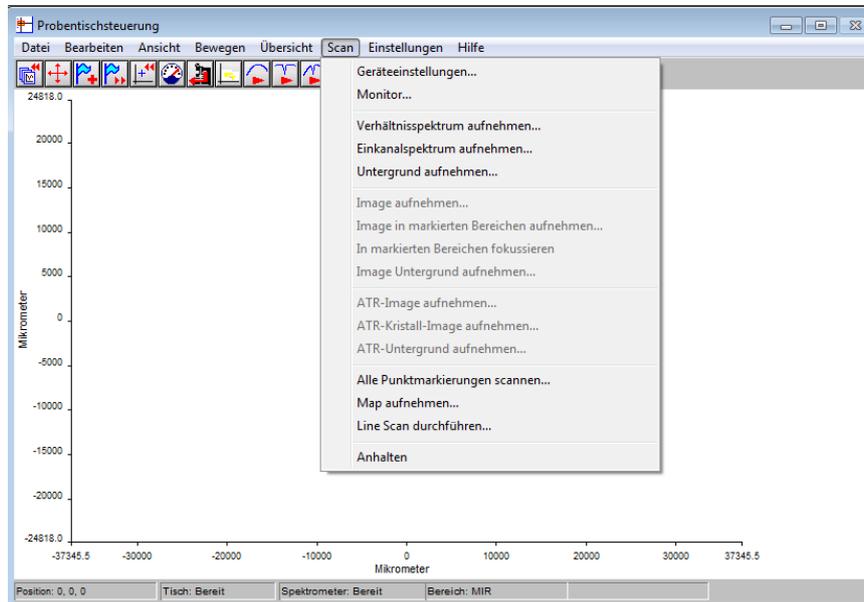
## 2.3 Spektrenaufnahme

### 2.3.1 Untergrundaufnahme

Die Untergrundaufnahme sollte mit den Parametern erfolgen, welche auch für die Probemessungen angewendet werden. Bei Einzelpunktmessungen den Probentisch manuell an die Untergrundposition bewegen, die Untergrundaufnahme starten über: *Scan* – *Untergrund aufnehmen*

### 2.3.2 Einzelpunktmessung

Die Spektrenaufnahme erfolgt *Scan – Verhältnisspektrum aufnehmen* oder *Einkanalspektrum aufnehmen*



Das Einkanalspektrum beinhaltet das Untergrundspektrum und das Probenspektrum, während das Verhältnisspektrum bereits mit dem Untergrundspektrum korrigiert wurde und somit das Probenspektrum darstellt.

### 2.3.3 Messesequenz

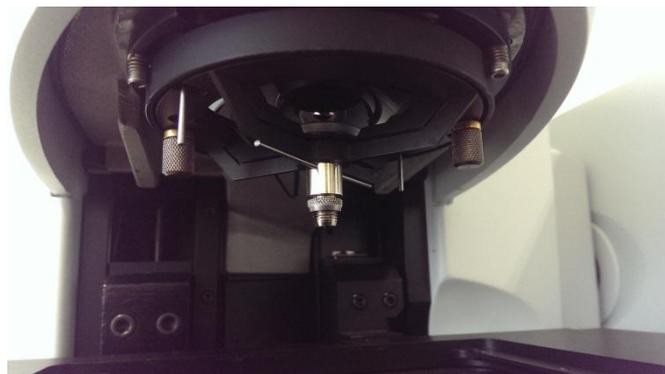
Prinzipielles Vorgehen:

- Untergrundposition definieren
- Messpunkte festlegen über Markierung hinzufügen
- Datenaufnahme über *Scan – alle Punktmarkierungen scannen*

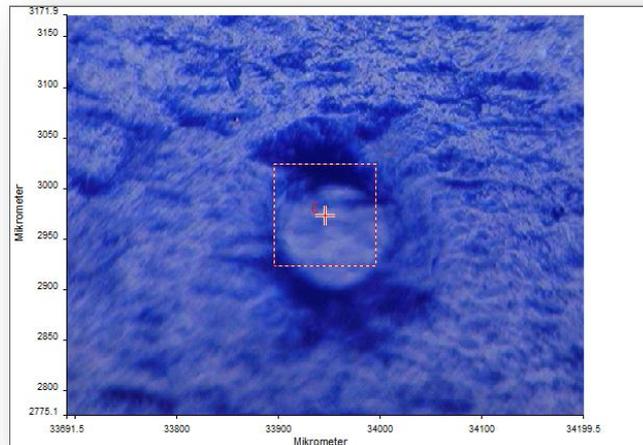
## 2.4 Verwendung des MikroATR-Objektivs

### 2.4.1.1 Positionieren des MikroATR-Kristalls

Der MikroATR-Kristall wird über die Stellschrauben justiert. Die Eindringtiefe bzw. Stärke des Kontaktes kann über die Schraube am Schaft justiert werden.

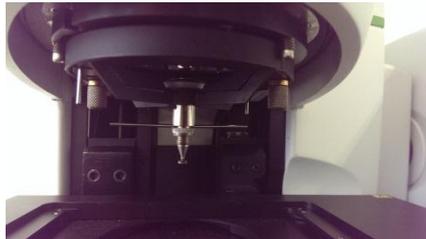


Die Position des Kristalls kann mithilfe eines Tapes auf einem Objektträger, auf den der Kristall abgelassen wird, überprüft werden. Der Kristall sollte zentral auf die Blendenmitte justiert werden.



#### 2.4.1.2 Einzelpunktmessungen

- Untergrundaufnahme mit ausgefahrenen Kristall in Luft



- Spektrenaufnahme: im gewünschten Messpunkt fokussieren, Kristall absenken und auf die Probe absetzen, Verhältnisspektrum aufnehmen

#### 2.4.1.3 Messsequenzen

- Messpunkte definieren,
- Untergrund mit ausgefahrenem Kristall in Luft aufnehmen,
- Spektrenaufnahme über *Scan* – alle Punktmarkierungen scannen,
- ATR-Modus auswählen!

Die Spektrenqualität kann vor jeder Messungen über den Monitormodus überprüft werden

(Auswahl über Icon )

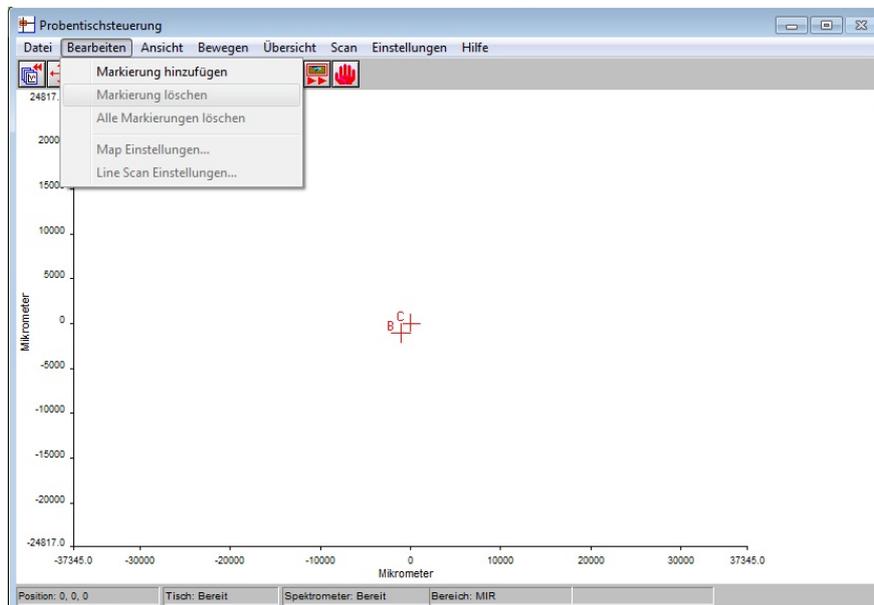
Bei der Verwendung des MikroATR-Objektivs kann über Fokussierung der Kontakt zwischen Probe und Kristall optimiert werden.

## 2.5 LineScan

LineScan kann in Transmission, Reflektion oder unter Verwendung des MikroATR-Objektivs angewendet werden.

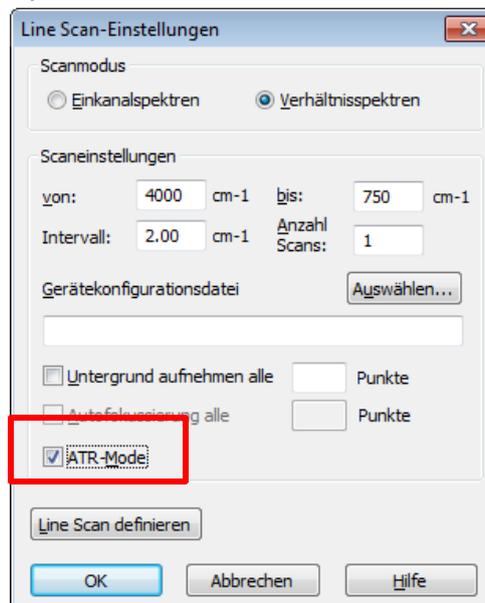
### 2.5.1 Einstellung des LineScans

Probentischsteuerung – Bearbeiten – LineScan-Einstellungen



### 2.5.2 Definieren der Scanparameter

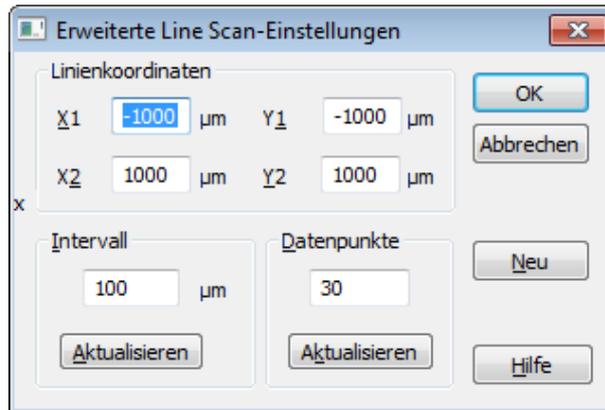
Verwendung des Mikro-ATR-Objektivs: ATR-Modus auswählen!



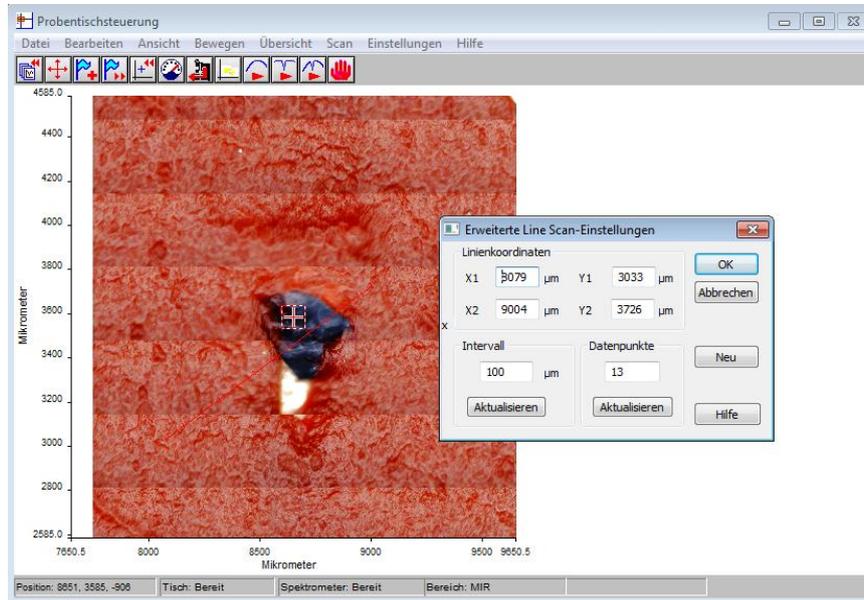
### 2.5.3 Definieren LineScan-Einstellungen

Folgende Einstellungsmöglichkeiten sind vorhanden:

- Koordinaten (Beginn und Ende der Datenaufnahme)
- Intervall der Datenpunktaufnahme (Abstand zwischen zwei Messpunkten) in X- und Y-Richtung
- Anzahl der Datenpunkte in X- und Y-Richtung



Alle Parameter können eingegeben werden oder interaktiv im Kamerabild oder Übersichtsdarstellung angepasst werden.

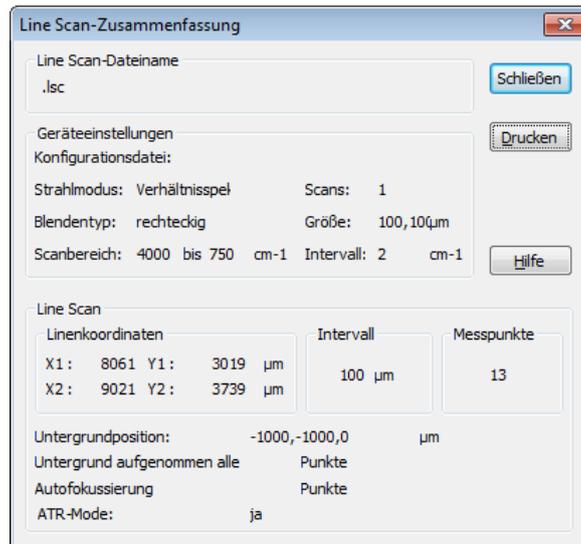


## 2.5.4 Aufnahme des LineScans

Datenaufnahme über Scan – LineScan aufnehmen



Die Zusammenfassung zeigt alle ausgewählten Parameter im Überblick.

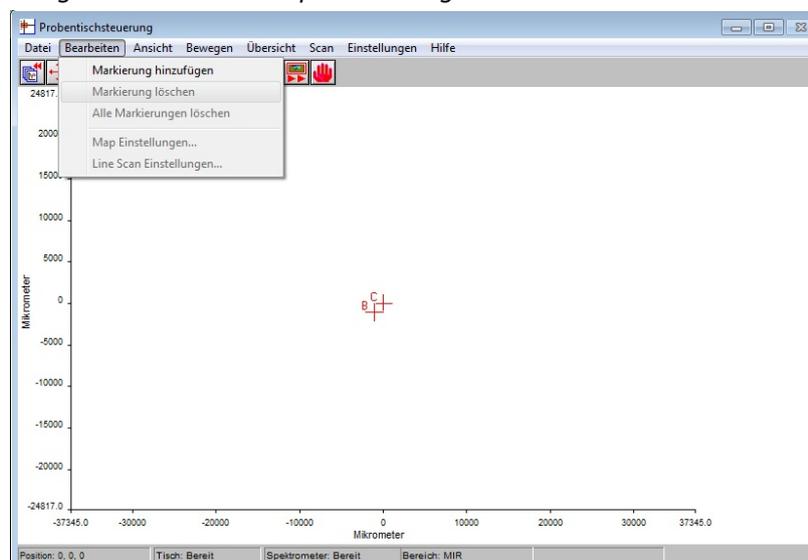


## 2.6 Mapping

Mapping kann in Transmission, Reflektion oder unter Verwendung des MikroATR-Objektivs angewendet werden.

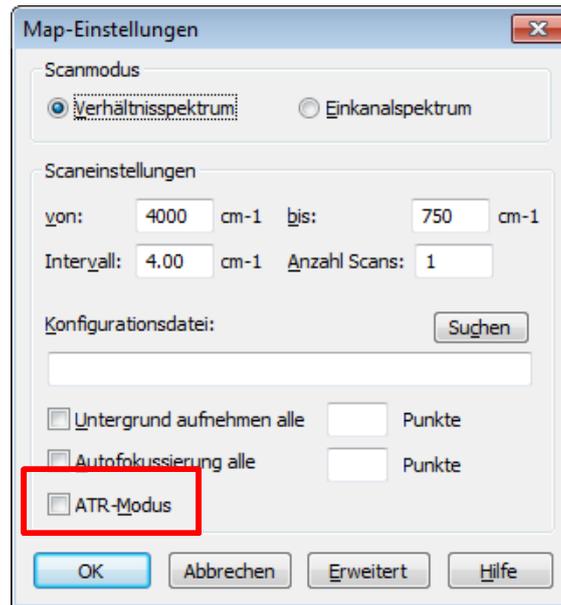
### 2.6.1 Einstellung der Map

Probenstischsteuerung – Bearbeiten – Map-Einstellungen



## 2.6.2 Definieren der Scanparameter

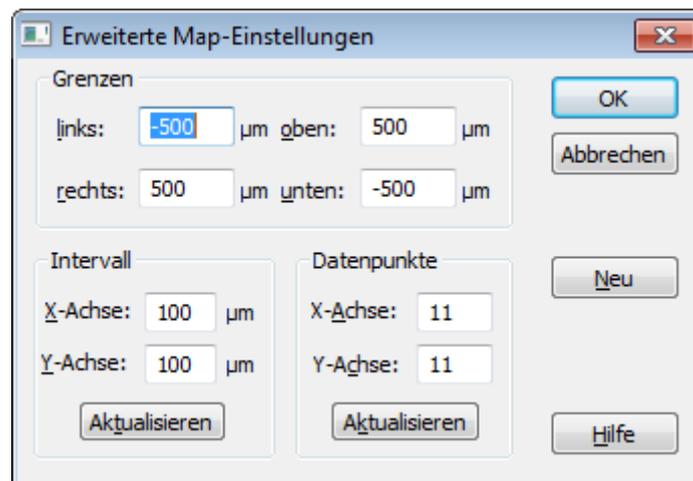
Verwendung des Mikro-ATR-Objektivs: ATR-Modus auswählen!



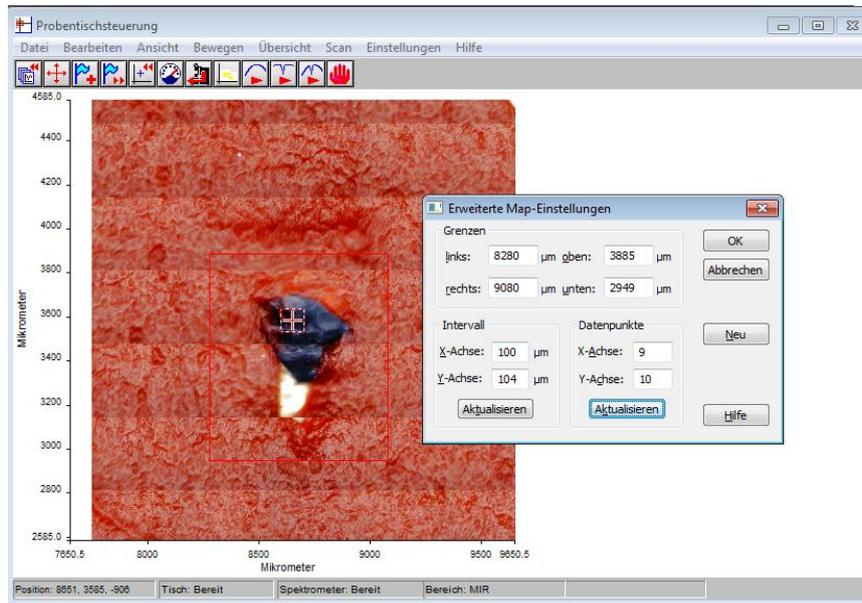
## 2.6.3 Definieren Map-Einstellungen

Folgende Einstellungsmöglichkeiten sind vorhanden:

- Gesamtgröße (Grenzen links & rechts, oben & unten)
- Intervall der Datenpunktaufnahme (Abstand zwischen zwei Messpunkten) in X- und Y-Richtung
- Anzahl der Datenpunkte in X- und Y-Richtung



Alle Parameter können eingegeben werden oder über den Rahmen der Map im Kamerabild oder Übersichtsdarstellung interaktiv angepasst werden

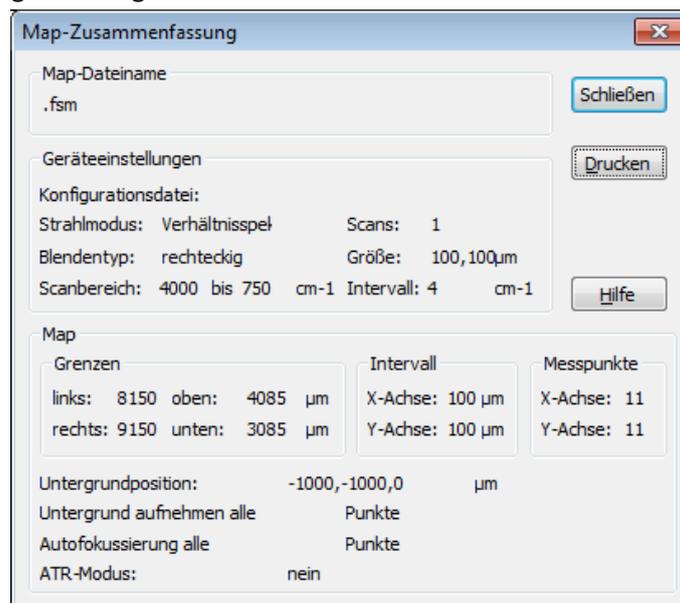


## 2.6.4 Aufnahme der Map

Datenaufnahme über Scan – Map aufnehmen



Zusammenfassung zeigt alle ausgewählten Parameter im Überblick

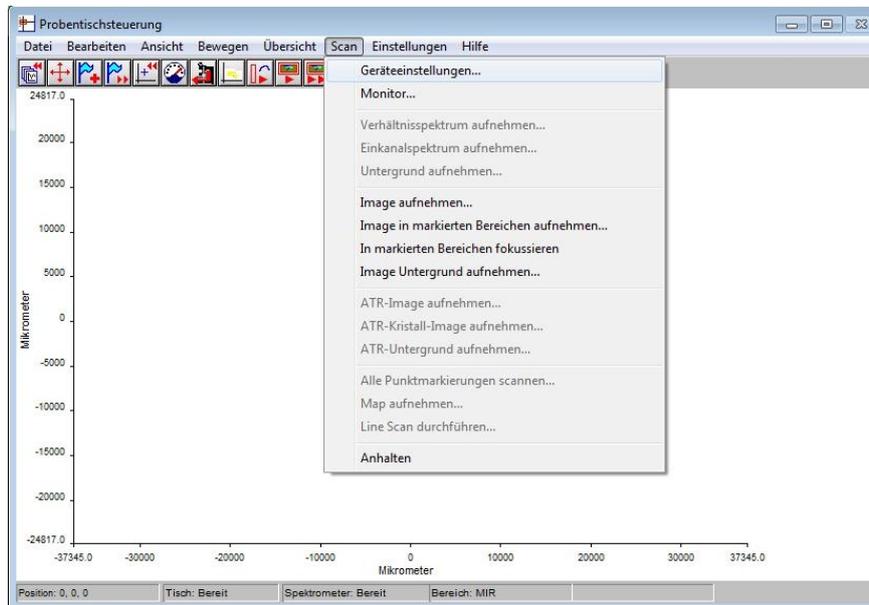


## 3 Imageaufnahme

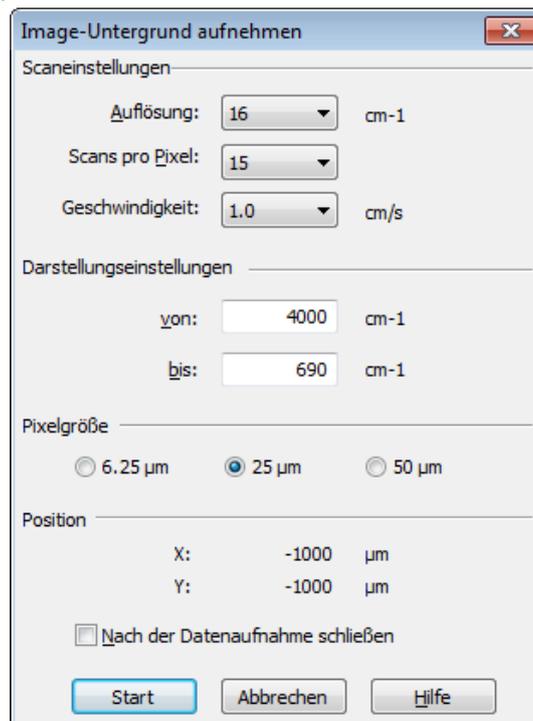
Images können in Transmission oder Reflexion aufgenommen werden

### 3.1 Untergrundaufnahme

Scan – Image-Untergrund aufnehmen

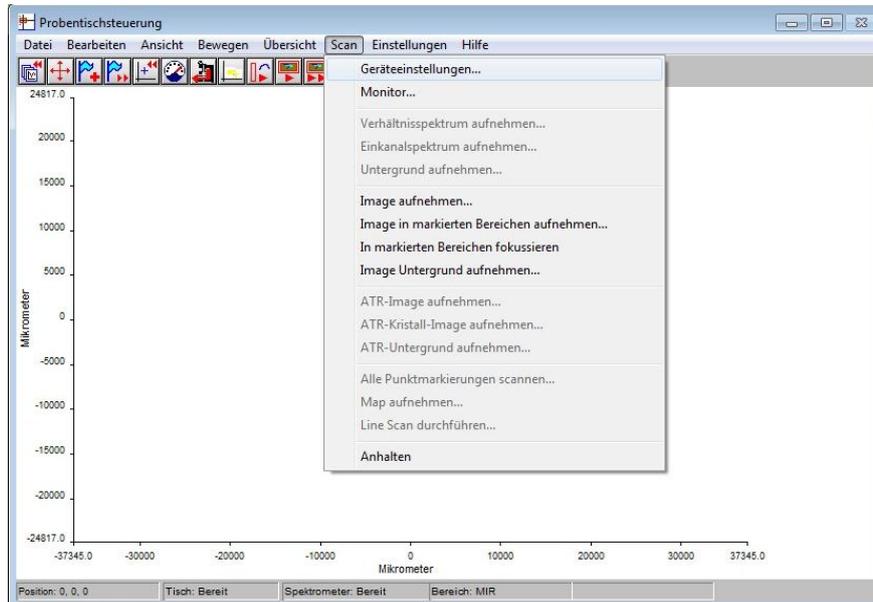


Für Transmissionsmessungen wird der Untergrund gegen Luft, für Reflexionsmessungen auf einem Goldspiegel aufgenommen. Vor der Datenaufnahmen können die Parameter der Untergrundaufnahme angepasst werden, wie sie für die Probenaufnahme benötigt werden.



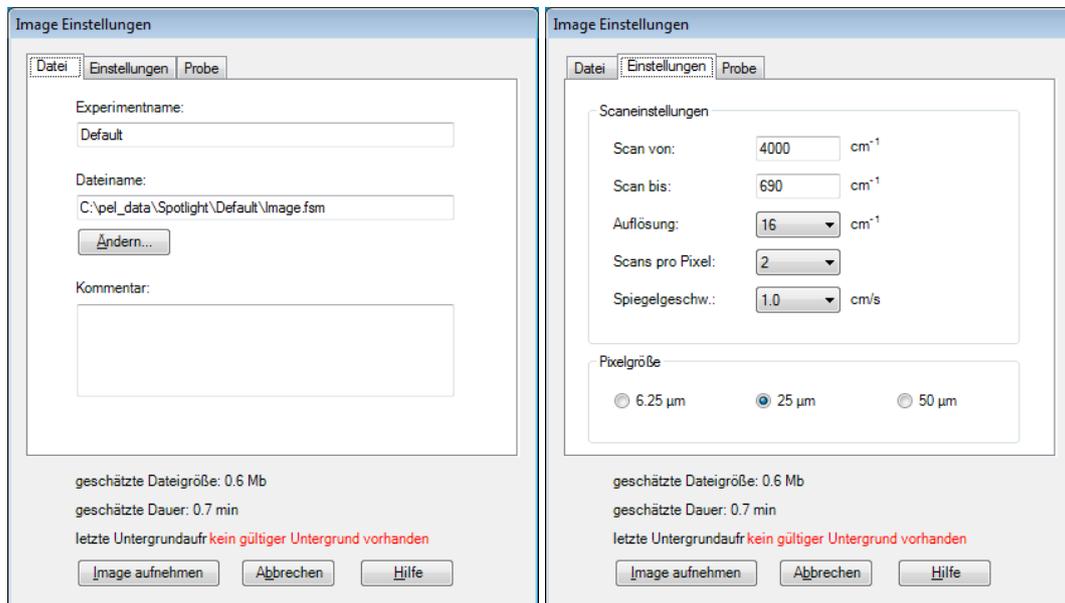
## 3.2 Imageaufnahme

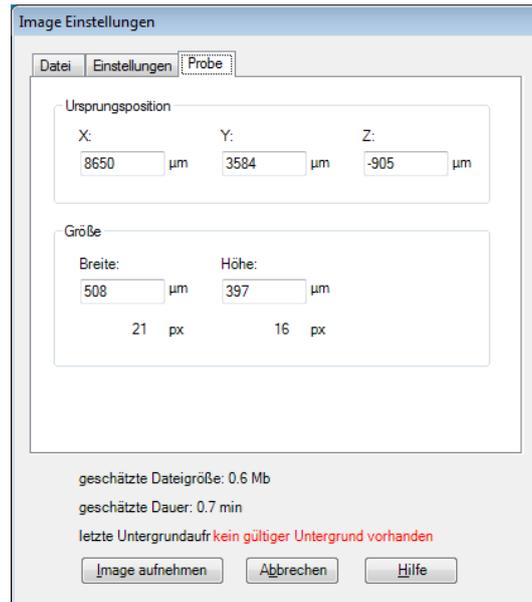
### Scan – Image aufnehmen



#### 3.2.1 Definition der Imageparameter

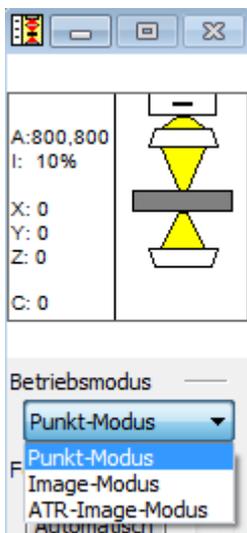
Vor der Imageaufnahme können die Messparameter individuell angepasst werden.





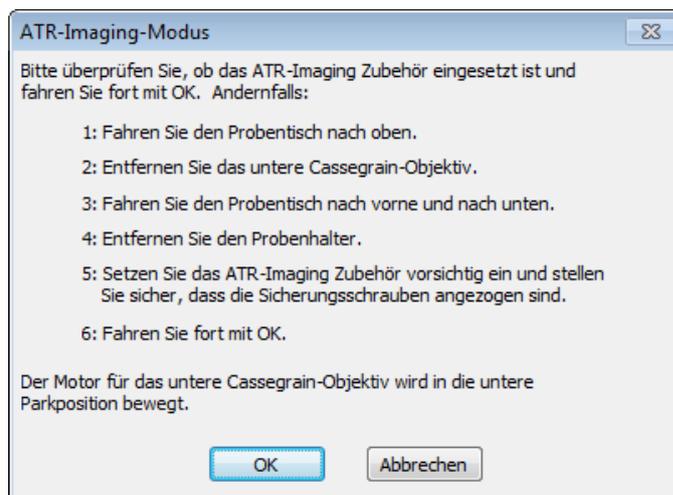
## 4 Datenaufnahme mit ATR-Imaging

### 4.1 Einbau des ATR-Imaging Zubehörs



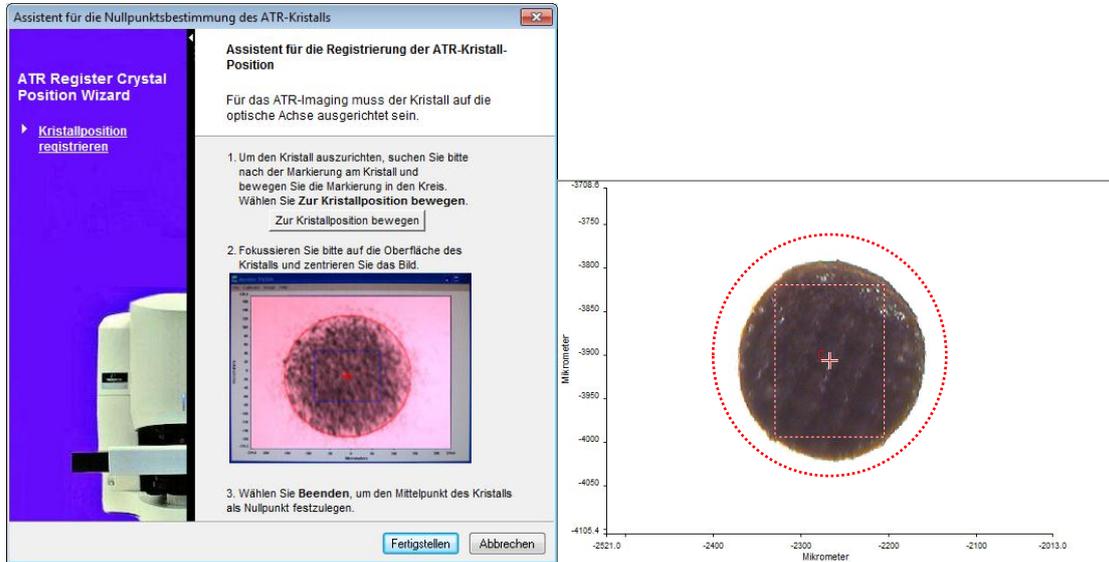
Beim Wechsel zwischen Punktmessungen und ATR-Imaging kann das Zubehör über eine Schritt-für-Schritt Anleitung der Software eingebaut werden

Auswahl ATR-Imaging Modus im Betriebsmodus



## 4.2 Kristallposition registrieren

Nach dem Einsetzen des ATR-Imaging Zubehörs muss die Kristallposition anhand einer Markierung auf der Kristalloberfläche registriert werden.



**Assistent für die Nullpunktbestimmung des ATR-Kristalls**

**ATR Register Crystal Position Wizard**

**Kristallposition registrieren**

**Assistent für die Registrierung der ATR-Kristall-Position**

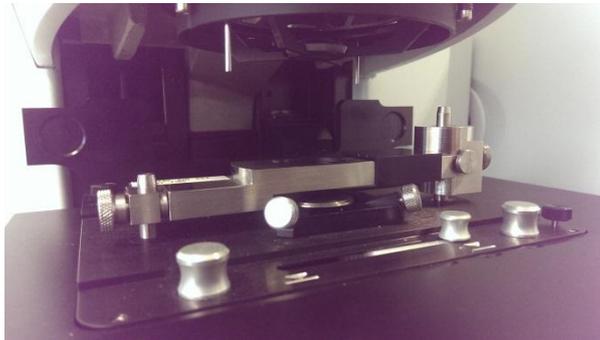
Für das ATR-Imaging muss der Kristall auf die optische Achse ausgerichtet sein.

- Um den Kristall auszurichten, suchen Sie bitte nach der Markierung am Kristall und bewegen Sie die Markierung in den Kreis. Wählen Sie **Zur Kristallposition bewegen**.  
**Zur Kristallposition bewegen**
- Fokussieren Sie bitte auf die Oberfläche des Kristalls und zentrieren Sie das Bild.
- Wählen Sie **Beenden**, um den Mittelpunkt des Kristalls als Nullpunkt festzulegen.

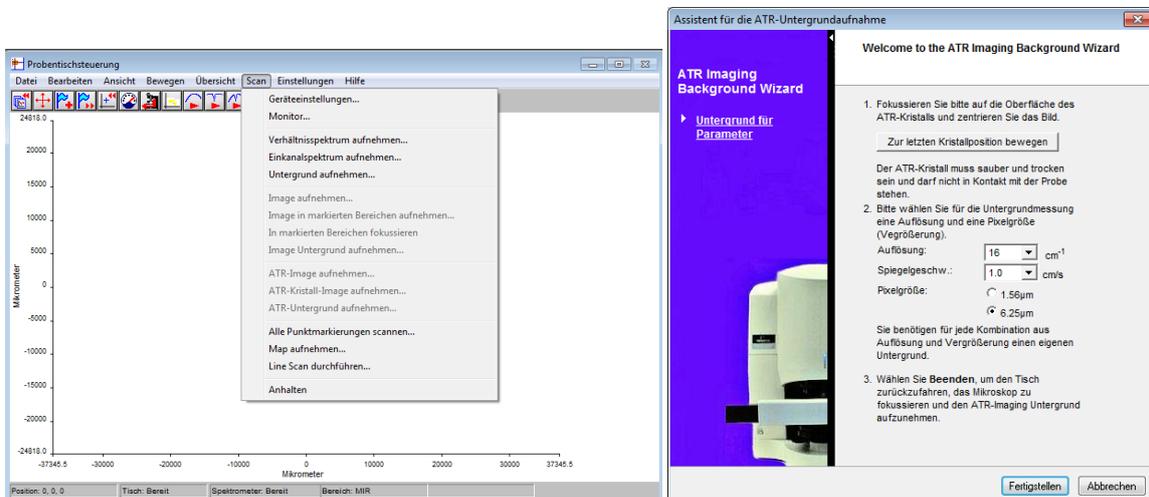
**Fertigstellen** **Abbrechen**

## 4.3 Untergrundaufnahme

Die Untergrundaufnahme erfolgt „in Luft“, kein Kontakt zwischen dem Kristall und dem Probenhalter!



### Scan – ATR-Untergrund aufnehmen



**Assistent für die ATR-Untergrundaufnahme**

**Welcome to the ATR Imaging Background Wizard**

**ATR Imaging Background Wizard**

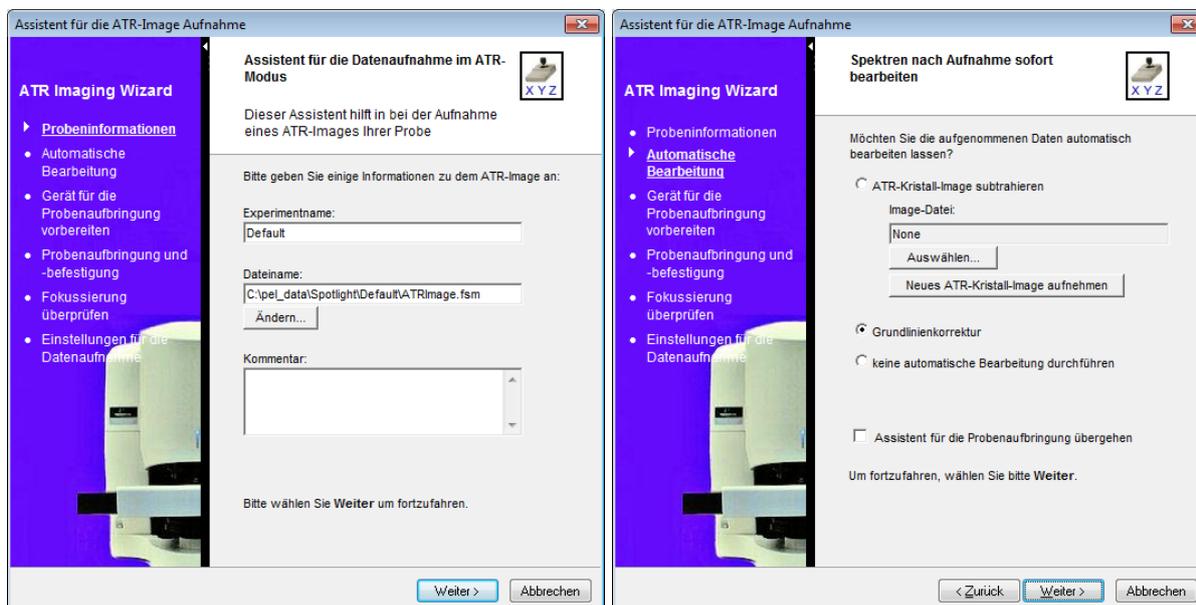
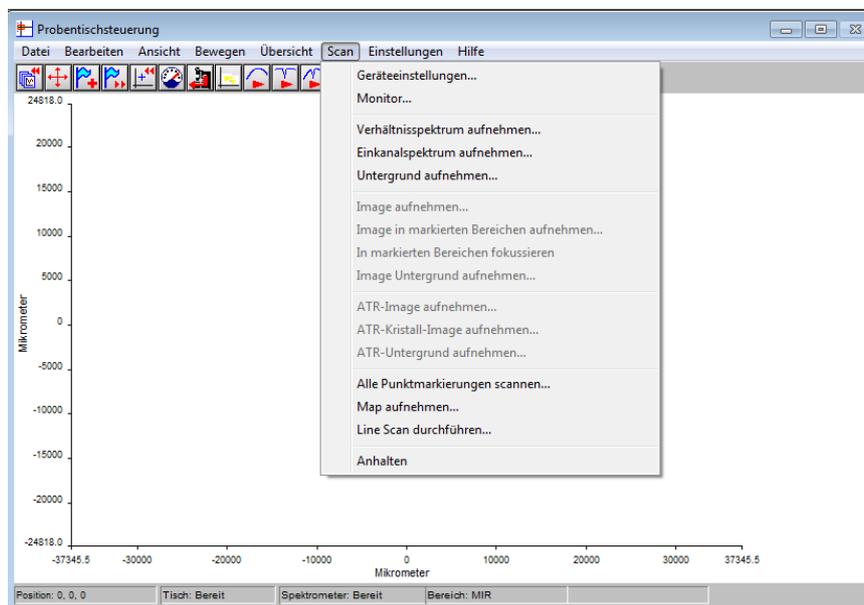
**Untergrund für Parameter**

- Fokussieren Sie bitte auf die Oberfläche des ATR-Kristalls und zentrieren Sie das Bild.  
**Zur letzten Kristallposition bewegen**
- Bitte wählen Sie für die Untergrundmessung eine Auflösung und eine Pixelgröße (Vergrößerung).  
Der ATR-Kristall muss sauber und trocken sein und darf nicht in Kontakt mit der Probe stehen.  
Auflösung:  cm<sup>-1</sup>  
Spiegelgeschw.:  cm/s  
Pixelgröße:  1.50µm  6.25µm  
Sie benötigen für jede Kombination aus Auflösung und Vergrößerung einen eigenen Untergrund.
- Wählen Sie **Beenden**, um den Tisch zurückzufahren, das Mikroskop zu fokussieren und den ATR-Imaging Untergrund aufzunehmen.

**Fertigstellen** **Abbrechen**

## 4.4 Imageaufnahme einer Probe

Das Messprozedere mit ATR-Imaging wird über einen Wizard in der Software Schritt für Schritt angeleitet.



### 4.4.1 Automatische Korrekturen

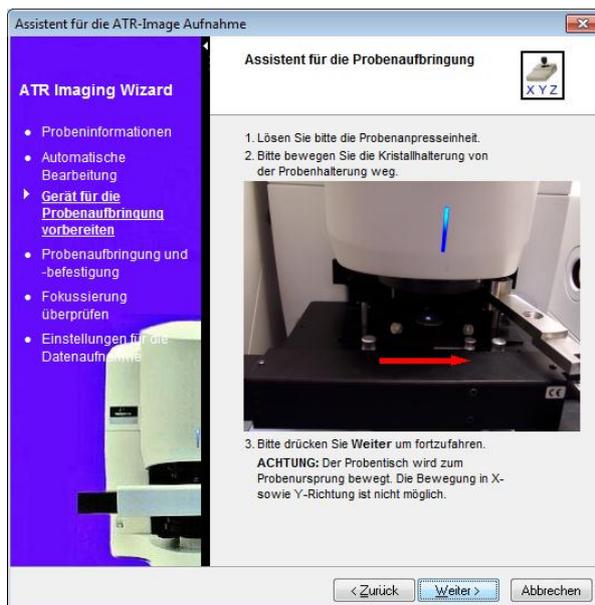
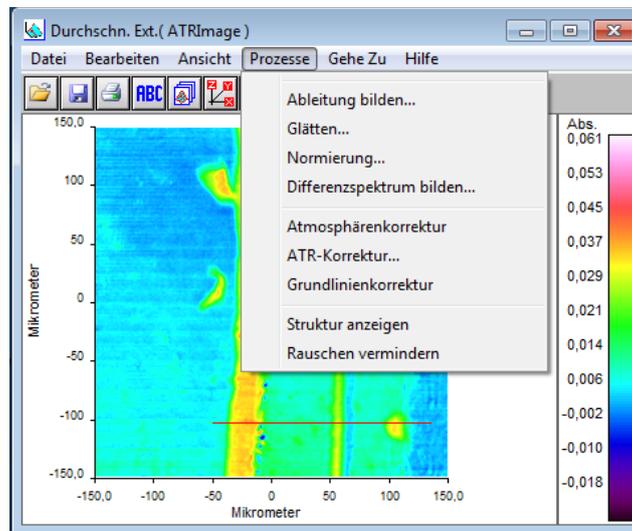
Für die Imageaufnahme können Parameter für eine automatische Spektrenbearbeitung ausgewählt werden

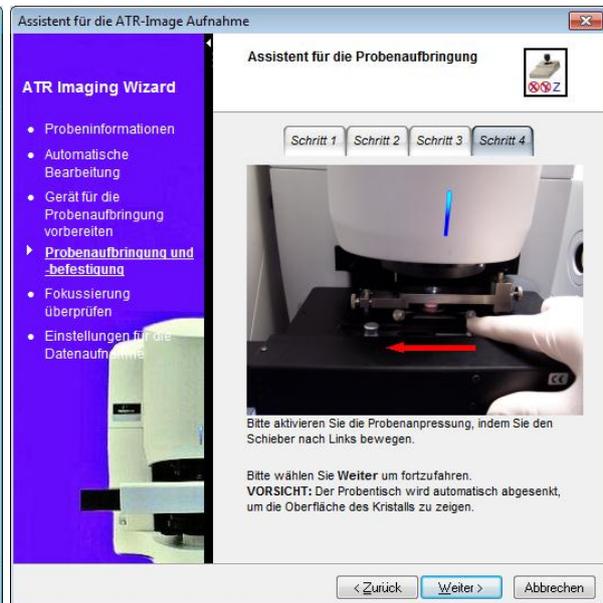
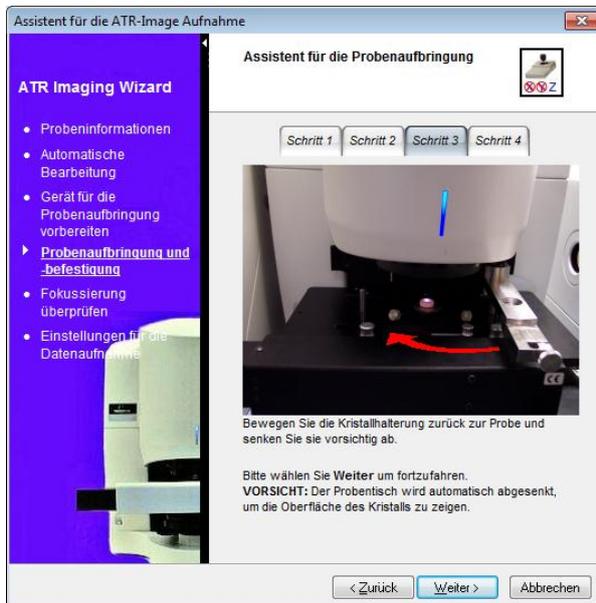
#### 4.4.1.1 Kristall Image

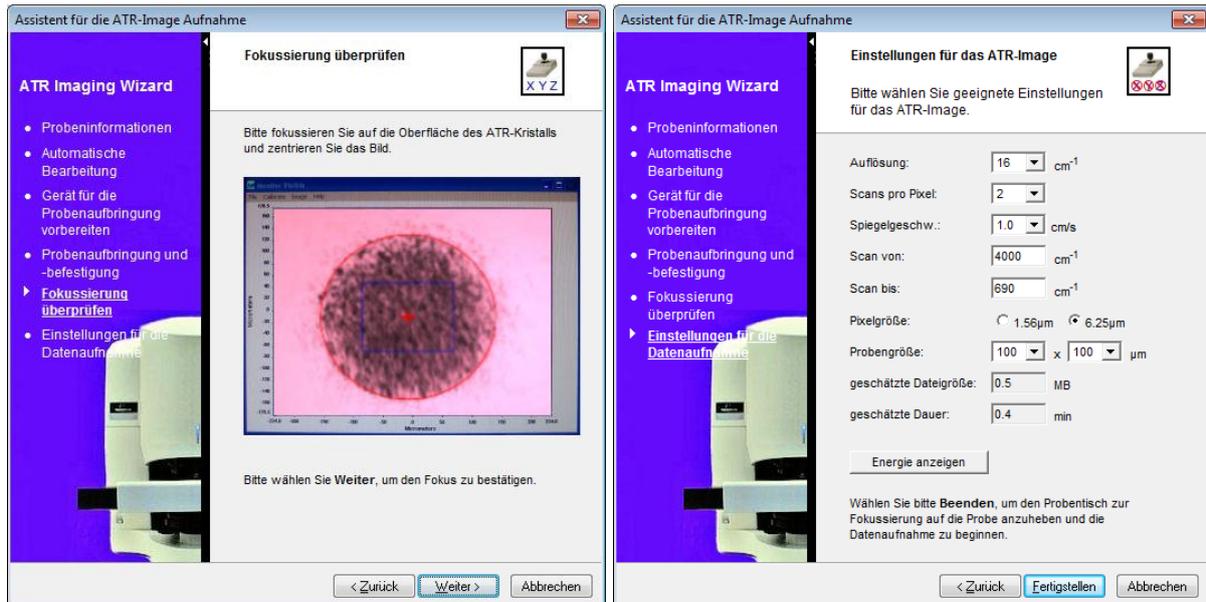
Bild von sauberem Kristall, Differenz zum Probenbild um Störbanden des Kristalls zu vermeiden (für jede Auflösung neues Image nötig)

#### 4.4.1.2 Grundlinienkorrektur

Automatische Basislinienkorrektur, die auf alle Spektren des Images angewendet wird (kann alternativ auch nach der Datenaufnahme angewendet werden: *Prozesse – Grundlinienkorrektur*)

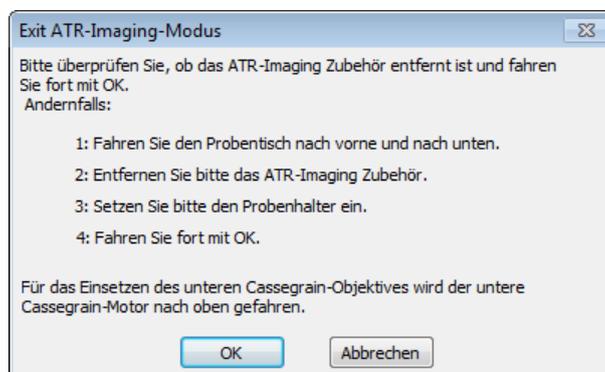






## 4.5 Wechsel zu Punktmessungen oder Imageaufnahmen

Der Wechsel vom ATR-Imaging Modus zurück zu Punkt- oder Imageaufnahmen erfolgt durch die Auswahl des entsprechenden Modus in der Steuerungsleiste (Betriebsmodus). Der Wechsel des Zubehörs wird über eine Schritt-für-Schritt-Anleitung in der Software unterstützt.



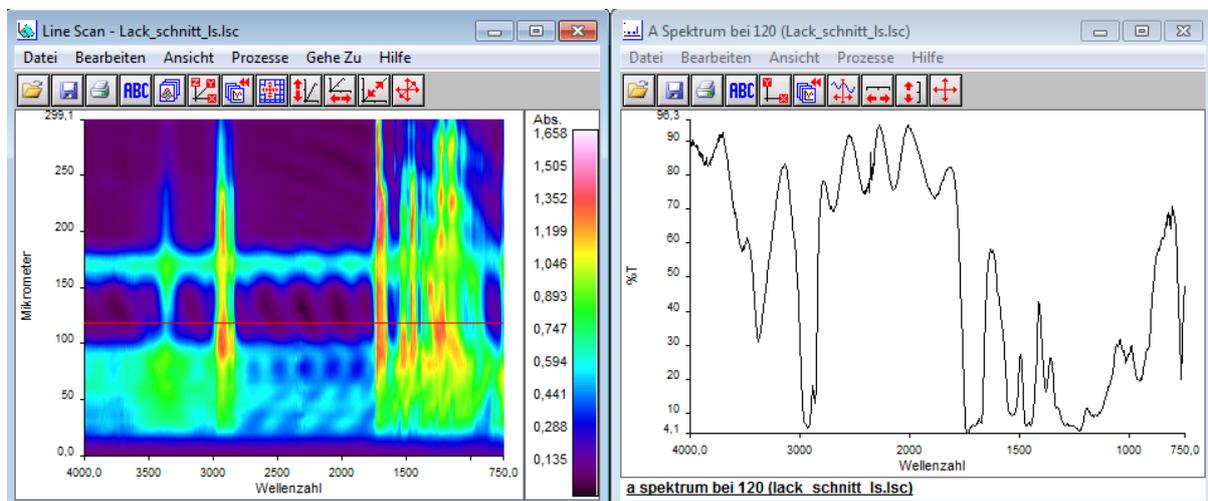
## 5 Auswertung von Einzelspektren

Einzelspektren können mit der Grundsoftware *Spectrum* bearbeitet oder ausgewertet werden. Die Spektren werden in Spectrum IMAGE als \*.sp-File gespeichert, welche in Spectrum10 direkt geöffnet werden können. Einzelspektren können aber auch über „drag&drop“ von SpectrumIMAGE nach Spectrum10 kopiert werden.

## 6 Auswertung eines LineScan

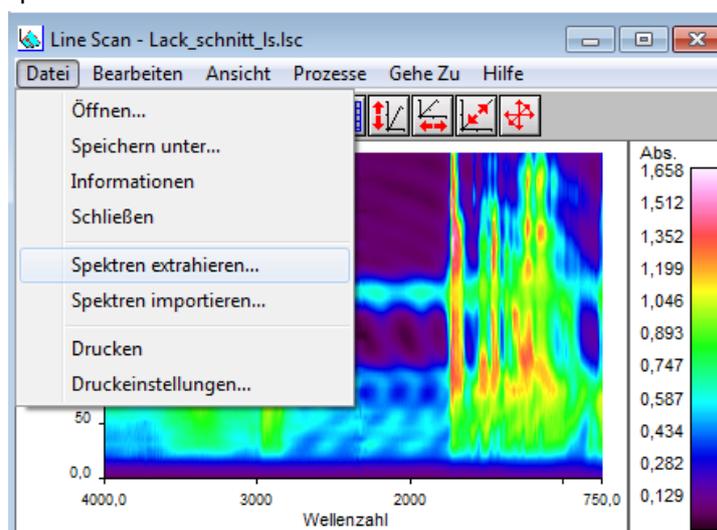
### 6.1 Darstellung von Spektren

Ansicht – Spektrum zeigen: Anzeige des aufgenommenen Spektrums an einer bestimmten Position des LineScans, diese kann über den Horizontal-Cursor im Image ausgewählt und beliebig verschoben werden



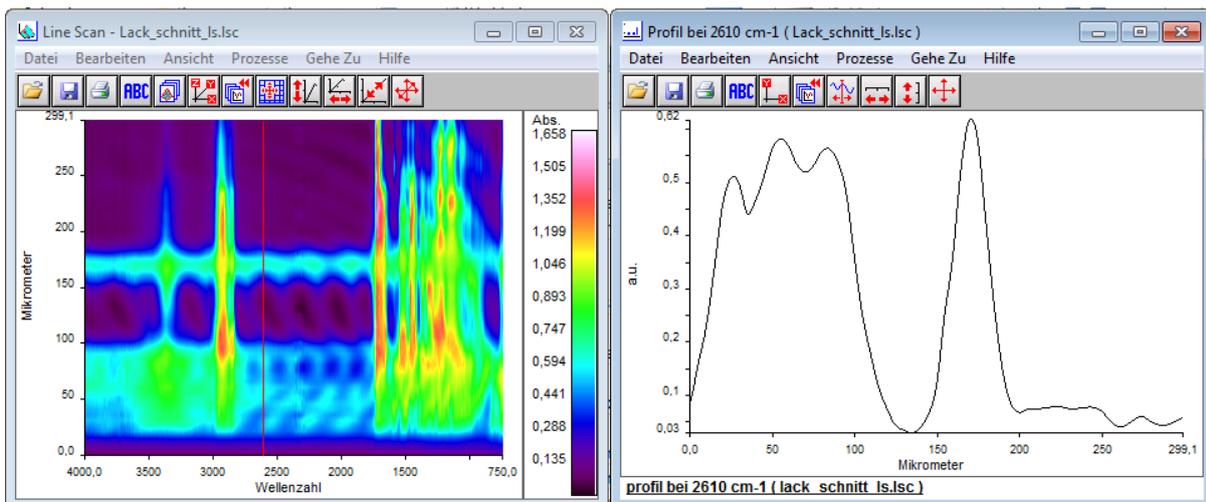
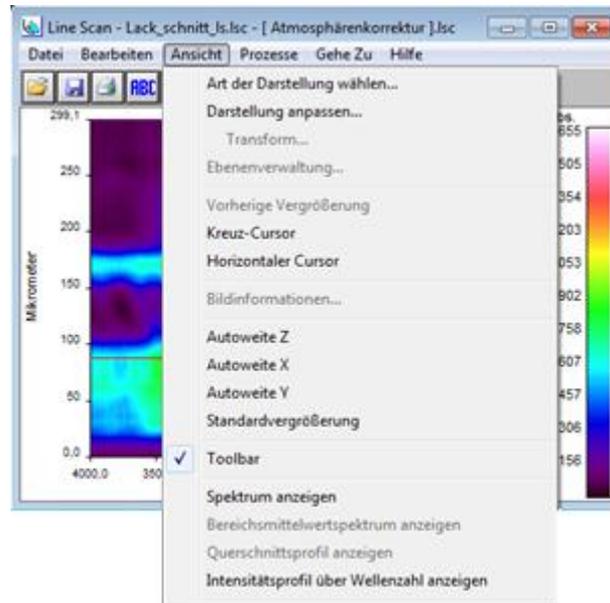
#### 6.1.1 Spektren extrahieren

Alle in einem LineScan aufgenommenen Spektren können mit der Funktion *Spektren extrahieren* in ein Zielverzeichnis exportiert werden.



## 6.2 Intensitätsprofil über Wellenzahl anzeigen

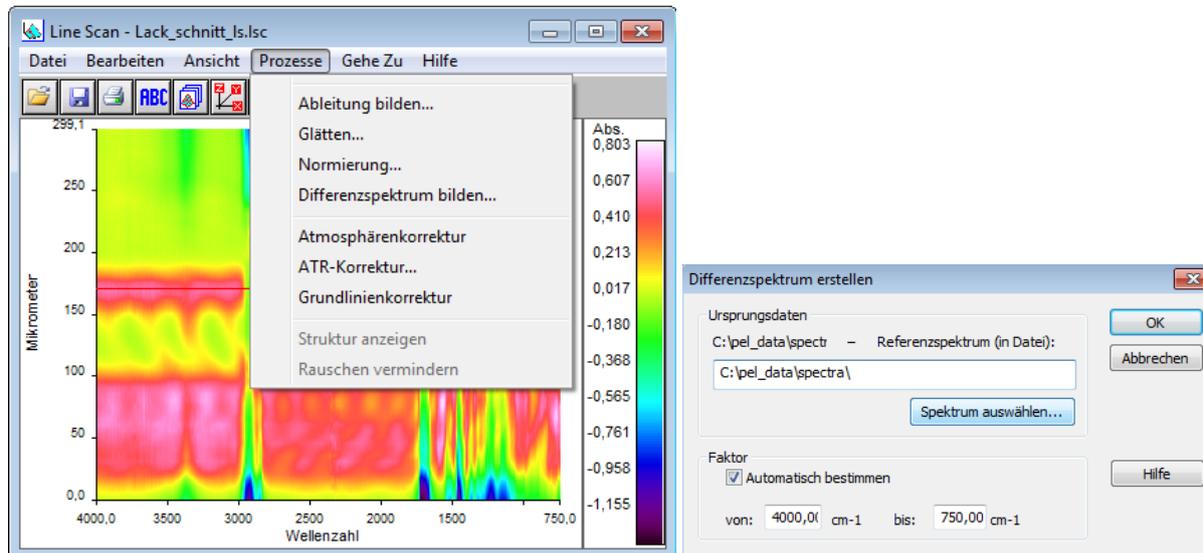
Zeigt das Profil der Absorptionsintensität einer bestimmten Wellenzahl über den gesamten LineScan an, Auswahl der Wellenzahl über den Vertikal- Cursor im Image



## 6.3 Differenzspektrum

Von allen aufgenommenen Spektren kann eine Differenz mit einem Referenzspektrum erstellt werden.

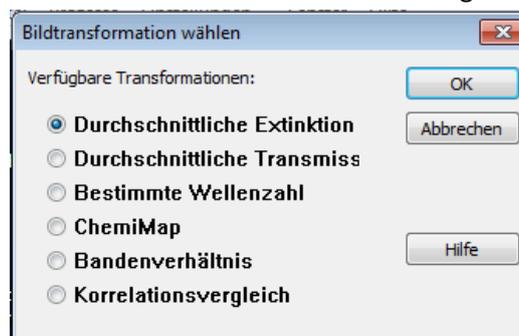
Prozesse – Differenzspektrum bilden



## 7 Auswertung von Mapping/Imaging-Dateien

### 7.1 Öffnen von Dateien

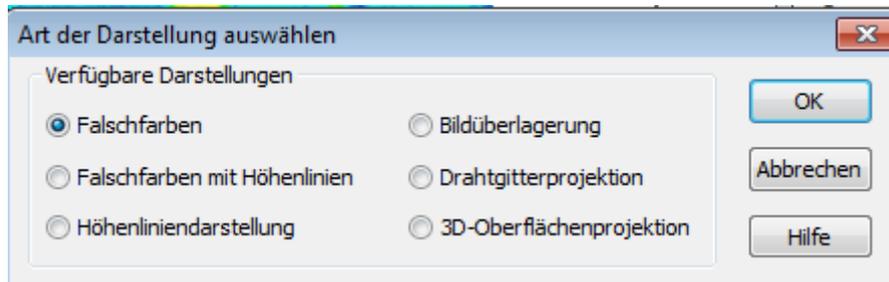
Gespeicherte Image/Map-Dateien können in verschiedenen Modi geöffnet werden:



- Durchschnittliche Extinktion – Darstellung der aufgenommenen Rohdaten, jedes Spektrum wird mit seiner absoluten Absorptionsintensität dargestellt
- Bestimmte Wellenzahl – Darstellung Intensitätsverteilung einer einzelnen Wellenzahl im gesamten Image/Map
- ChemiMap – Darstellung eines spezifischen Bandenbereiches (User-festgelegt oder auf eine Substanzklasse spezifisch)
- Bandenverhältnis – Darstellung Intensitätsverhältnis zweier Banden im Verhältnis
- Korrelationsvergleich: Darstellung Korrelationsverteilung eines Referenzspektrums mit dem gesamten Image/Map

## 7.2 Darstellung anpassen

Aufgenommene Mapping- oder Imagedaten können in verschiedenen Modi dargestellt werden.



## 7.3 Allgemeine Funktionsleiste



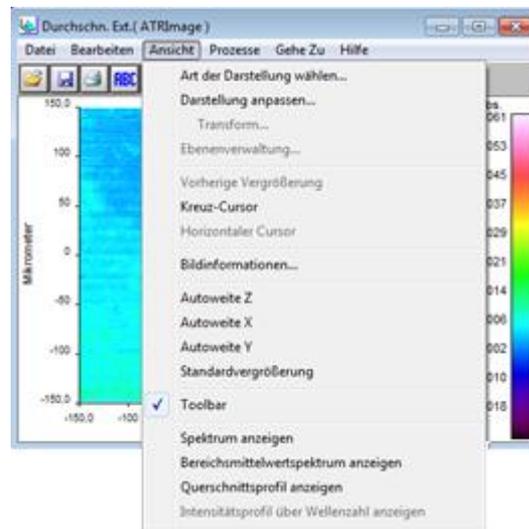
- 1 Öffnen
- 2 Speichern
- 3 Drucken
- 4 Text einfügen
- 5 Art der Darstellung
- 6 Darstellung anpassen
- 7 vorherige Vergrößerung
- 8 Kreuzcursor
- 9 Autoweite Z
- 10 Autoweite X
- 11 Autoweite Y
- 12 Standardvergrößerung

## 7.4 Darstellung von Spektren

Spektren können über verschiedene Wege dargestellt werden.

### 7.4.1 Drop-Down-Menü „Ansicht“

Spektren können an jedem beliebigen Messpunkt aus den Mapping- oder Imagedateien extrahiert werden.

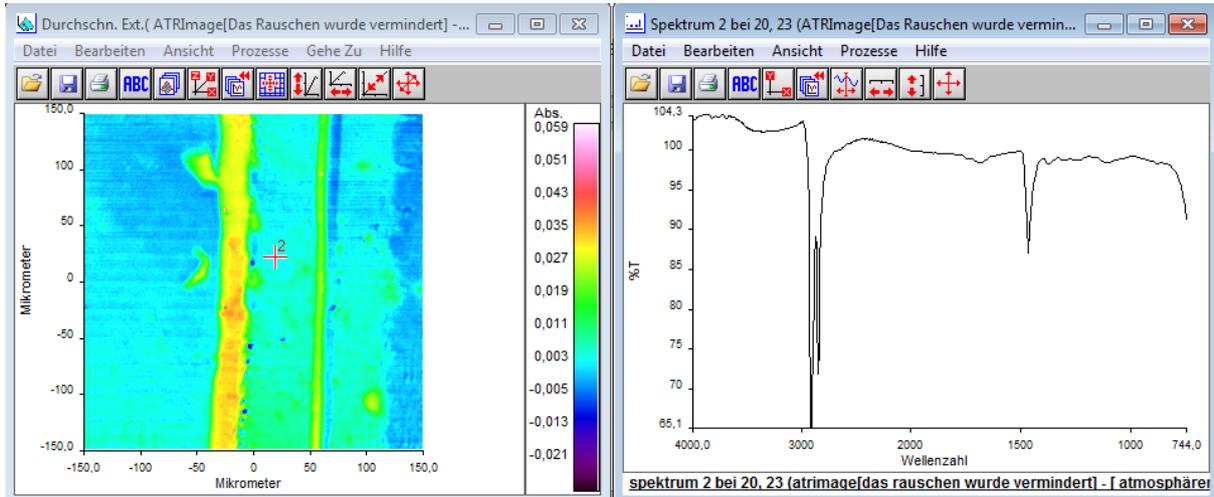


### 7.4.2 Allgemeine Funktionsleiste von Imagedateien

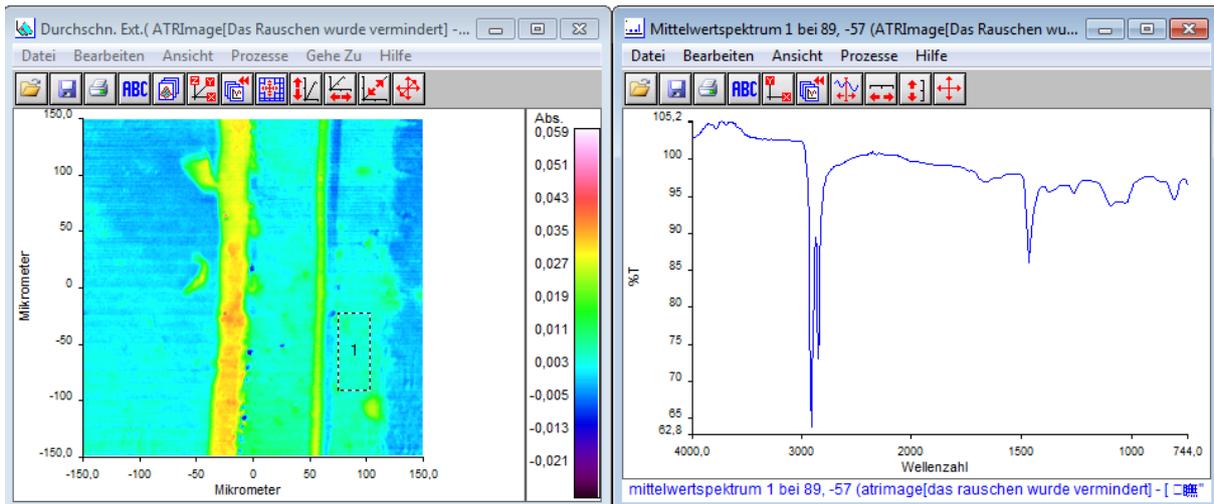


- 1 Öffnen
- 2 Speichern
- 3 Drucken
- 4 Text einfügen
- 5 Darstellung anpassen
- 6 vorherige Vergrößerung
- 7 Vertikaler Cursor
- 8 Autoweite X (Darstellung des Spektrums im gesamten Wellenzahlbereich)
- 9 Autoweite Y (Darstellung des Spektrums mit vollständigen Banden)
- 10 Standardvergrößerung (Darstellung des Spektrums in vollständiger X- und Y-Weite)

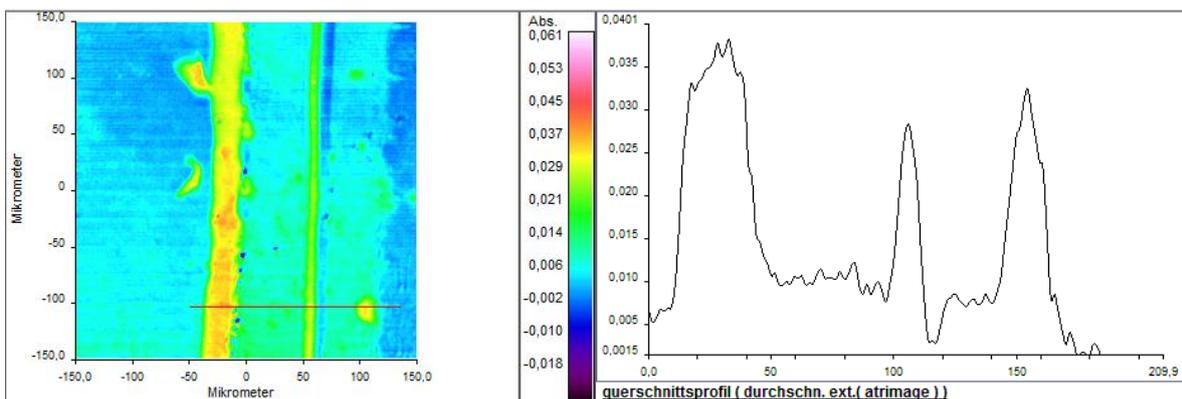
### 7.4.2.1 Spektrum anzeigen



### 7.4.2.2 Bereichsmittelwertspektrum anzeigen

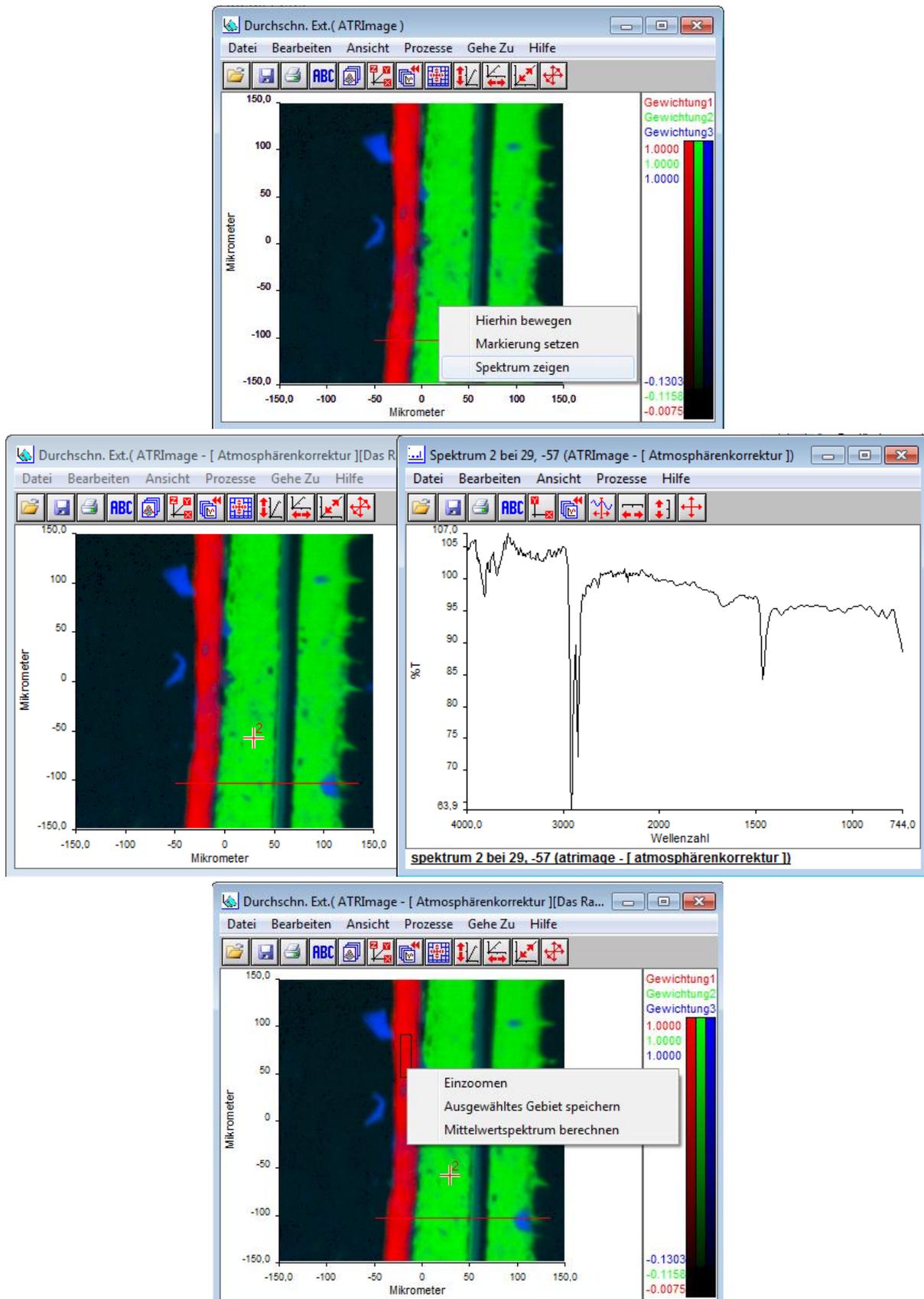


### 7.4.2.3 Querschnittsprofil anzeigen



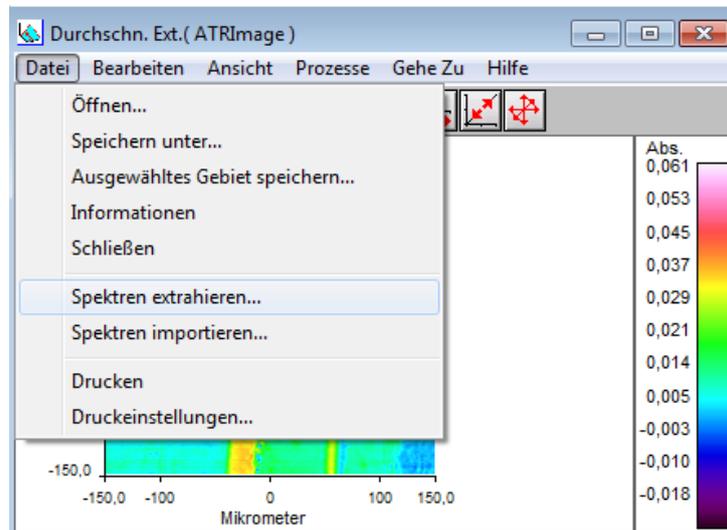
### 7.4.3 Funktion „Spektrum zeigen“

An Einzelpunkt von Interesse mit rechter Maus „Spektrum zeigen“ oder einen Bereich von Interesse markieren und „Mittelwertspektrum zeigen“

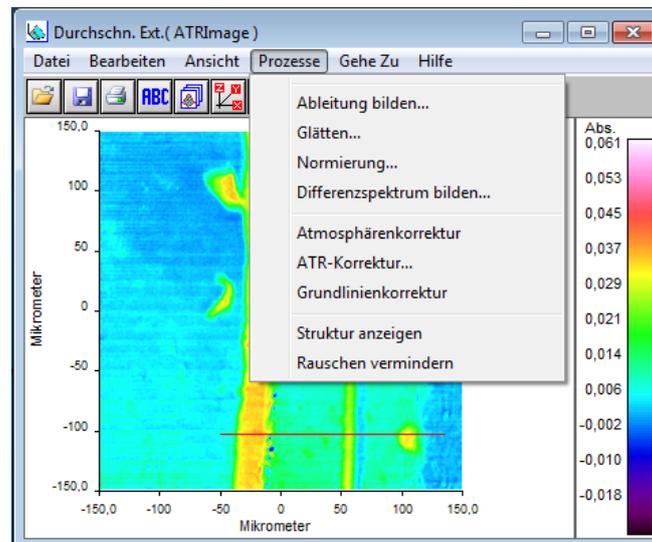


### 7.4.4 Spektren extrahieren

Alle in einer Map oder einem Image aufgenommenen Spektren können mit der Funktion *Spektren extrahieren* in ein Zielverzeichnis exportiert werden.



## 7.5 Prozesse zur Auswertung



### 7.5.1 Atmosphärenkorrektur

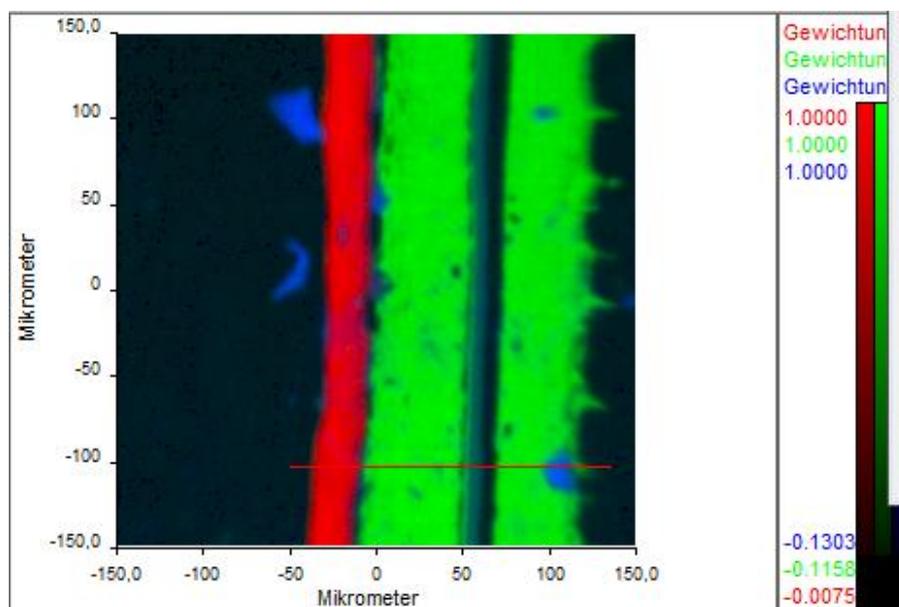
Vermindern der Wasserdampf- und CO<sub>2</sub>-Absorption in allen aufgenommenen Spektren der Map/Image

### 7.5.2 Rauschen vermindern

Vermindern des Rauschens in allen aufgenommenen Spektren

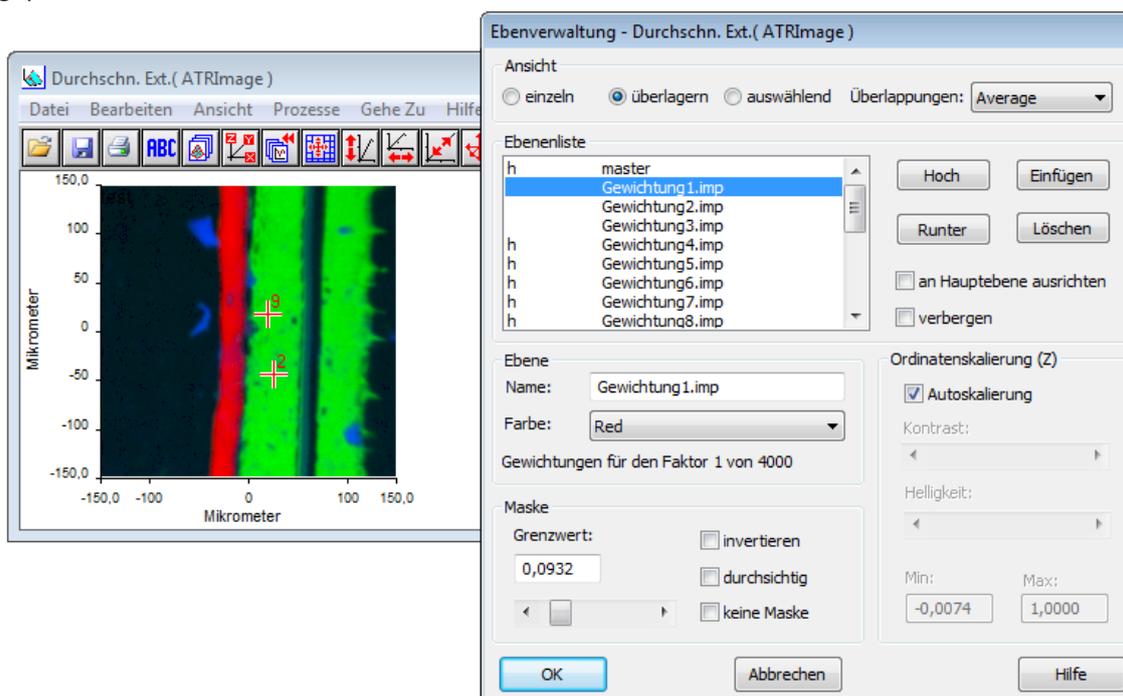
### 7.5.3 Struktur anzeigen

Auswertefunktion zur Analyse der chemischen Komponenten und ihrer Verteilung im Image/Map (Hauptkomponentenanalyse); eine Spezies von IR-Spektren wird mit einer Farbe dargestellt, dadurch ist eine direkte Aussage über die Anwesenheit differenzierbarer Komponenten und die Verteilung der verschiedenen Komponenten möglich

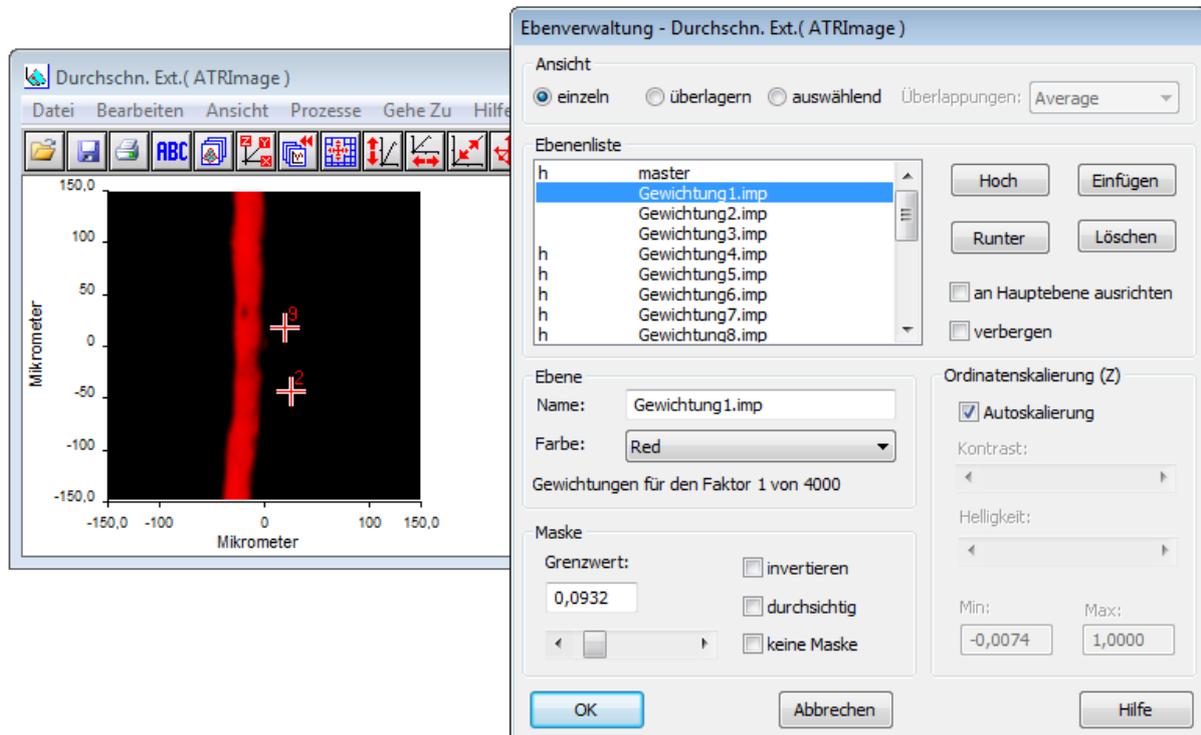


In der Ebenenverwaltung können die Parameter für die graphische Darstellung der Strukturverteilung bearbeitet werden.

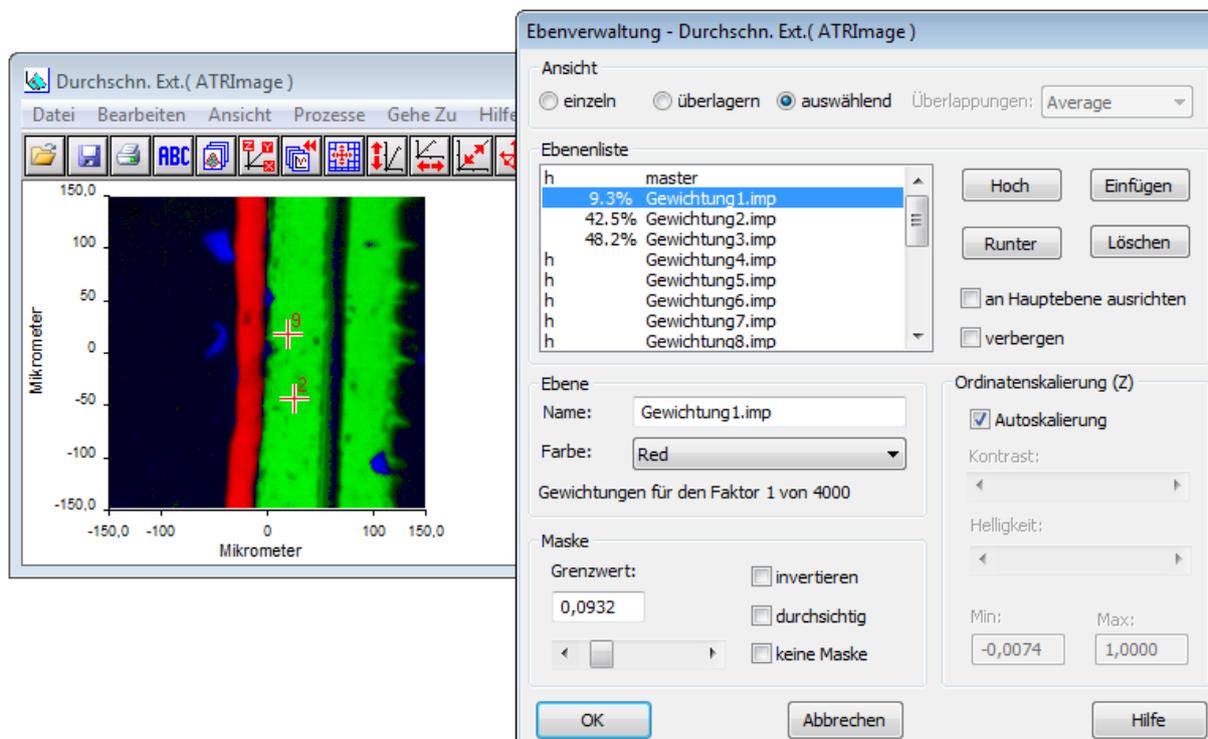
*Ansicht überlagern* zeigt die Verteilung aller ausgewählten Ebenen. Ebenen können über verbergen aktiviert oder deaktiviert(h in der Auflistung) werden. Die farbliche Darstellung kann individuell angepasst werden



*Ansicht einzeln* zeigt die Verteilung einzelner Ebenen und damit einzelner Strukturen.

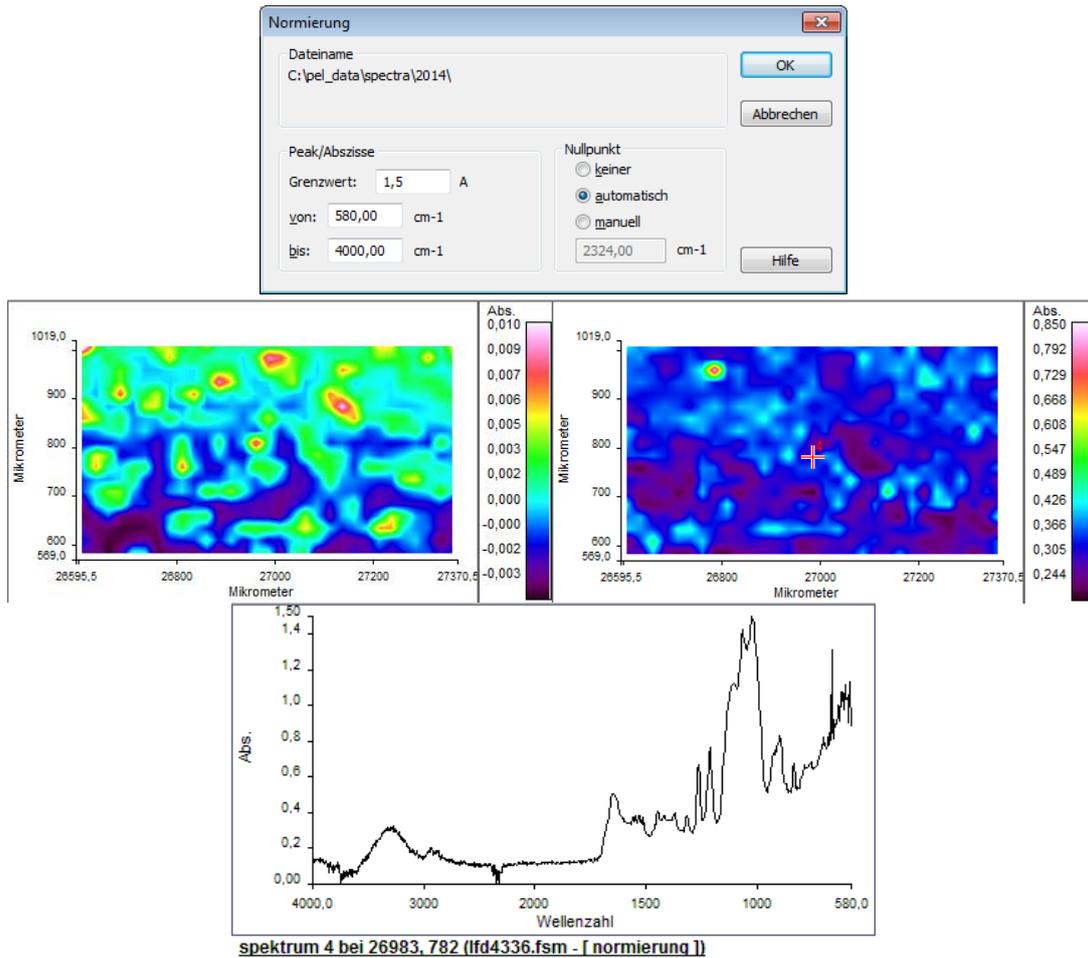


*Ansicht – auswählend* gibt zusätzlich eine Information über den Anteil einer Komponenten.



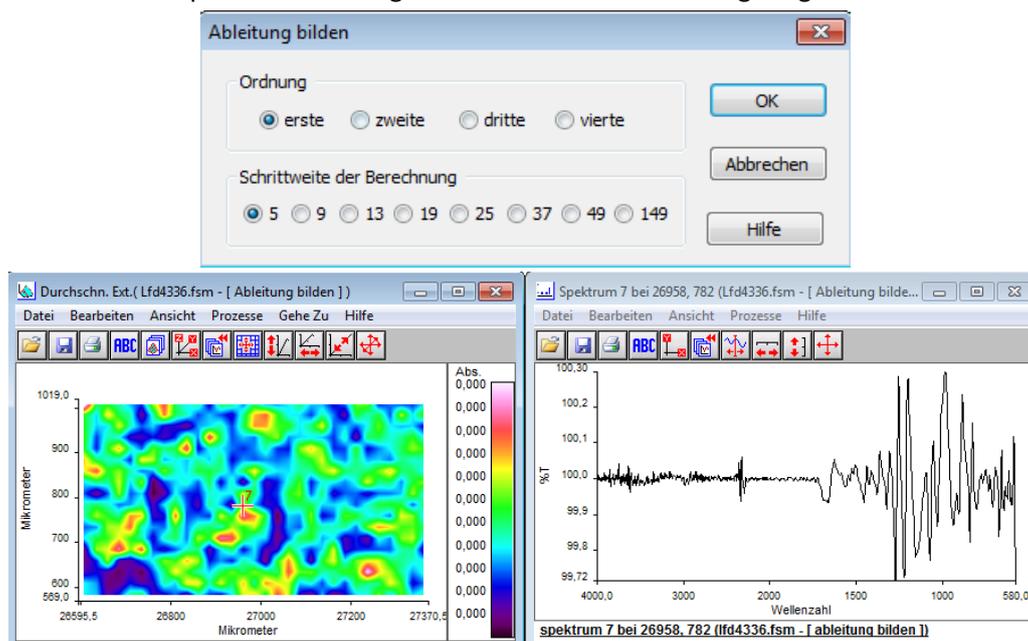
## 7.5.4 Normierung

Alle Spektren einer Map oder eines Images können auf einen Grenzwert normiert werden.



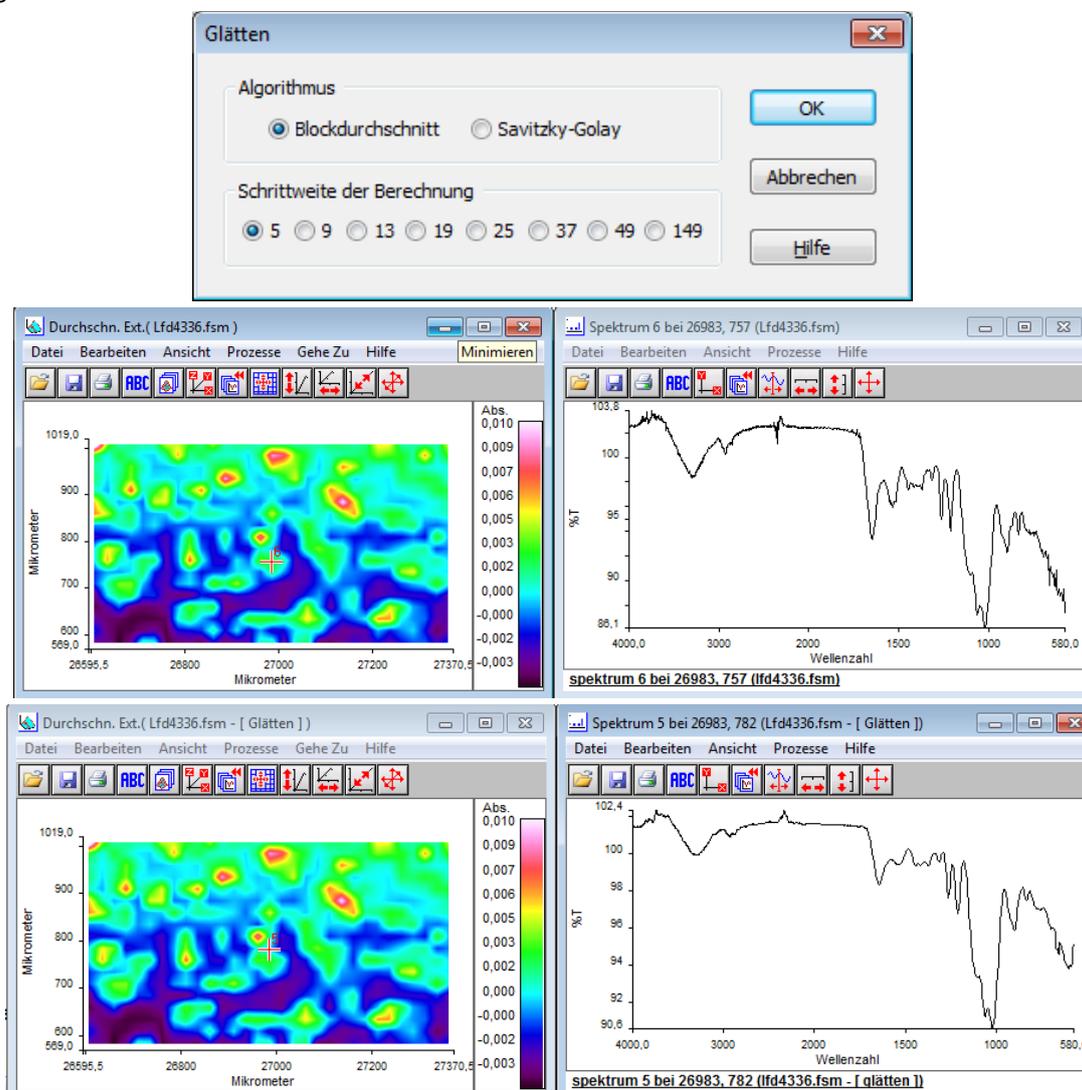
## 7.5.5 Ableitung bilden

Die Spektren einer Map oder eines Images können auch als Ableitung dargestellt werden.



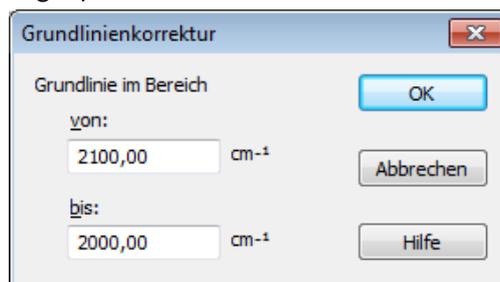
## 7.5.6 Glätten

Glätten ist eine Funktion zur Verminderung des Raschens in den Spektren einer Map oder eines Images.



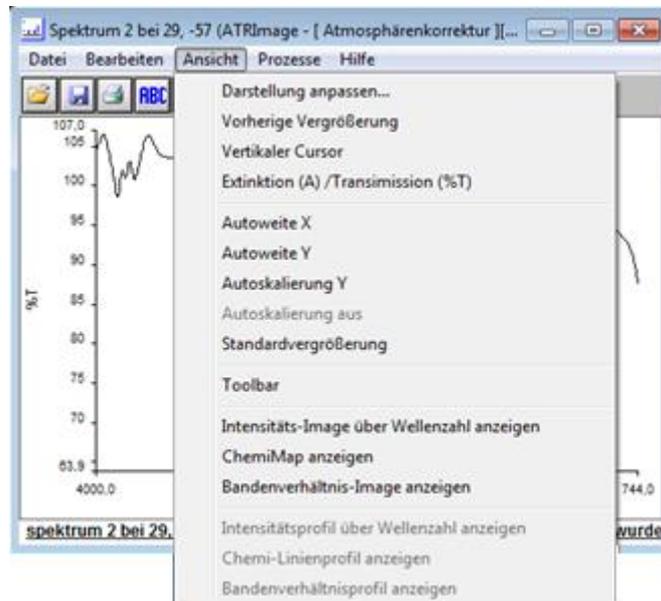
## 7.5.7 Grundlinienkorrektur

Bei der Grundlinienkorrektur handelt es sich um eine automatische Basislinienkorrektur, die auf alle Spektren der Datei angewendet werden (bei der Aufnahme mittels ATR Imaging kann die Grundlinienkorrektur bereits direkt nach der Datenaufnahme durchgeführt werden und muss nicht gesondert zur Auswertung erfolgen).



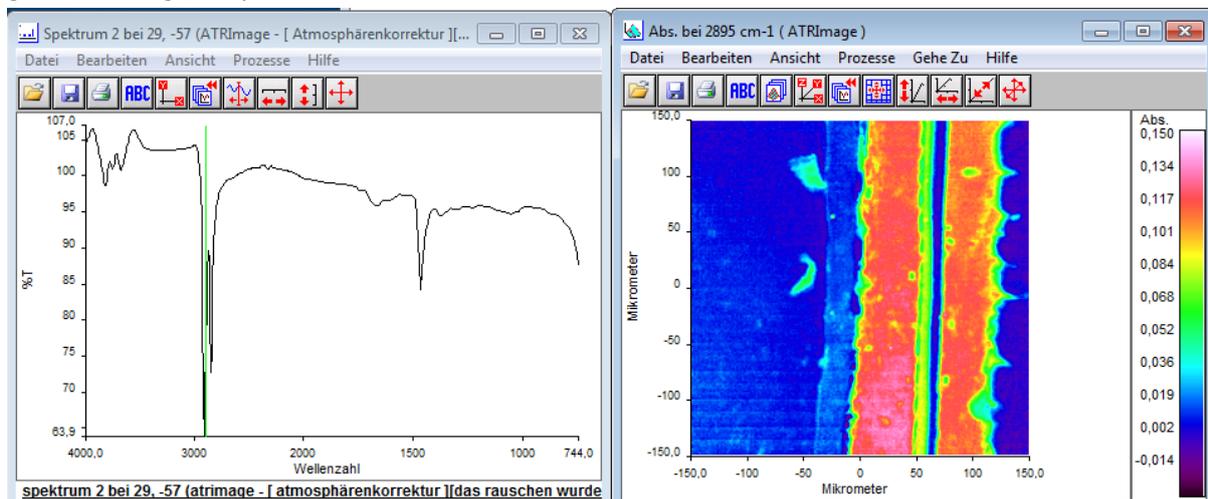
## 7.6 Graphische Auswertungen von Mapping- oder Imagedatein

Verschiedene Funktion zur Auswertung und graphischen Darstellungen von Verteilungen können über das Drop-Down-Menü „Ansicht“ ausgewählt werden.



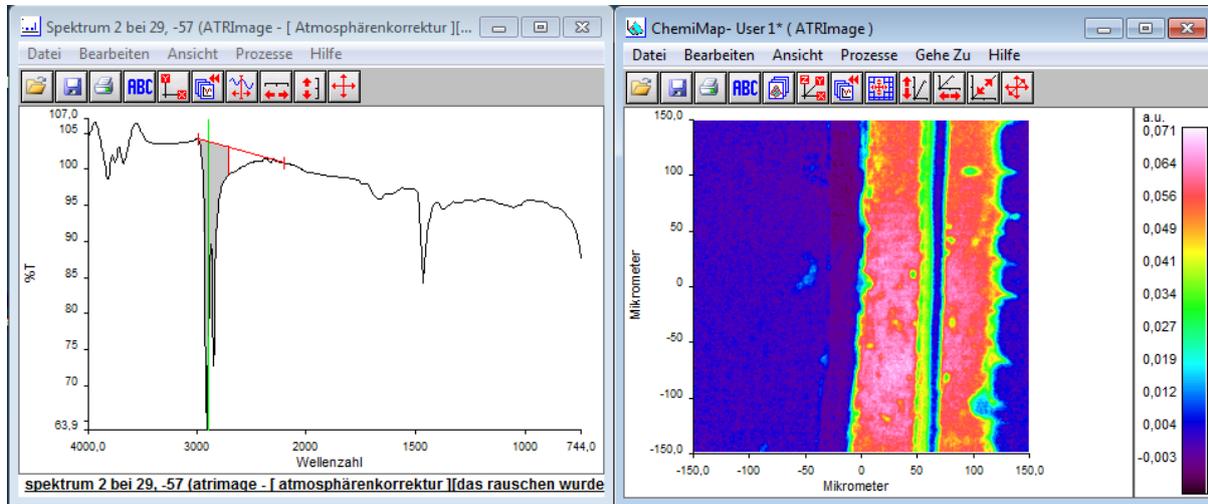
### 7.6.1 Intensitätsimage über Wellenzahl anzeigen

Intensitätsverteilung einer (durch verschieben des Cursors) definierbaren Wellenzahl über das gesamte Image/Map

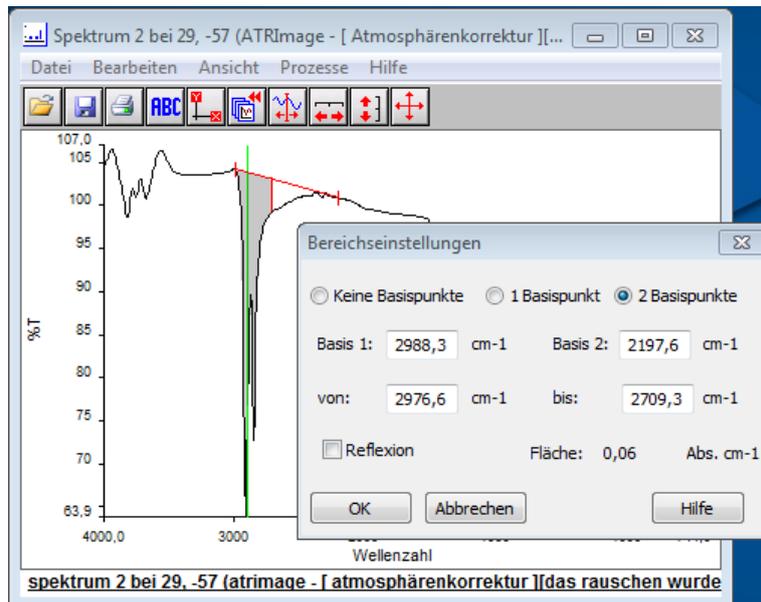


## 7.6.2 ChemiMap

Darstellung der Intensitätsverteilung eines definierten Bandenbereiches über das gesamte Image/Map, Basispunkte und Integrationsgrenzen können grafisch festgelegt werden oder auf spezifische Werte eingetragen



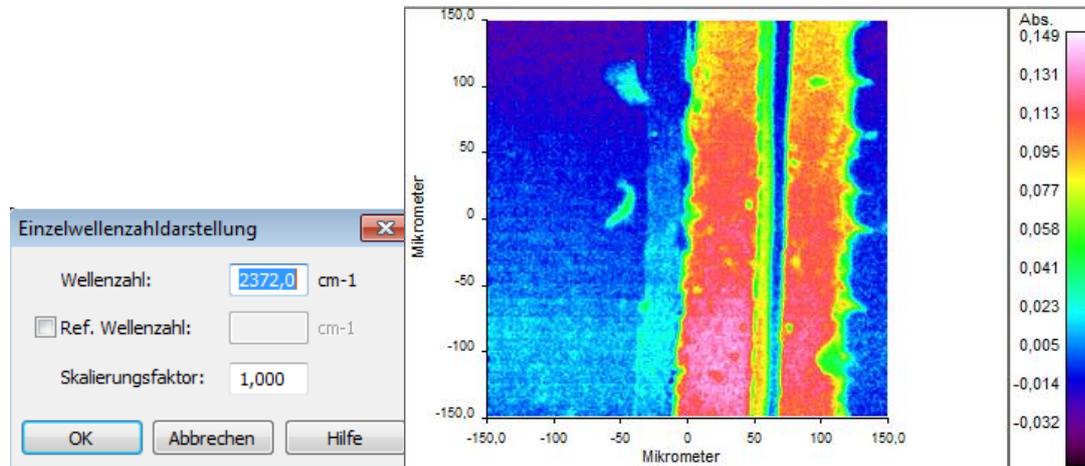
Die Parameter für diese Auswertung können individuell über die Eingabe im entsprechenden Dialogfenster oder interaktiv in der Grafik angepasst werden.



### 7.6.3 Einzelwellenzahldarstellung

Darstellung der Intensitätsverteilung einer zuvor definierten Wellenzahl

Datei (Grundfunktionsleiste SepctrumImage) – Öffnen – Bestimmte Wellenzahl; gewünschte Wellenzahl auswählen

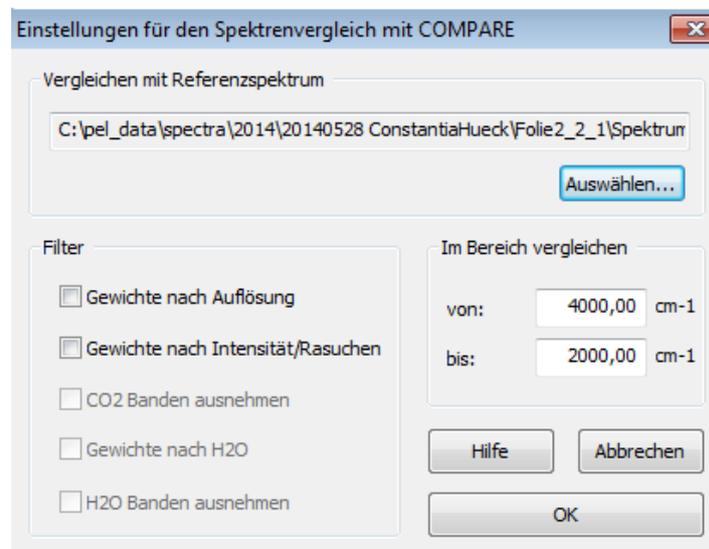


### 7.6.4 Korrelationsvergleich

Die Verteilung einer bestimmten Komponente/Referenzspektrums in der analysierten Probenfläche kann über einen Korrelationsvergleich visualisiert werden.

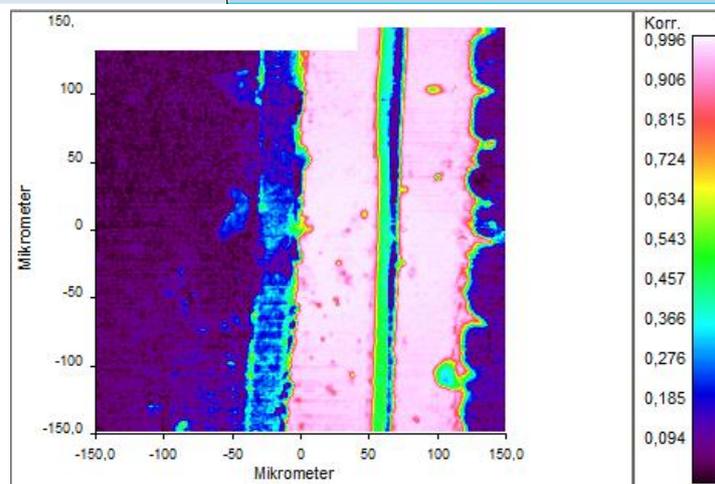
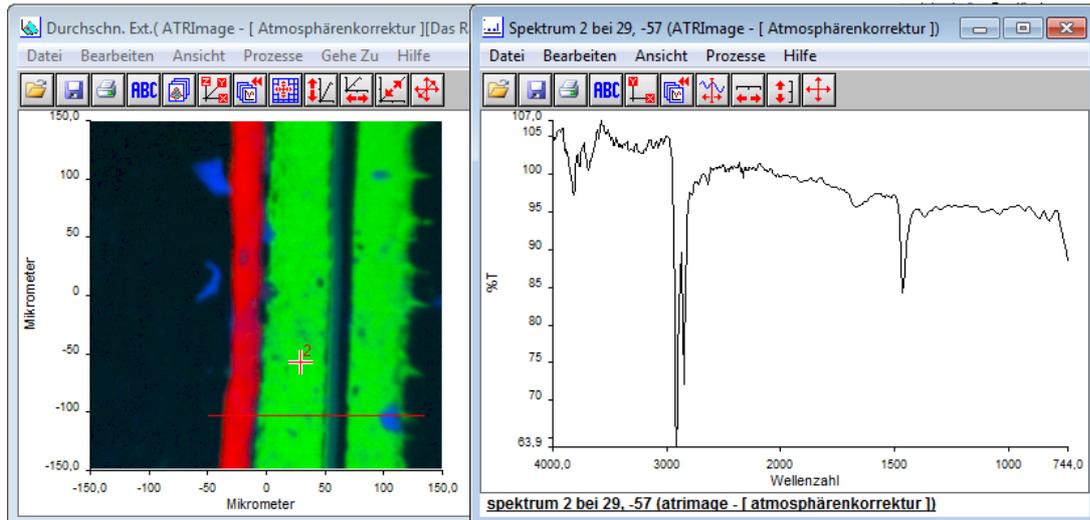
Datei (Grundfunktionsleiste SepctrumImage) – Öffnen – Korrelationsvergleich

Auswahl des Referenzspektrums sowie spezifischer Analyseparameter



The figure shows a software dialog box titled 'Einstellungen für den Spektrenvergleich mit COMPARE' with the following settings:

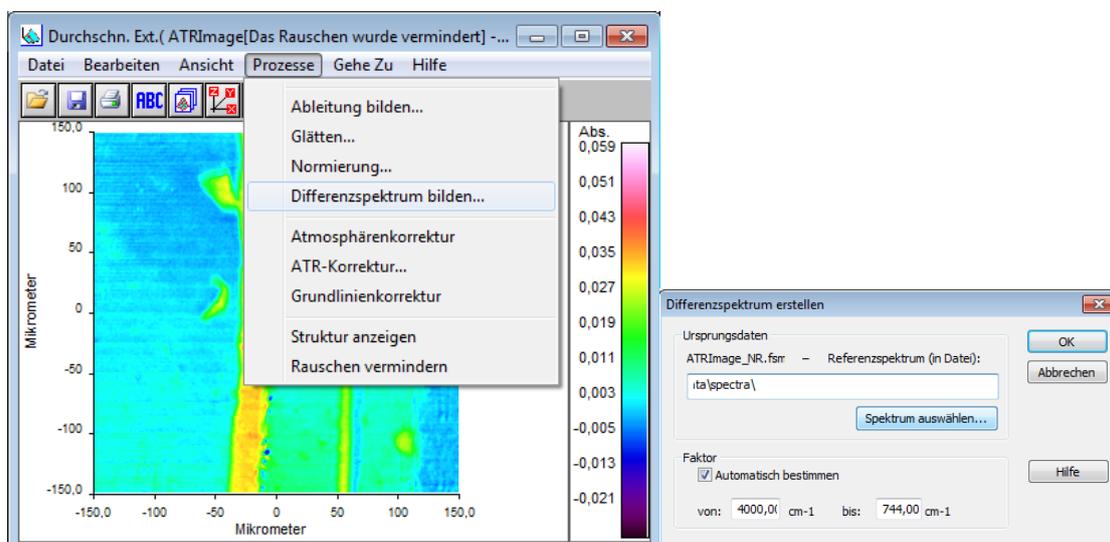
- Vergleichen mit Referenzspektrum: C:\pel\_data\spectra\2014\20140528 ConstantiaHueck\Folie2\_2\_1\Spektrum
- Auswählen... button
- Filter:
  - Gewichte nach Auflösung
  - Gewichte nach Intensität/Rasuchen
  - CO2 Banden ausnehmen
  - Gewichte nach H2O
  - H2O Banden ausnehmen
- Im Bereich vergleichen:
  - von: 4000,00 cm-1
  - bis: 2000,00 cm-1
- Buttons: Hilfe, Abbrechen, OK



### 7.6.5 Differenzspektrum

Von allen aufgenommenen Spektren kann eine Differenz mit einem Referenzspektrum erstellt werden.

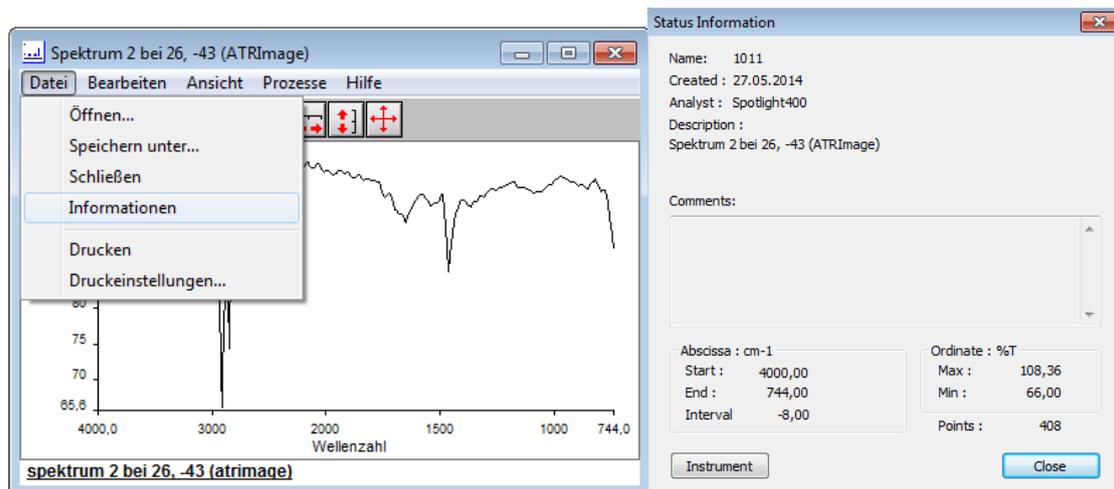
*Prozesse – Differenzspektrum bilden*



## 8 Dokumentation

### 8.1 Einzelspektren

Einzelspektren werden als \*.sp-File gespeichert, welche in Spectrum10 geöffnet werden können. Die \*.sp-Files enthalten alle Messparameter mit denen das Spektrum aufgenommen wurde (*Datei – Information*)

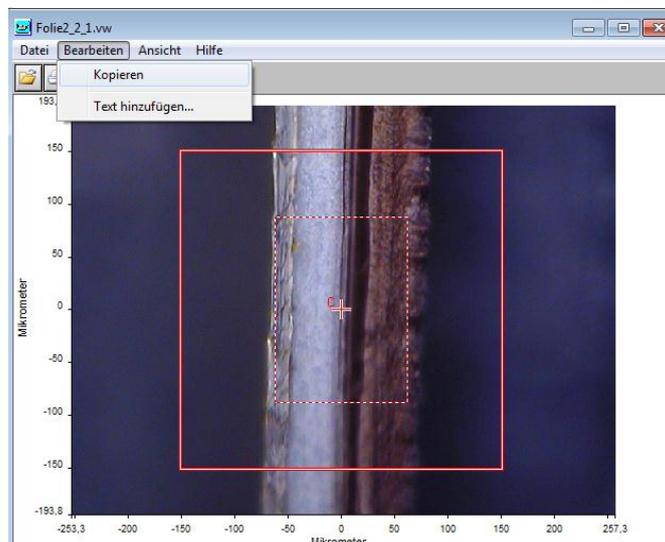


Unter Instrument, werden außerdem alle Informationen zu dem verwendeten Gerät gespeichert.

### 8.2 Visuelle Mikroskopaufnahmen/Übersichtsdarstellungen

Die visuellen Mikroskopaufnahmen und Übersichtsdarstellungen können als \*.vw-File gespeichert werden, welche weiterhin mit SpectrumIMAGE geöffnet werden können. Diese Dateien beinhalten auch dargestellte Markierungen oder LineScan-, Map- oder Imagegrenzen.

Außerdem können diese Darstellungen als \*.bmp-File gespeichert werden oder über *Bearbeiten – Kopieren* zum Beispiel in MS Office Dokumente eingefügt werden.



### 8.3 LineScan-, Map- oder Image-Dateien

LineScan Dateien werden als \*.ls-Datei gespeichert. Map- und Image-Dateien werden als \*.fsm-Datei gespeichert. Sowohl \*.ls- als auch \*.fsm-Dateien beinhalten nicht nur die aufgenommenen Spektren, sondern auch alle Messparameter und Geräteinformationen.

Alle Darstellungen der Rohdaten oder grafischen Auswertungen können über Bearbeiten – kopieren als Grafik zum in Beispiel MS Office Dokumenten eingefügt werden.

Über *Bearbeiten – Text einfügen* können außerdem Kommentare in die Dateien eingefügt werden.

